

К теории электронного спектра и сверхпроводимости медных оксидов как антиферромагнитных металлов

В.М. Локтев

*Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины
ул. Метрологическая, 14-б, г. Киев, 03143, Украина
E-mail: vloktev@bitp.kiev.ua*

Статья поступила в редакцию 8 декабря 2004 г.

Рассмотрен электронный спектр допированных медных оксидов исходя из явного учета антиферромагнитной структуры их основного состояния. Показано, что закон сохранения спина накладывает определенные ограничения на движение носителя, приводящие к тому, что он не может покинуть магнитную подрешетку, в которой родился. Сделана попытка сравнить полученную дисперсию зоны дырочной проводимости с имеющимися экспериментальными данными.

Розглянуто електронний спектр допованих мідних оксидів виходячи з явного урахування антиферромагнітної структури їх основного стану. Показано, що закон збереження спіну накладає певні обмеження на рух носія, які призводять до того, що він не може покинути магнітну підгратку, в якій народився. Зроблено спробу порівняти отриману дисперсію зони діркової провідності з наявними експериментальними даними.

PACS: 74.20.-z, 74.25.Jb, 74.72.-h

1. Изучение процессов и взаимодействий, лежащих в основе формирования электронного спектра высокотемпературных сверхпроводящих медных оксидов (ВТСП), остается среди актуальных проблем физики конденсированного состояния. В частности, имеется ряд публикаций (см., к примеру, недавние обзоры [1,2]), в которых представлены данные измерений методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) дисперсионных энергетических кривых $\epsilon(\mathbf{k})$ для подвижных (допированных) носителей в системах ВТСП. Оказалось, что в пределах первой зоны Бриллюэна, относящейся к парамагнитному (магниторазупорядоченному) состоянию ВТСП, соответствующие кривые имеют максимум не на ее краю (т.е. в точках $\mathbf{k} = (\pm\pi, \pm\pi)$ для безразмерных волновых векторов), как это следует из зонных расчетов в

рамках приближения линейной плотности (LDA расчетов), а в точках $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$.

В принципе, такое, вызвавшее дискуссию, поведение электронной дисперсии в купратах давно известно в теории экситонов малого радиуса в молекулярных кристаллах с двумя (и более) молекулами в элементарной ячейке [3]. При расчете спектра элементарных возбуждений (в первую очередь, экситонов) в модели «расширенных»* зон легко убедиться, что максимум, который следует отличать от экстремума, единой дисперсионной кривой $\epsilon(\mathbf{k})$ не на краях (т.е. внутри) зоны Бриллюэна не удвоенной решетки возможен лишь в случае малого давидовского расщепления. Малое расщепление экситонных зон в случае молекулярных кристаллов означает, что вклад в полную дисперсию, т.е. в величину $\epsilon(\mathbf{k})$, от так называемого межподрешеточно-

* Кавычки отражают тот факт, что в реальных (главным образом, классических) молекулярных кристаллах нет так называемой парафазы (т.е. высокосимметричной структуры), в которой могла бы восстанавливаться трансляционная симметрия для ближайших соседей. Для них в температурном интервале существования твердого состояния ее, как правило, нет, а потому спектры таких кристаллов всегда (адекватно ситуации) рассматриваются в модели нерасширенных бриллюэновских зон, т.е. в модели кристалла с нужным образом расширенной, а по сути — правильной его элементарной ячейкой.

го резонансного переноса френкелевского возбуждения меньше, чем от внутривузельного. Поэтому, казалось бы, естественное объяснение упомянутой зависимости $\epsilon(\mathbf{k})$ в системах ВТСП, связанное лишь со сворачиванием (сокращением) этой зоны, или мультипликацией кристаллической ячейки в упорядоченной фазе, хотя и является необходимым, как это утверждается в [2], не может быть признано вполне достаточным. Важно также соотношение между вероятностями (или амплитудами) различных процессов, определяющих движение возбуждения по решетке. В частности, формирование максимума кривой $\epsilon(\mathbf{k})$ для волнового вектора $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ и эквивалентных ему векторов (полную звезду составляют значения $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$) возможно лишь в случае отсутствия давидовского расщепления вообще, что легко подтвердить простейшим расчетом.

Действительно, рассмотрим плоскую немагнитную решетку, которую ради простоты, не ограничивающей общности, будем считать квадратной, и предположим, что на ближайших расстояниях по направлениям \mathbf{a} и \mathbf{b} ($\mathbf{a} \perp \mathbf{b}$, $|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}|$) находятся молекулы (ионы) из разных подрешеток. Запишем гамильтониан электронного возбуждения, которое может перемещаться как путем смены подрешетки (соответствующий такому движению параметр t_{NN} определяет, как упоминалось, давидовское расщепление энергетических зон в кристалле), так и оставаясь внутри каждой из подрешеток. Тогда в обсуждаемом случае немультимплицированной (одноузельной) периодической структуры этот оператор (в приближении сильной связи, справедливом для узкозонных кристаллов) может быть представлен выражением

$$H = - \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} t_{\mathbf{nm}} B_{\mathbf{n}}^+ B_{\mathbf{m}}, \quad (1)$$

где мы пренебрегли (как несущественной для расчета дисперсии $\epsilon(\mathbf{k})$) энергией возбуждения молекулы в кристалле. В (1) использованы следующие обозначения: $t_{\mathbf{nm}}$ — амплитуда резонансного взаимодействия между молекулами \mathbf{n} и \mathbf{m} , $B_{\mathbf{n}}^+$ и $B_{\mathbf{n}}$ — операторы рождения и уничтожения молекулярного электронного возбуждения. Переходя в (1) к плоским волнам и ограничиваясь в простейшем приближении лишь ближайшими (NN) и следующими за ними (NNN) соседями, немедленно получаем искомую дисперсионную кривую:

$$\epsilon(\mathbf{k}) \equiv \epsilon(k_x, k_y) = -2t_{NN}(\cos k_x + \cos k_y) - 4t_{NNN} \cos k_x \cos k_y, \quad (2)$$

в которой t_{NNN} (в отличие от t_{NN}) задает амплитуду внутривузельного прыжка.

В таком представлении величины энергий $\epsilon(0, 0) = -4(t_{NN} + t_{NNN})$ и $\epsilon(\pi, \pi) = 4(t_{NN} - t_{NNN})$ задают давидовский дублет, расщепление $|\epsilon(\pi, \pi) - \epsilon(0, 0)|$ между компонентами* которого полностью, как и должно быть, определяется величиной t_{NN} . Характерные же значения $\epsilon(0, \pi) = \epsilon(\pi, 0) = 4t_{NNN}$, наоборот, от нее не зависят. Наконец, в точке $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ энергия $\epsilon(\pi/2, \pi/2) = 0$, и для того чтобы (как минимум) имело место неравенство $\epsilon(\pi, \pi) < \epsilon(\pi/2, \pi/2)$, отвечающее появлению максимума на зависимости $\epsilon(\mathbf{k})$ внутри первой (удвоенной в данном случае) зоны Бриллюэна, должно удовлетворяться условие $t_{NN} < t_{NNN}$, свидетельствующее об относительной слабости межподрешеточной резонансной миграции возбуждения. Следует также добавить, что учет соседей из более далеких координационных сфер качественно не отразится на сделанном утверждении относительно вида дисперсионной кривой, если под t_{NN} понимать суммарный вклад в выражение для $\epsilon(\mathbf{k})$ от межподрешеточных процессов, а под t_{NNN} — такой же вклад от внутривузельных.

