

ЛЬВІВСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ім. І. Франка

*На правах рукопису*

**ШВАЙКА**  
**Андрій Михайлович**

УДК 538.945

**ДОСЛІДЖЕННЯ МОДЕЛІ  
З ЛОКАЛЬНИМ АНГАРМОНІЗМОМ В ТЕОРІЇ  
ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНИХ НАДПРОВІДНИКІВ**

01.04.02 — теоретична фізика

Автореферат  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Львів — 1994

Робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем  
Національної академії наук України

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук,  
професор Стасюк Ігор Васильович

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук,  
провідний науковий співробітник  
Локтев Вадим Михайлович

доктор фізико-математичних наук,  
професор Лукіянець Богдан Антонович

Провідна організація: Інститут проблем матеріалознавства  
НАН України

Захист відбудеться «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 1995 р. о \_\_\_ год. на засіданні Спеціалізованої ради Д.0628.26.05 при Львівському державному університеті ім. І.Франка за адресою: 290005, м. Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8а, Велика фізична аудиторія.

З дисертацією можна ознайомитися у науковій бібліотеці Львівського державного університету ім. І.Франка (м. Львів, вул. Драгоманова, 5).

Автореферат розісланий «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 1994 р.

Вчений секретар  
Спеціалізованої вченої ради  
доктор фізико-математичних наук  
професор

А.Є.Носенко

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми досліджень.** Серед актуальних і важливих задач сучасної фізики, що заслуговують на увагу як з експериментальної, так і з теоретичної точки зору, слід віднести дослідження явища високо-температурної надпровідності (ВТНП). Великий інтерес до цих сполук зумовлений різноманітністю і незвичайністю їх фізичних властивостей. На даний час чітко встановлено, що ці особливості пов'язані з їх шаруватою структурою, коли основним структурним елементом є площини  $\text{CuO}_2$ , які слабо зв'язані між собою, що зумовлює сильну анізотропію властивостей. Провідність у ВТНП сполуках визначається сильно гібридизованими орбіталями в площинах  $\text{CuO}_2$  і характеризується великим значенням енергії внутрі-іонного (хаббардівського) відштовхування на іонах міді.

У зв'язку з пошуком природи виникнення надпровідного стану у ВТНП широко обговорюється роль ґратки, причому розгляд проводиться як в рамках традиційного підходу так і з залученням додаткових механізмів. Один з таких підходів ґрунтується на аналогії структурних та фізичних властивостей ВТНП сполук та сегнетоелектриків типу перовскитів. Зокрема, широко обговорюється питання про роль локальних ґраткових нестійкостей в утворенні надпровідного стану.

Серед теоретичних моделей, які в дусі моделі Хаббарда описують сильні електронні кореляції на одному вузлі кристалічної ґратки і доповнені, разом з тим, врахуванням тих чи інших особливостей електронних станів або динаміки ґратки досліджуваних кристалів, слід відзначити модель, у якій до гамільтоніана Хаббарда додається взаємодія електронів з модою ґраткових коливань, яка володіє значним локальним ангармонізмом. Таку властивість мають коливання іону т.зв. вершинного кисню, через який відбувається перенос електронного заряду між провідними площинами  $\text{CuO}_2$  та іншими елементами структури, причому існує сильна кореляція між такими флюктуаціями і його ангармонічним рухом. У випадку локального потенціалу з двома мініму-

мами, розділеними досить високим бар'єром, для опису ангармонічних коливань може бути застосований псевдоспіновий формалізм. Відповідна псевдоспін-електронна модель (Müller K.A. *Phase transition (special issue)* 1988) володіє спільними рисами як моделі Хаббарда, так і псевдоспінних моделей типу моделі Ізінга у поперечному полі і досліджувалася рядом дослідників (див. напр. Hirsch J.E., Tang S. *Phys. Rev. B* **40** (1989) 2179; Plakida N.M., Udovenko V.S. *Mod. Phys. Lett. B* **6** (1992) 541), основні зусилля яких були спрямовані на виявлення можливості надпровідних спарювань, причому, як правило, розглядався випадок слабої взаємодії між електронами і псевдоспінами.

**Метою роботи** є розвиток загального підходу до розгляду псевдоспін-електронної моделі (моделі з локальним ангармонізмом) і дослідження властивостей систем, що нею описуються, а саме:

- узагальнення методу операторів Хаббарда на випадок моделі з локальною псевдоспін-електронною взаємодією;
- аналіз ефективних обмінних взаємодій між електронами, які взаємодіють з локальними ангармонічними коливаннями;
- теоретичне дослідження впливу локальних ангармонічних коливань ґратки на електронні стани у електронних зонах провідності при врахуванні сильних хаббардівських кореляцій;
- аналіз особливостей спектру одноелектронних переходів, заповнення зон та поведінки хімічного потенціалу;
- розрахунок кореляційних функцій і внесків у діелектричну сприйнятливність від псевдоспінової та електронної підсистем; встановлення умов виникнення діелектричних нестійкостей.