В молекулярных кристаллах оба этих «прыжковых» параметра имеют, как правило, диполь-дипольный (либо мультиполь-мультипольный) характер и в связи с этим могут достаточно сильно зависеть от взаимной ориентации молекул. Поэтому последнее неравенство, свидетельствующее о более сильном взаимодействии более удаленных молекул, вообще говоря, нельзя считать исключенным. Коль скоро оно выполняется, то из него, однако, не следует, что такой максимум на дисперсионной кривой окажется именно в точке $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$; это достигается только в предельном случае $t_{NN} = 0$ или, как утверждалось выше, когда межподрешеточный перенос возбуждения в силу каких-либо причин невозможен.

Фактически такая ситуация реализуется в коллинеарных антиферромагнитных диэлектриках с неэлементарным основным состоянием, где экситоны (включая магноны) могут рассматриваться как состояния малого радиуса [4–6]. В узкозонных системах с подобной магнитной структурой электронное (а также спиновое**) возбуждение d - или f -оболоч-

* В модели кристалла с удвоенной решеткой (см. [3]) обе они являются длинноволновыми и в большинстве случаев, известных для молекулярных кристаллов с двумя молекулами в элементарной ячейке, оптически активными.

** Напомним, что спиновым принято называть такое возбуждение электронной природы, при котором изменяется лишь проекция спина иона; так называемые электронные возбуждения сопровождаются изменением самой величины спина и/или других квантовых чисел [5,6].

ки парамагнитного иона, мигрируя по кристаллу, не может вследствие спинового запрета когерентно (что в данном случае означает резонансно) перейти из одной магнитной подрешетки в другую. Строгое выполнение закона сохранения спина при движении френкелевских возбуждений по магнитным подрешеткам изотропных и слабоанизотропных антиферродиелектриков на основе ионов переходных металлов однозначно подтверждается многочисленными экспериментальными данными, демонстрирующими наличие эффекта магнитного (экситонного) давидовского расщепления [7]. В полном соответствии с теорией (см. монографии [4,5]) оно (или, что то же самое, появление межподрешеточного переноса возбуждения) возможно только в неколлинеарных спиновых структурах и отсутствует в исходных коллинеарных.

В упомянутых оптических исследованиях неколлинеарность неелевских подрешеток индуцировалась внешним воздействием — сильным магнитным полем, была обратимой и хорошо контролируемой. Ее присутствие приводит к квадратично зависящему от внешнего поля (и от величины волнового вектора \mathbf{k}) расщеплению вырожденных экситонных зон относительно друг друга. В отсутствие же неколлинеарности они формируются в каждой из подрешеток независимо и являются вырожденными для всех \mathbf{k} . Заметим также, что в модели кристалла с немультимплицированной (другими словами, неуввоенной) элементарной ячейкой это соответствует (см. (2) при условии $t_{NN} = 0$) равенству $\varepsilon(0, 0) = \varepsilon(\pi, \pi)$, или снова-таки полностью симметричной относительно точки $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ кривой $\varepsilon(\mathbf{k})$, некоторые причины появления которой обсуждаются в обзорах [1,2].

2. Если вернуться к купратам, то уместно спросить чем физически (во всяком случае, с точки зрения распространения по магнитоупорядоченному пространству) отличается электронное возбуждение в антиферромагнитном диэлектрике от внесенного в его решетку носителя*? Можно предположить, что, по сути, ничем, поскольку и в той, и в другой ситуации речь, так или иначе, идет о переносе от узла к узлу ионного состояния, формально соответствующего незаряженному (нейтральному, или, точнее, бестоковому) возбуждению в первом случае и заряженному (токовому) во втором. Для обоих этих

случаев одинаковым представляется и соотношение параметров t_{NN} и t_{NNN}^{**} , обменная природа которых в антиферромагнитно упорядоченных кристаллах свидетельствует, что как для экситонов, так и для допированных носителей, скорее всего, $t_{NN} > t_{NNN}$. Тем не менее это неравенство не способствует когерентному переносу соответствующей квазичастицы (незаряженной либо заряженной) из одной магнитной подрешетки в другую. Отсутствие такого переноса обеспечивается спиновой частью полного матричного элемента (амплитуды) межподрешеточного перехода, а не равенством нулю самой величины t_{NN} , которая, на самом деле, является конечной и не малой.

Переход возбуждения между коллинеарными подрешетками (включаящий, что очевидно, и ближайших соседей) может осуществиться только в присутствии «контрагента» — спиновой волны, превращающей такой переход в некогерентный. Эта возможность, однако, не создает предпосылок для непосредственного вклада от подобного рода прыжков в ширину зоны свободного движения квазичастиц.

В приведенных выше рассуждениях для молекулярных (немагнитных) и ионных (магнитных) кристаллов неявно предполагалось, что возбуждения присутствуют (иными словами, возникают и остаются) на молекулах (ионах), образующих трансляционно-неэквивалентные в ориентационном (магнитном) отношении подрешетки. Поэтому применительно к ВТСП гораздо более сложным и принципиальным является вопрос, как создать носитель (речь, в первую очередь, идет о дырке) на ионах именно медной подсистемы, спины которых и конструируют неелевское (а не какое-либо другое) основное состояние [10].

В общепринятой схеме допированных ВТСП соединений с их слоистой структурой и токнесущими купратными плоскостями CuO_2 обычно считается, что внесенная допингом дырка принадлежит кислородной подсистеме, не имеющей прямого отношения к магнетизму (двухзонная модель Эмери [11] либо более общая многозонная *pd*-модель Гайдидея — Локтева [12,13]). Если это принять, и дырка в ВТСП действительно рождается и движется по ионам кислорода (т.е. «приписана» к кислородной зоне), то

* Мы не касаемся здесь таких особых случаев, как формирование ферронов в магнитных полупроводниках [8] либо явление двойного обмена в манганитах (сравнение последних с ВТСП можно найти в [9]), поскольку в купратах, насколько известно, магнитный порядок (по крайней мере, ближний) остается неизменным (т.е. антиферромагнитным) и коллинеарным. Кроме того, ввиду ионной природы связи в обсуждаемых кристаллах заряженное состояние (допированный носитель) может сильнее, чем незаряженное (экситон), деформировать исходную структуру (поляронный эффект). Соответствующие вопросы также выходят за рамки настоящей работы.

** В установившихся в физике ВТСП обозначениях t и t' соответственно.

необходимо заметить, что элементарная ячейка даже парамагнитной (т.е. неудвоенной) квадратной решетки CuO_2 имеет два трансляционно — неэквивалентных иона кислорода. При этом параметры (см. (2)) межкислородных перескоков, формирующие дисперсию кислородных зон, включая зону проводимости, таковы, что, скорее, $t_{NNN}^{\text{O}^-} = 0$ (либо $t_{NNN}^{\text{O}^-} \ll t_{NN}^{\text{O}^-}$), чем исключается интерпретация, адекватная наблюдаемому в ARPES [1,2], поведения дисперсии одиночной дырки в ВТСП.

Возникающую трудность (прямо или косвенно) обходят путем специально конструируемых состояний, получивших название синглетов Жанга–Райса [14] (см. также [15–20]). Они предписывают внесенной путем допирования кислородной дырке (в зависимости от направления ее спина) находиться в обменной связи с ближайшим ионом той медной подрешетки, с которым она, образовав синглет, понижает свою собственную энергию. Такие спиново-скоррелированные с антиферромагнитным упорядочением заряженные состояния могут двигаться по купратной плоскости, будучи связанными лишь с определенной для каждого из них магнитной подрешеткой. Нетрудно, однако, убедиться, что подобная квантово-механическая конструкция неустойчива, поскольку при формировании синглетного состояния спины «up» и «down» дырки входят в его линейную комбинацию равноправно, и после динамической перестановки кислородная дырка с противоположной проекцией спина «захочет» образовать такой же синглет с соседним локализованным спином иона меди из другой магнитной подрешетки.

Кроме того, кислород в купратной плоскости расположен геометрически абсолютно симметрично между ионами парамагнитной меди, принадлежащими разным магнитным подрешеткам. Это, в свою очередь, означает, что обменное поле от них на допированной дырке точно компенсируется и она, в известной мере, оказывается фрустрированной с точки зрения выбора оси квантования для своего спина. Его направление, эквивалентное для обеих подрешеток, установить нетрудно [13], но при этом кислородная дырка, даже гибридируясь с состояниями меди, может легко распространяться по купратной плоскости, не ощущая ее магнитного упорядочения, что, как отмечено выше, не позволяет объяснить приведенные данные ARPES экспериментов.

3. Сказанное предполагает поиск других вероятных причин, которые заставляли бы соединения из семейства медно-оксидных ВТСП испытывать переход в металлическое состояние так, чтобы подвижные носители появлялись в парамагнитной, а не в лигандной подсистеме. Небезынтересно при этом

обратить внимание на следующее: купраты принадлежат к тому же семейству перовскитов, что и манганиты [9], допирование которых вызывает металлизацию марганцевой подсистемы, или перезагрузку $\text{Mn}^{3+} \rightarrow \text{Mn}^{4+}$.

Если отмеченное подобие имеет место, то последнее непосредственно означает, что допированная дырка в плоскости CuO_2 есть ни что иное, как ион Cu^{3+} , или валентное состояние, которое вследствие большого потенциала ионизации двухвалентной меди Cu^{2+} , как правило, исключается из рассмотрения актуальных состояний. Подобное положение вещей отвечает действительности, и этот потенциал достаточно глубок, но экспериментальные свидетельства относительно дисперсии одиночных носителей, полученные в [1,2] и приведенные выше, дают веские основания думать, что требуют анализа ситуации, обеспечивающие стабилизацию и существование в ВТСП именно медных дырок.

К примеру, не в полной мере обсуждалась и ясна роль межионного кулоновского взаимодействия, которое, как хорошо известно, может прямо определять, какие ионные состояния объединяющихся химических элементов энергетически выгодны, а какие — нет. В связи с этим можно не без оснований предположить, что оно способно стабилизировать в решетке CuO_2 медные дырки, существование которых по сути было не столько показано, сколько постулировано еще в первой теоретической работе, посвященной ВТСП [21]. Точное решение этой многоэлектронной проблемы, судя по всему, может быть найдено лишь в результате сложных (возможно, численных [18]) расчетов с учетом различных p - и d -состояний, однако на качественном уровне оно представляется положительным в том смысле, что роль кулоновского взаимодействия для выгоды появления медных дырок по сравнению с кислородными является определяющей.

В самом деле, ионный состав ВТСП рассматривался многократно (см., например, обзоры [13,17]) и считается хорошо установленным. Медь, как известно, может находиться в трех (кроме нейтрального) зарядовых состояниях: Cu^+ , Cu^{2+} и (реже) Cu^{3+} . Первому отвечает полностью заполненная $3d$ -оболочка, или электронная конфигурация $3d^{10}$, иногда считающаяся вакуумной [18]; второму — одна дырка в ней и конфигурация $3d^9$; третьему, с двумя дырками, — $3d^8$. Кислород в решетке практически всегда имеет валентность, равную двум, или находится в состоянии O^{2-} .

Недопированные купратные плоскости демонстрируют такой ионный состав, в котором преимущественным является присутствие двухвалентных ионов и меди и кислорода, т.е. основным является

состояние $\text{Cu}^{2+}\text{O}^{2-}$. При этом возбужденной оказывается конфигурация с переносом заряда Cu^+O^- , которая сама по себе, т.е. без кулоновской составляющей, имеет более низкую энергию, чем первая. Другими словами, в отсутствие статического кулоновского притяжения приведенные конфигурации на шкале энергий поменяли бы свою последовательность. Такой вывод очевиден вследствие того, что чем выше степень положительной ионизации, тем больше работа выхода электрона из той или иной атомной оболочки.

С другой стороны, создание отрицательно заряженных ионов, наоборот, повышает энергию. Поэтому в электронном (а не в обычно используемом дырочном) представлении энергии актуальных ионных состояний подчиняются неравенствам: $E_{\text{Cu}^{3+}} > E_{\text{Cu}^{2+}} > E_{\text{Cu}^+}$ и $E_{\text{O}} < E_{\text{O}^-} < E_{\text{O}^{2-}}$ (причем последняя даже положительна, и в свободном состоянии ион O^{2-} абсолютно неустойчив). Опираясь на эти неравенства, а также энергии связи для рассматриваемых $3d$ - и $2p$ -оболочек меди и кислорода соответственно, можно оценить, что для невзаимодействующих ионов энергетически предпочтительным является состояние Cu^+O^- , поскольку их энергии удовлетворяют соотношению $E_{\text{Cu}^+} + E_{\text{O}^-} < E_{\text{Cu}^{2+}} + E_{\text{O}^{2-}}$, однако кулоновское притяжение в конфигурации $\text{Cu}^{2+}\text{O}^{2-}$ вчетверо сильнее, чем в конфигурации Cu^+O^- , где оно также отнюдь не мало (на межатомных масштабах $V_C^{\text{Cu}^+\text{O}^-} \sim e^2/a \sim -(5-6)$ эВ). Именно кулоновский сдвиг делает, в итоге, исходное (т.е. в первом по учету кулоновского вклада, статическом, приближении) состояние $\text{Cu}^{2+}\text{O}^{2-}$ более низким по энергии, или тем самым основным.