**Наукова новизна.** Вперше при розгляді моделі з локальним ангармонізмом застосовано формалізм операторів Хаббарда, який дозволив точно врахувати локальну псевдоспін-електронну взаємодію в гамільтоніані нульового наближення, проведено дослідження спектру одноелектронних переходів та проаналізовано особливості заповнення зон.

Вперше здійснено узагальнення  $t-J$  моделі на випадок систем з ло-

кальними ангармонічними коливаннями; досліджено вплив стану коливної підсистеми на величину і знак ефективної обмінної взаємодії.

На основі моделі, що розглядається, висвітлено суттєвий вклад електронних переходів між провідними площинами  $\text{CuO}_2$  та іншими структурними елементами у величину поперечної діелектричної сприйнятливості та у виникнення електро-польового ефекту. Отримано загальні вирази для динамічної діелектричної сприйнятливості у випадках фіксації значення хімічного потенціалу та концентрації електронів у провідних площинах  $\text{CuO}_2$ . Проведено дослідження спектру низькочастотних коливань та його перебудови при зміні параметра асиметрії ангармонічного потенціалу або концентрації електронів.

Вперше в рамках псевдоспін-електронної моделі в узагальненому наближенні хаотичних фаз отримані вирази для кореляційних функцій, що визначають поперечну діелектричну сприйнятливості системи. Встановлено можливість виникнення нестійкостей відносно флюктуацій поляризації та густини заряду в рамках моделі з локальним ангармонізмом. Побудовано відповідні фазові діаграми.

**Практичне значення роботи.** Проведені теоретичні дослідження виявили можливості застосування псевдоспін-електронної моделі до опису ВТНП систем. Отримані в роботі результати можуть бути покладені в основу розвитку нових підходів до пояснення явища високотемпературної надпровідності, інтерпретації ряду спостережуваних властивостей ВТНП сполук. В ній показано можливість існування специфічних фізичних ефектів у системах з локальним ангармонізмом.

В роботі підтверджено придатність методу операторів Хаббарда і відповідної діаграмної техніки при дослідженні систем із сильними електронними кореляціями і локальними взаємодіями.

**На захист виносяться наступні основні положення:**

1. Метод врахування сильної локальної взаємодії між електронами і ангармонічними коливаннями ґратки (псевдоспінами) з використанням техніки операторів Хаббарда.

2. Вираз для ефективної обмінної взаємодії між електронами, які взаємодіють з локальними ангармонічними коливаннями.
3. Результати дослідження спектру одноелектронних переходів, структури та заповнення енергетичних зон.
4. Вирази для кореляційних функцій і динамічної діелектричної сприйнятливості в узагальненому наближенні хаотичних фаз.
5. Особливості електронних, ґраткових та змішаних вкладів у динамічну сприйнятливість в режимах  $\mu = \text{const}$  та  $n = \text{const}$ , особливості спектру низькочастотних коливань.
6. Висновок про існування нестійкостей відносно флюктуацій поляризації та густини заряду на температурній залежності сприйнятливості. Фазові діаграми температура нестійкості — концентрація електронів — модуляція структури.

**Апробація роботи.** Основні результати дисертації доповідалися і обговорювалися на семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України; Інституту теоретичної фізики Технічного університету м. Грац (Австрія); доповідалися, обговорювалися і опубліковані в матеріалах наступних конференцій: 29 нарада з фізики низьких температур (Казань, Росія, 1992 р.); XIX міжнародна школа та II східноєвропейська зустріч з фізики сегнетоелектриків (Пжесека, Польща, 1992 р.); XV конференція з радіо та мікрохвильової спектроскопії (Познань, Польща, 1993 р.); Українсько-французький симпозіум «Конденсована речовина: наука та індустрія» (Львів, 1993 р.); Європейська конференція «Фізика магнетизму 93: сильно корельовані системи» (Познань, Польща, 1993 р.); Міжнародна конференція «Фізика в Україні» (Київ, 1993 р.); 20 міжнародна конференція з низьких температур (Юджін, США, 1993 р.); Міжнародна амперівська школа з магнітного резонансу та мікрохвильового поглинання у високотемпературних надпровідних матеріалах (Познань, Польща, 1994 р.); 4 міжнародна конференція «Матеріали і механізми надпровідності. Високотемпературні надпровідники» (Гренобль, Франція, 1994 р.); 8 міжнародна конференція