Важно, что дальнейшая квантово-механическая pd -гибридизация, хотя, безусловно, и смешивает различные состояния, и валентность того или иного иона в кристалле является, строго говоря, нецелочисленной, не меняет их взаимного расположения. Это значит, что только ионная связь, состоящая в последовательном учете всех внутри- и межионных кулоновских слагаемых, изменяет содержание предыдущего неравенства, превращая его в обратное: $E_{\text{Cu}^{2+}} + E_{\text{O}^{2-}} + V_C^{\text{Cu}^{2+}\text{O}^{2-}} < E_{\text{Cu}^+} + E_{\text{O}^-} + V_C^{\text{Cu}^+\text{O}^-}$. Вклад возбужденной конфигурации Cu^+O^- за счет подмешивания к основной при этом сохраняется, но он уже не может стать преобладающим. Ее присутствие может, в частности, отразиться на значении (в том числе, сокращении) среднего спина иона меди в магнитоупорядоченном состоянии, которое будет определяться не только сильно развитыми в низкоразмерных антиферромагнетиках

квантовыми флуктуациями, но и вкладом конфигурации Cu^+O^- .

Приближенно, однако, можно считать, что в своем основном — диэлектрическом — состоянии купратные плоскости содержат ионы Cu^{2+} и O^{2-} или по одной медной дырке на элементарную ячейку. Гетеровалентное допирование изменяет валентности некоторых ионов в кристалле, приводя к появлению подвижных зарядовых, в том числе дырочных, состояний в плоскостях CuO_2 . Появление допированной дырки есть ни что иное, как положительное изменение валентности того или иного иона купратной плоскости. Известно, что этому отвечает лишь две возможности: перезарядка $\text{Cu}^{2+} \rightarrow \text{Cu}^{3+}$, т.е. появление в кристалле преимущественно медной дырки; либо процесс $\text{O}^{2+} \rightarrow \text{O}^-$, или появление кислородной дырки. Тогда, сравнивая энергии возникающих конфигураций $\text{Cu}^{3+}\text{O}^{2-}$ и Cu^{2+}O^- , можно на основании тех же соображений сказать, что, вне сомнения, первая из них имеет более высокую энергию, являясь тем самым в допированной системе (без учета кулоновского притяжения) возбужденной.

Но если принять во внимание, что $V_C^{\text{Cu}^{3+}\text{O}^{2-}} \approx 3V_C^{\text{Cu}^{2+}\text{O}^-} \approx 6V_C^{\text{Cu}^+\text{O}^-}$, а также то обстоятельство, что в купратной плоскости у каждого иона меди 4 ближайших иона кислорода, тогда как у иона кислорода ближайших ионов меди 2, то можно надеяться, что возникающая разность статических кулоновских вкладов, составляющая, как нетрудно проверить, $\approx 20V_C^{\text{Cu}^+\text{O}^-}$, и здесь может стать определяющей. Иными словами, вполне вероятно, что среди возможных в медно-оксидных системах ВТСП ионных конфигураций $\text{Cu}^{3+}\text{O}^{2-}\text{Cu}^{2+}$, $\text{Cu}^{2+}\text{O}^-\text{Cu}^{2+}$, $\text{Cu}^{3+}\text{O}^-\text{Cu}^+$... и т.д., содержащих допированную дырку, первая, благодаря так называемому в теории экситонов кристаллическому сдвигу, окажется ниже других без учета гибридизации. Только такое расположение энергий исходных конфигураций может обеспечить существование в купратных слоях ВТСП «медеподобных» носителей и их распространение по двухподрешеточной, антиферромагнитно упорядоченной, коллинеарной структуре в соответствии с правилами движения в ней магнитных экситонов либо магнонов.

В той или иной степени такая картина находит свое отражение в ставшей известной tJ -модели [14–20,22], в рамках которой изучается движение носителя на антиферромагнитных квадратных решетках, но без прямого использования представления о когерентном внутри- и некогерентном межподрешеточном переносе. Тем не менее уместно заметить, что спектр свободных (допированных)

носителей в зоне проводимости этой модели зачастую задается выражением (2), которое, как уже упоминалось, не согласуется с данными ARPES.

В целом, следует иметь в виду, что при получении вторично квантованного гамильтониана удобно использовать базис одноузельных состояний. При этом последний вследствие *pd*-гибридизации (или, иначе, ковалентной связи) является недостаточно хорошо определенным. Поэтому предпринимались и предпринимаются попытки упростить задачу, ограничившись, например, достаточно популярным кластерным приближением [18–20] либо работая с функциями Ванье [19,20]. При этом, как правило, игнорируется кулоновская составляющая, которая конкурирует с эффектами ковалентности в том смысле, что способствует увеличению энергетического расстояния между различными одноионными *p*- и *d*-состояниями (см. выше). На основе такого предположения можно считать использование одноионного базиса физически уже оправданным. Это позволяет относительно просто обобщить на допированные ВТСП системы подход, который развит для описания бестоковых возбуждений в (анти)ферродиелектриках, содержащих элементы (в частности, переходные металлы) с незаполненной электронной оболочкой.

Нельзя при этом не обратить внимание, что магнитные диэлектрики (равно как и молекулярные кристаллы) относятся к классу сильно коррелированных (а следовательно, как говорилось, узкозонных) систем, в которых относительно большое расстояние между различными электронными состояниями (термами) существенно превышает ширины соответствующих зон. Поэтому независимо от того, какое — нейтральное или заряженное — состояние переходного иона рассматривается, можно в качестве нулевого приближения использовать одноионные состояния, в которых хаббардовское взаимодействие «маскируется» энергией, разделяющей соответствующие им разные дискретные (без учета процессов коллективизации) уровни.

4. Для вычисления дисперсии допированного носителя предположим, что рассматривается антиферромагнитная плоскость CuO_2 , в которой ионы меди находятся в состоянии $3d_{x^2-y^2}^*$, а ионы кислорода — в состояниях $2p$, образующих σ -связи с ближайшими ионами меди. Тогда, как хорошо известно [11–13,17], основными кинетическими процессами, в которые вовлечены как исходные, так и внесенные электроны, являются гибридационные *pd*- и прямые *pp*-перескоки. Благодаря последним в кристал-

ле формируются (4 либо 2 в зависимости от того, какая модель — удвоенной или не удвоенной — решетки используется для расчета) сравнительно широкие *p*-зоны свободного движения кислородных носителей. Через эти зоны происходят и виртуальные перескоки, обеспечивающие косвенный — андерсоновский — обмен локализованных (вследствие одноузельного — хаббардовского — отталкивания) *d*-электронов в диэлектрической фазе, и такие, что соответствуют токовому движению допированных дырок, поскольку прямое перекрытие *d*-состояний является пренебрежимо малым.

Сохранение в гамильтониане гибридованных *p*- и *d*-зон при одновременном учете сильных как одно-, так и межузельных электронных корреляций, делает расчет его спектра очень сложным. Поэтому обычно *p*-зоны исключаются по считающемуся малым отношению $t_n^{pd}(\mathbf{k})/\Delta E$, где $t_n^{pd}(\mathbf{k})$ — параметр *pd*-гибридизации иона меди, находящегося в *n*-м узле, с кислородной зоной, ΔE — характерная разность энергий между начальным ионным и виртуальным зонным состояниями, включающая все необходимые кулоновские взаимодействия. Эта процедура приводит по сути к гамильтониану *tJ*-модели с уже достаточно узкими зонами перемещения допированных зарядов по магнитоупорядоченному пространству. Особенность этого спинового пространства состоит в том, что эффективный перенос коллективизированных (допированных) *d*-дырок (ионов в состоянии $3d^8$) и гейзенберговское взаимодействие между составляющими его локализованными спинами (принадлежащими ионам той же меди, но в состоянии $3d^9$) осуществляются не только между ближайшими, а и более удаленными соседями, что есть прямое следствие перекрытия, или коллективизации, виртуальных *p*-состояний.

Тогда, считая *pd*-гибридизационные процессы исключенными, можно представить эффективный «*d*-дырочный» гамильтониан ВТСП системы в виде:

$$H_d = \varepsilon_d \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\sigma_{\mathbf{n}}} d_{\mathbf{n}\sigma_{\mathbf{n}}}^+ d_{\mathbf{n}\sigma_{\mathbf{n}}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \sum_{\sigma_{\mathbf{n}}, \sigma_{\mathbf{m}}} t_{\mathbf{nm}} \langle \sigma_{\mathbf{n}} | \sigma_{\mathbf{m}} \rangle d_{\mathbf{n}\sigma_{\mathbf{n}}}^+ d_{\mathbf{m}\sigma_{\mathbf{m}}}, \quad (3)$$

где ε_d — энергия *d*-уровня иона в кристалле; $d_{\mathbf{n}\sigma_{\mathbf{n}}}^+$ и $d_{\mathbf{n}\sigma_{\mathbf{n}}}$ — ферми-операторы рождения и уничтожения *d*-электрона на узле *n* с проекцией спина $\sigma_{\mathbf{n}}$ ($= \pm 1/2$) в собственной (локальной) системе координат; $t_{\mathbf{nm}}$ — матричный элемент перехода носи-

* Другое актуальное *d*-состояние, $d_{3z^2-r^2} \equiv d_{z^2}$, которое также может занимать как исходная, так и допированная дырка и роль которого анализировалась в [12,18], для простоты пока опускаем.

теля между ионами \mathbf{n} и \mathbf{m} ; $\langle \sigma_{\mathbf{n}} | \sigma_{\mathbf{m}} \rangle$ — «интеграл перекрытия» спиновых функций на разных узлах. Поскольку движение носителя происходит в магнитоупорядоченной среде, то ее можно характеризовать гамильтонианом гейзенберговского типа [10,23]:

$$H_{\text{exch}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} (J_{\mathbf{nm}} S_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{m}} + \Delta J_{\mathbf{nm}} S_{\mathbf{n}}^Z S_{\mathbf{m}}^Z). \quad (4)$$

В операторе (4) $J_{\mathbf{nm}}$ — обменный интеграл между локализованными в узлах \mathbf{n} и \mathbf{m} спинами $S = 1/2$ ионов меди, который по той же причине, что и величина $t_{\mathbf{nm}}$, может быть отличным от нуля и не только для ближайших соседей; $\Delta J_{\mathbf{nm}}$ — константа анизотропии, обеспечивающая в соответствии с экспериментальными данными легкоплоскостной тип исходной магнитной структуры ВТСП систем; $S_{\mathbf{n}}$ и $S_{\mathbf{n}}^Z$ — операторы \mathbf{n} -го спина и его Z -ой проекции.

Поскольку носитель рождается и движется в среде, где уже имеются спины, распределенные по всем узлам, это обстоятельство требует непосредственно учета. Как и в теории экситонов, магнитный порядок может быть последовательно включен в рассмотрение введением вместо операторов $d_{\mathbf{n}\sigma_{\mathbf{n}}}^+$ либо $d_{\mathbf{n}\sigma_{\mathbf{n}}}$ операторов Хаббарда $X_{\mathbf{n}}^{q_1 q_2} (= (X_{\mathbf{n}}^{q_2 q_1})^+)$ [24]; в них q_1 и q_2 отвечают квантовым числам (включая спиновые) иона с разным, отличающимся на одну или две единицы, числом электронов. Именно между такими состояниями происходят «переходы», порождаемые действием ферми-операторов $d_{\mathbf{n}\sigma_{\mathbf{n}}}^+$ и $d_{\mathbf{n}\sigma_{\mathbf{n}}}$.

В случае введения в систему акцепторов, как это имеет место в ВТСП с дырочным типом допирования, число дырок на узле при рождении на нем носителя меняется с одной на две. Так что с достаточной степенью точности можно считать, что $d_{\mathbf{n}\sigma_{\mathbf{n}}}^+ = X_{\mathbf{n}}^{2\bar{\sigma}_{\mathbf{n}}}$, где двойка соответствует заполнению этого состояния двумя носителями, а $\bar{\sigma}_{\mathbf{n}} \equiv -\sigma_{\mathbf{n}}$ — одним. При этом pd -гибридизация проявляет себя в том, что появившаяся на том или ином ионе в кристалле дырка не остается локализованной и начинает перемещаться согласно процессам, разрешенным гамильтонианом (3). Заметим, что в гибридной tJ -модели, где также учитываются лишь одно- и двукратно заполненные состояния, иногда говорят

об их принадлежности к синглетной (в гибридной tJ -модели иногда говорят о двукратном заполнении состояний в синглетной pd -зоне) [17,19]. Тем самым гамильтониан (3), описывающий движение допированных и невзаимодействующих между собой носителей дырочного типа, приобретает вид:

$$H_d^{\text{hole}} = \varepsilon_d \sum_{\mathbf{n}} X_{\mathbf{n}}^{22} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \sum_{\sigma_{\mathbf{n}}, \sigma_{\mathbf{m}}} t_{\mathbf{nm}} \langle \sigma_{\mathbf{n}} | \sigma_{\mathbf{m}} \rangle X_{\mathbf{n}}^{2\bar{\sigma}_{\mathbf{n}}} X_{\mathbf{m}}^{\bar{\sigma}_{\mathbf{m}}^2}. \quad (5)$$

Это выражение несколько отличается от использованного, к примеру, Плакидой [25] при изучении обменного механизма ВТСП в пределе сильных межэлектронных корреляций, соответствующем предположению об отсутствии в допированной исходно магнитной системе ионов без носителей, а точнее — наличии в ней носителей электронного типа. Имеющееся в виду отличие состоит в том, что оператор (5) явно — через интегралы перекрытия $\langle \sigma_{\mathbf{n}} | \sigma_{\mathbf{m}} \rangle$ — содержит информацию о начальной $\bar{\sigma}_{\mathbf{m}} = \pm 1/2$ и конечной $\bar{\sigma}_{\mathbf{n}} = \pm 1/2$ проекциях ионов в узлах \mathbf{n} и \mathbf{m} , между которыми происходит перескок. Это, в свою очередь, позволяет определить проекцию спина движущегося по магнитной решетке носителя. С помощью тех же величин (интегралов перекрытия) на следующих этапах расчета (см. [5,6]) можно выразить и характер магнитного упорядочения (включая отсутствие такового) в кристалле.