з останніх досягнень в теорії багатьох частинок (Шльосс Сеггау, Австрія, 1994 р.); Міжнародна конференція з магнетизму (Варшава, Польща, 1994 р.); 2 міжнародний симпозіум «Високотемпературна надпровідність та тунельні явища» (Слав'яногірськ, 1994 р.); Українсько-польська і східноєвропейська школа з сегнетоелектриків та фазових переходів (Ужгород-Великі Ремети, 1994 р.).

**Публікації.** За матеріалами дисертації опубліковано 15 робіт, перелік яких наведено в кінці автореферату. Автор приймав безпосередню участь в розвитку методики операторів Хаббарда для опису моделі з локальним ангармонізмом, проведенні розрахунку ефективних взаємодій, кореляційних функцій та динамічної сприйнятливості. Особисто автором виконано розрахунки спектру одноелектронних переходів, проведено аналіз випадку безмежно вузької зони, доведено можливість виникнення структурних нестійкостей, побудовано фазові діаграми.

**Структура і об'єм дисертації.** Дисертація складається з вступу, чотирьох розділів, висновків, додатку і списку цитованої літератури. Робота викладена на 148 сторінках, включає 28 рисунків і список літератури, що містить 138 джерел.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтована актуальність досліджень, викладених у дисертації, сформульована мета роботи, відзначена її наукова новизна та вказані основні положення, які виносяться на захист.

У **першому розділі**, зроблено короткий огляд основних результатів експериментальних і теоретичних досліджень високотемпературних надпровідників, які були покладені в основу моделі з локальним ангармонізмом, що розглядається.

В **другому розділі** введено представлення операторів Хаббарда для гамільтоніана моделі з локальним ангармонізмом і на цій основі знайдено точні розв'язки для енергетичного спектру і середніх заселеностей станів при відсутності електронного переносу, які є вихідними

при побудові подальших наближень. З використанням теорії збурень в операторній формі побудовано гамільтоніан, що є узагальненням гамільтоніана  $t$ - $J$  моделі на випадок систем з локальним ангармонізмом, досліджено вплив термодинамічного стану псевдоспінової системи на величину і знак ефективної обмінної взаємодії між електронами.

Гамільтоніан моделі, що описує рух сильно скорельваних електронів, які взаємодіють з локальними ангармонічними коливаннями ґратки (псевдоспінами), записаний у вигляді

$$H = \sum_i H_i + \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}, \quad (1)$$

$$H_i = U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + E_0 (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + g (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) S_i^z - \Omega S_i^x - h S_i^z, \quad (2)$$

де останні два доданки в гамільтоніані для однієї комірки (2) описують розщеплення найнижчого коливного стану та асиметрію ангармонічного потенціалу, відповідно.

Ввівши оператори Хаббарда  $X_i^{PQ} \equiv |i, P\rangle \langle i, Q|$ , які діють на базисі восьми станів однієї комірки ( $|i, P\rangle = |n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}, S_i^z\rangle$ )

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |0, 0, \frac{1}{2}\rangle & |2\rangle &= |1, 1, \frac{1}{2}\rangle & |3\rangle &= |0, 1, \frac{1}{2}\rangle & |4\rangle &= |1, 0, \frac{1}{2}\rangle \\ |\tilde{1}\rangle &= |0, 0, -\frac{1}{2}\rangle & |\tilde{2}\rangle &= |1, 1, -\frac{1}{2}\rangle & |\tilde{3}\rangle &= |0, 1, -\frac{1}{2}\rangle & |\tilde{4}\rangle &= |1, 0, -\frac{1}{2}\rangle \end{aligned},$$

отримуємо гамільтоніан, одновузлова частина якого є діагональною при  $\Omega = 0$ . У випадку  $\Omega \neq 0$  з допомогою унітарного перетворення  $|R\rangle = \alpha_{Rr} |r\rangle$  гамільтоніан (2) можна привести до діагонального вигляду

$$H = \sum_{ir} \varepsilon_r X^{rr} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}, \quad \varepsilon_{r,\tilde{r}} = U \delta_{r,2} + E_0 n_r \pm \frac{1}{2} \sqrt{(n_r g - h)^2 + \Omega^2}. \quad (3)$$

Тут  $n_1 = 0$ ,  $n_2 = 2$ ,  $n_3 = n_4 = 1$  ( $n_r = n_{\tilde{r}}$ ). Відповідне представлення для операторів народження і знищення електронів має вигляд  $a_{i\sigma}^\dagger = \sum_{mn} A_{mn}^\sigma X_i^{mn}$ ,  $a_{i\sigma} = \sum_{mn} A_{mn}^\sigma X_i^{nm}$ , де коефіцієнти  $A_{mn}^\sigma$  визначаються матричними елементами унітарного перетворення  $\alpha_{Rr}$ .