Чтобы найти эти интегралы, положим, что спины всех ионов в своем основном (без внесенного путем допирования носителя) состоянии имеют проекции $\sigma_{\mathbf{n}} = 1/2$, относящиеся по определению к собственным осям квантования, и перейдем от соответствующих им локальных систем координат в лабораторную систему. Тогда в предположении о том, что оси квантования лабораторной и \mathbf{n} -й локальной систем координат направлены под углом $\theta_{\mathbf{n}}$ друг к другу, запишем спиновые функции в лабораторной: $|\sigma_{\mathbf{n}}\rangle = |\sigma\rangle \cos(\theta_{\mathbf{n}}/2) + 2\sigma|\bar{\sigma}\rangle \sin(\theta_{\mathbf{n}}/2)$, где спиновая переменная $\sigma = \pm 1/2$ задает спиновые проекции в лабораторной системе координат. Используя это представление в выражении (5), приходим к гамильтониану

$$H_d^{\text{hole}} = (\varepsilon_d - \mu) \sum_{\mathbf{n}} X_{\mathbf{n}}^{22} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \sum_{\sigma_{\mathbf{n}}, \sigma_{\mathbf{m}}} t_{\mathbf{nm}} \left[\cos \frac{\theta_{\mathbf{n}} - \theta_{\mathbf{m}}}{2} (X_{\mathbf{n}}^{21/2} X_{\mathbf{m}}^{1/2,2} + X_{\mathbf{n}}^{2,1/2} X_{\mathbf{m}}^{1/2,2}) + \sin \frac{\theta_{\mathbf{n}} - \theta_{\mathbf{m}}}{2} (X_{\mathbf{n}}^{2,1/2} X_{\mathbf{m}}^{1/2,2} - X_{\mathbf{n}}^{2,1/2} X_{\mathbf{m}}^{1/2,2}) \right], \quad (6)$$

в который мы для полноты включили химический потенциал μ , необходимый при изучении проводящих и сверхпроводящих свойств металлических систем независимо от того, являются ли они металлами по происхождению или каким-либо путем приобрели проводимость. Полученный таким образом оператор Гамильтона медных оксидов практически совпадает с гамильтонианом модели двойного обмена, справедливой для манганитов. Этим совпадением еще раз подчеркивается отмеченное в [9] сходство между этими, вообще говоря, разными физическими системами, содержащими как основные элементы переходные металлы и кислород и являющимися *допированными* металлами. При этом в (6) углы $\theta_{\mathbf{n}}$ и $\theta_{\mathbf{m}}$ относятся к локальным, а не подрешеточным системам координат. Видно, что амплитуды процессов с сохранением и несохранением (переворотом) спиновой проекции носителя зависят от взаимного направления спина в начальном и конечном состояниях. Подобная запись есть следствие не только использования локальных осей квантования, но и отражает определенную физику, давая возможность уже на уровне, казалось бы, одночастичного гамильтониана различать одночастичные, двухчастичные и другие процессы.

В самом деле, пусть допированная купратная плоскость сохраняет (хотя бы ближний) антиферромагнитный порядок. Коль скоро он имеется, то для двухподрешеточного случая это значит, что имеется (безразмерный) вектор магнитной структуры $\mathbf{Q}_{AFM} = (\pm\pi, \pm\pi)$ [26], определяющий направления локальных осей квантования: $\theta_{\mathbf{n}} \approx \mathbf{Q}_{AFM} \mathbf{n}$, причем равенство соответствует дальнему упорядочению. Поскольку при этом спиновые переменные операторов Хаббарда относятся к локальным системам координат, то видно, что лишь первое слагаемое под второй суммой в выражении (6) отвечает так называемым резонансным межзонным переходам (или когерентному транспорту) носителя. Нерезонансные (некогерентные) переходы можно выделить в этом гамильтониане, если воспользоваться следующим известным свойством алгебры хаббардовских операторов: $X_{\mathbf{n}}^{q_1 q_2} = X_{\mathbf{n}}^{q_1 q_3} X_{\mathbf{n}}^{q_3 q_2}$ [17,24]. Оно позволяет формально точно ввести спиновые операторы, согласно равенствам $X_{\mathbf{n}}^{2,1/2} = X_{\mathbf{n}}^{2,1/2} X_{\mathbf{n}}^{1/2,1/2} \equiv X_{\mathbf{n}}^{2,1/2} S_{\mathbf{n}}^+$ и аналогично $X_{\mathbf{n}}^{1/2,2} = S_{\mathbf{n}}^- X_{\mathbf{n}}^{1/2,2}$, а с их помощью привести (уже приближенно) гамильтониан (6) к виду

$$H_d^{\text{hole}} = H_{\text{coh}} + H_{\text{int}}^{(1)} + H_{\text{int}}^{(2)}, \quad (7)$$

в котором

$$H_{\text{coh}} = (\varepsilon_d - \mu) \sum_{\mathbf{n}} X_{\mathbf{n}}^{2,2} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} t_{\mathbf{nm}} \cos \frac{\mathbf{Q}_{AFM}(\mathbf{n} - \mathbf{m})}{2} X_{\mathbf{n}}^{2,1/2} X_{\mathbf{m}}^{1/2,2} \quad (8)$$

— оператор свободного движения дырки по антиферромагнитно упорядоченной среде;

$$H_{\text{int}}^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} t_{\mathbf{nm}} \sin \frac{\mathbf{Q}_{AFM}(\mathbf{n} - \mathbf{m})}{2} \times \times (X_{\mathbf{n}}^{2,1/2} X_{\mathbf{m}}^{1/2,2} S_{\mathbf{m}}^- - X_{\mathbf{n}}^{2,1/2} X_{\mathbf{m}}^{1/2,2} S_{\mathbf{n}}^+) \quad (9)$$

и

$$H_{\text{int}}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} t_{\mathbf{nm}} \cos \frac{\mathbf{Q}_{AFM}(\mathbf{n} - \mathbf{m})}{2} X_{\mathbf{n}}^{2,1/2} X_{\mathbf{m}}^{1/2,2} S_{\mathbf{n}}^+ S_{\mathbf{m}}^- \quad (10)$$

— операторы некогерентных межзонных переходов с участием одного и двух соответственно спиновых возбуждений. Операторы (9) и (10) могут рассматриваться как возможные источники обменных — одно- и двухмагнонного (впервые изученного в работе [27]) — механизмов сверхпроводимости с высокой критической температурой. Однако, как недавно показано Вальковым и др. [28], трехцентровые слагаемые, определяющие процессы электрон-спиновой взаимодействия $H_{\text{int}}^{(1)}$, приводят к существенному уменьшению температуры возникновения сверхпроводящей фазы с d -волновым типом симметрии параметра порядка*. При этом источником притяжения считается гейзенберговское межспиновое взаимодействие, или оператор (4), который входит в полный гамильтониан допированного антиферромагнетика [17,25,28,29], причем величина $J_{\mathbf{nm}}$ не ограничена лишь ближайшими соседями. Следует при этом заметить, что будучи полученными по теории возмущений, это взаимодействие и, соответственно, константа $J_{\mathbf{nm}}$ по сути относятся лишь к исходным локализованным спинам и описывают именно их (а не *подвижных* носителей) прямую обменную связь.

Тем не менее между допированными носителями в антиферромагнетике имеется специфическое притяжение, на которое (по-видимому, впервые) указа-

* В принципе, такой вывод согласуется с результатом Ахизера и Померанчука, которые показали, что обмен магнонами приводит к отталкиванию между носителями в синглетных каналах [30]. С другой стороны, оператор (4) может служить причиной формирования магнитополяронных состояний и, соответственно, появления особенности в плотности квазичастичных состояний [30,31].

но в работе [32] (см. также [22,33,34]). Речь идет также об обменном взаимодействии, но только для таких носителей, которые находятся в разных магнитных подрешетках и являются *ближайшими* соседями, то есть $\mathbf{n} - \mathbf{m} = \pm \mathbf{a}$ или $\mathbf{n} - \mathbf{m} = \pm \mathbf{b}$. Легко убедиться, что величина притяжения в такой — синглетной — паре носителей равна гейзенберговскому обмену ($J(\equiv J_{\mathbf{nn}\pm\mathbf{a}} = J_{\mathbf{nn}\pm\mathbf{b}}$), а соответствующий ему оператор может быть представлен выражением:

$$H_{\text{attr}} = -J \sum_{\mathbf{n}, \rho = \mathbf{a}, \mathbf{b}} X_{\mathbf{n}}^{2,2} X_{\mathbf{n}+\rho}^{2,2}. \quad (11)$$

Оно не зависит ни от спиновых переменных, ни от углов $\theta_{\mathbf{n}}$ и $\theta_{\mathbf{n}+\rho}$, поскольку допированные дырки (как, впрочем, и электроны) в антиферромагнетике с $S = 1/2$ относятся к таким ионным состояниям, которые являются бесспиновыми (напомним, что в простейшей однозонной модели Хаббарда их спин $S = 0$). Очевидно, что оператор H_{attr} обеспечивает *незапаздывающее* притяжение между носителями, движущимися по разным магнитным подрешеткам, в том числе такое, что приводит к анизотропному свехпроводящему параметру порядка. Полный гамильтониан допированных носителей в антиферромагнетике представляет собой сумму выражений (7) и (11) и для когерентно движущихся носителей имеет вид

$$H = H_{\text{coh}} + H_{\text{attr}}. \quad (12)$$

Дальнейшее рассмотрение свехпроводящих свойств допированной антиферромагнитной системы, описываемой гамильтонианом (12), может быть проведено стандартным путем (см., например, [13,17,25]), и мы на них останавливаться не будем. Отметим лишь, что отсутствие дальнего магнитного порядка в металле (аналогично случаю экситонов в диэлектриках с частичным магнитным либо ориентационным разупорядочением [35,36]) приводит к тому, что как нормальная, так и аномальная его фермионные функции Грина превращаются в свертку, одна из составляющих которой определяется коррелятором спиновых проекций в разных узлах решетки. Как показано в [37], его учет может привести к неполюсному поведению функции Грина, а следовательно, к нефермижидкостному поведению подсистемы допированных носителей в антиферромагнитном металле без дальнего спинового упорядочения. Заметим также, что если он имеет пониженную пространственную размерность, то при расчете упомянутых гриновских функций необходимо учитывать еще один множитель: коррелятор фаз параметра порядка [37]. Однако анализ влияния обоих типов (раз)упорядочения на свехпроводящие

свойства магнитного двумерного металла, модель которого адекватна случаю медных оксидов, выходит за рамки настоящего сообщения и будет проведен отдельно.

5. Рассмотрим, наконец, искомые дисперсионные характеристики свободных носителей, которые даются оператором (8). Тогда, как нетрудно убедиться, координационные «сферы» в квадратной решетке определяются векторами ρ_j ; при этом $\rho_1 = \pm \mathbf{a}, \pm \mathbf{b}$, $\rho_2 = \pm (\mathbf{a} \pm \mathbf{b})$, $\rho_3 = \pm 2\mathbf{a}, \pm 2\mathbf{b}$ и т.д. Переходя теперь во втором слагаемом оператора H_{coh} к фурье-компонентам и учитывая, что в трансляционно инвариантной среде $t_{\mathbf{nm}} = t(|\mathbf{n} - \mathbf{m}|) = t(\rho_j) \equiv t_j$, приходим к простой зависимости

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_d + \sum_j t_j \cos \mathbf{k}\rho_j \cos \frac{Q_{AFM}\rho_j}{2}. \quad (13)$$

Из нее непосредственно следует, что вклад в формирование дисперсии свободного носителя дают лишь те соседи, для которых $\cos(Q_{AFM}\rho_j/2) \neq 0$. В рассматриваемом случае двухподрешеточного антиферромагнетика с квадратной решеткой таковыми, в частности, являются вторые и третьи соседи, относящиеся к той же магнитной подрешетке, что и спин исходного иона. Используя явный вид векторов ρ_2 и ρ_3 , легко получаем (ср. (2)):

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_d - 4t_2 \cos k_x \cos k_y - 2t_3 (\cos 2k_x + \cos 2k_y), \quad (14)$$

или, другими словами, спектр, полностью соответствующий условию (уже давно известному в теории биэкситонов в антиферродиэлектриках [6]), которое недавно использовал Андреев [33] (см. также [34]) для обоснования простой физической картины свехпроводимости с заранее (т.е. выше T_c) сформированными электронными парами. Такая свехпроводимость, обладающая чертами ВТСП, с необходимостью приводит к существованию псевдощели [37].

Предположим теперь, что дисперсионные кривые, наблюдаемые в ARPES [1,2], описываются зависимостью (14) и положим, что амплитуды t_2 и t_3 могут рассматриваться как подгоночные параметры. В таком случае нетрудно убедиться, что для того чтобы согласовать (как минимум качественно) экспериментальные кривые, демонстрирующие максимумы в точке $k_x = k_y = \pi/2$ как по диагональному направлению $k_x = k_y$, так и по координатным направлениям $k_x = 0$ либо $k_y = 0$, необходимо положить $t_2 \ll t_3$. Учет ближайшего соседа, характеризующегося величиной t_1 , которая, как отмечалась, задает некогерентный перенос (см. (9)), не может изменить полученное неравенство. В результате

спектр вида (14) формально отвечает спектру носителя в так называемой tt' - J -модели [17], где, однако, первое слагаемое с амплитудой t содержит не сумму косинусов, а сумму косинусов двойного аргумента. Такой вывод есть прямое следствие закона сохранения спина при движении носителя с зарядом любого знака по антиферромагнитно упорядоченной квадратной кристаллической решетке.

6. Сделанные простые расчеты показывают, что исходный магнитный (и, в частности, антиферромагнитный) порядок накладывает существенные ограничения на поведение введенного в систему одиночного носителя. При этом в области слабого (а возможно, и оптимального) допирования, пока еще можно говорить об антиферромагнетизме среды, движение носителя должно и будет определяться характером ее упорядочения. Когда же число внесенных в систему носителей (дырок или электронов) достигнет такого уровня, что само магнитное упорядочение разрушится и станет условным, роль ограничений, обусловленных рассмотренным в настоящей работе законом сохранения, уменьшится и дисперсия (14) уже не будет отвечать наблюдаемой в работах [1,2].

Также постепенно, по мере увеличения допирования, пропадает и обменное притяжение, описываемое оператором H_{attr} (11). В итоге задача о возникновении и, судя по всему, подавлению сверхпроводимости в допированном антиферродизэлектрике требует самосогласованного рассмотрения, где переменное число носителей определяет не только положение одноэлектронного уровня Ферми, но и свойства пространства, по которому они движутся, а также силу парного — прямого либо косвенного — взаимодействия. При этом допирование, изменяя взаимное расположение и «парциальный» вклад p - или d - состояний в кристалле, может отражаться и на природе носителей. Подобные проблемы требуют специального изучения. Наша цель была проанализировать ситуацию, отвечающую предельно малому допированию.

Важно, наконец, заметить, что было бы необходимо и, казалось бы, нетрудно проверить полученные результаты путем измерения дисперсии зоны проводимости в купратах во внешнем магнитном поле \mathbf{H} (скажем, тем же методом ARPES). Тогда, исходя из (2), в выражении (14) должно появиться слагаемое, содержащее t_1 ($\equiv t_{NN}$), которое, как и упомянутое в разд. 1 давидовское расщепление, вносит в $\varepsilon(\mathbf{k})$ асимметрию относительно точек $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$. Специфика допированного антиферромагнетика состоит лишь в том, что в нем эта асимметрия пропорциональна \mathbf{H}^2 .

Приношу признательность проф. Ю.Б. Гайдидею и проф. А.А. Кордюку за критическое обсуждение затронутых выше вопросов.

1. F. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).
2. Z.-X. Shen, *E-print archive: cond-mat/0305576* (2003).
3. А.С. Давыдов, *Теория молекулярных экситонов*, Наука, Москва (1968).
4. В.В. Еременко, *Введение в оптическую спектроскопию магнетиков*, Наукова думка, Киев (1975).
5. Э.Г. Петров, *Теория магнитных экситонов*, Наукова думка, Киев (1976).
6. Ю.Б. Гайдидей, В.М. Локтев, А.Ф. Прихотько, *ФНТ* **3**, 549 (1977).
7. В.В. Еременко, В.П. Новиков, *Письма в ЖЭТФ* **11**, 478 (1970).
8. Э.Л. Нагаев, *Физика магнитных полупроводников*, Наука, Москва (197).
9. В.М. Локтев, Ю.Г. Погорелов, *ФНТ* **26**, 231 (2000).
10. M. Kastner, R.J. Birgeneau, G. Shirane, and Y. Endoh, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 897 (1998).
11. V.J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
12. Yu.B. Gaididei and V.M. Loktev, *Preprint ITP-87-127P*, Kiev, Bogolyubov Institute for Theor. Physics (1987); *Phys. Status Solidi* **147**, 307 (1988).
13. В.М. Локтев, *ФНТ* **19**, 375 (1992); *УФЖ* (Огляди) **1**, 10 (2004).
14. F.C. Zhang and T.M. Rice, *Phys. Rev.* **B37**, 3759 (1988).
15. R. Hayn, V. Yushanhai, and S. Lovtsov, *Phys. Rev.* **B47**, 5253 (1993).
16. V.I. Belinicher and A.L. Chernyshov, *Phys. Rev.* **B49**, 9746 (1994).
17. N.M. Plakida, *High-Temperature Superconductors*, Berlin, Springer (1995).
18. С.Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **107**, 796 (1995); *Письма в ЖЭТФ* **64**, 23 (1996).
19. N.M. Plakida, R. Hayn, and J.-L. Richard, *Phys. Rev.* **B51**, 16599 (1995).
20. В.А. Москаленко, П. Энтел, М. Маринаро, Д.Ф. Дигор, *ЖЭТФ* **124**, 700 (2003).
21. P.W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
22. E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
23. V.G. Baryakhtar, V.M. Loktev, and D.A. Yablonskii, *Physica* **C156**, 667 (1988).
24. Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин, *Базовые модели в квантовой теории магнетизма*, Екатеринбург, УРО РАН (2002).
25. Н.М. Плакида, *Письма в ЖЭТФ* **74**, 38 (2001).
26. Ю.А. Изюмов, Р. П. Озеров, *Магнитная нейтронография*, Наука, Москва (1966).
27. В.С. Бабиченко, Ю. Каган, *Письма в ЖЭТФ* **56**, 305 (1992).
28. В.В. Вальков, Т.А. Валькова, Д.М. Дзедзисашвили, С.Г. Овчинников, *Письма в ЖЭТФ* **75**, 450 (2002).
29. В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисашвили, В.А. Мицкан, кн, *Первая Международная конференция «Фунда-*

ментальные проблемы ВТСП», 18-22 октября, Москва-Звенигород, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН (2004), с. 11.

30. А.И. Ахиезер, И.Я. Померанчук, *ЖЭТФ* **36**, 819 (1959).
31. A.F. Barabanov, A.A. Kovalev, O.V. Urazaev, and A.M. Belomouk, *Phys. Lett.* **A265**, 221 (2000).
32. S. Trugman, *Phys. Rev.* **B37**, 1597 (1988).
33. А.Ф. Андреев, *Письма в ЖЭТФ* **79**, 100 (2004).
34. Yu.B. Gaididei and V.M. Loktev, *Ukr. Phys. J.* **50**, 401 (2005).
35. В.М. Локтев, С.Г. Шарапов, *ФНТ* **26**, 1214 (2000).
36. В.М. Локтев, С.Г. Шарапов, Х. Бек, *ФНТ* **28**, 311 (2002).
37. В.П. Гусынин, В.М. Локтев, С.Г. Шарапов, *Письма в ЖЭТФ* **69**, 126 (1999); *ЖЭТФ* **117**, 1143 (2000).

On the theory of electronic spectrum
and superconductivity of copper oxides
as antiferromagnetic metals

V.M. Loktev

The electronic spectrum of doped copper oxides is considered with the antiferromagnetic structure of their ground state taking into account. It is shown that the spin conservation law imposes definite restrictions on the carrier motion, with the result that the carrier should stay in the magnetic sublattice where is appeared. An attempt is made to compare the calculated hole conduction band dispersion obtained with the available experimental data.