Взаємодія з псевдоспіном приводить до розщеплення кожного з енергетичних рівнів  $0$ ,  $E_0$ ,  $U + 2E_0$  моделі Хаббарда при  $t_{ij} = 0$  на два підрівні



(3) із значенням  $z$ -компоненти псевдоспіна  $S_i^z = \pm \frac{1}{2}$ , відповідно. Середні заселеності відповідних станів визначаються розподілом Больцмана і суттєво залежать від знаку величини  $U_{\text{eff}} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_4 \leq U$ , яка має зміст ефективної енергії кореляції на одному вузлі для електронів, що взаємодіють з псевдоспіновою підсистемою.<sup>1</sup>

Включення переносу ( $t_{ij} \neq 0$ ) приводить до розмиття енергетичних рівнів одноелектронних переходів  $\varepsilon_{mn} = \varepsilon_m - \varepsilon_n$  (для  $A_{mn}^\sigma \neq 0$ ) у підзони. Вплив однієї підзони на іншу враховується шляхом переходу до ефективного гамільтоніана.<sup>2</sup> В даній роботі використовувалася операторна форма теорії збурень за т.зв. недиагональним переносом  $\sum_{ij\sigma} t_{ij} \sum_{\substack{mn \\ m'n'}} A_{mn}^\sigma A_{m'n'}^\sigma X_i^{mn} X_j^{n'm'}$ , де штрих біля суми означає, що  $(mn) \neq (m'n')$ . Обмежуючись членами другого порядку за  $t_{ij}$ , для ефективної обмінної взаємодії отримуємо наступний вираз:

$$- \sum_{ij} \left\{ \sum_{\alpha\beta} J_{ij}^{\alpha\beta} \mathcal{P}_i^\alpha \mathcal{P}_j^\beta \right\} \left( \sigma_i \sigma_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) \quad (4)$$

де  $\mathcal{P}_i^\pm = \frac{1}{2} \pm S_i^z$ ,  $S_i^z = \frac{1}{2} \sum_{r=1}^4 (X_i^{rr} - X_i^{\tilde{r}\tilde{r}})$ ,  $\mathcal{P}_i^\uparrow = \sum_{r=1}^4 X_i^{r\tilde{r}}$ ,  $\mathcal{P}_i^\downarrow = \sum_{r=1}^4 X_i^{\tilde{r}r}$ , а  $\sigma_i$  — оператор спіна електрона,  $J_{ij}^{\alpha\beta} \sim - \sum_{\substack{\sigma \\ p=1,1 \\ q=2,2}} \frac{t_{ij}^2 A_{rp}^\sigma A_{r'p'}^\sigma A_{qs}^\sigma A_{qs'}^\sigma}{\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_r - \varepsilon_s}$ . Вираз у

фігурних дужках в (4) є ефективним обмінним інтегралом між електронами. Він є оператором за псевдоспіновими змінними<sup>3</sup>, і, як наслідок, вплив коливної підсистеми на електронний обмін проявляється різним чином залежно від її термодинамічного стану. У рівноважному стані заселеними є переважно рівні з  $S_i^z = -\frac{1}{2}$  і основний вклад у ефективний обмін дає доданок  $J_{ij}^{--} \approx -\frac{2t_{ij}^2 (A_{41}^1)^2 (A_{23}^1)^2}{U_{\text{eff}}}$ , який приводить до антиферромагнетизму у гомеоплярному випадку (при  $U_{\text{eff}} > 0$ ). Якщо має місце нерівноважність коливної підсистеми (типу замороженого безпорядку,

<sup>1</sup>Подібне перенормування енергії кореляції отримано при кластерних розрахунках (Hirsch J.E., Tang S. *Phys. Rev. B* **40** (1989) 2179).

<sup>2</sup>Для моделі Хаббарда це відповідає переходу до  $t$ - $J$  моделі.

<sup>3</sup>У  $t$ - $J$  моделі  $J_{ij}^{(0)} = -2t_{ij}^2/U$  і взаємодія має антиферромагнітний характер.

що може мати місце у сполуках із нестехіометрією за киснем), відносна частка комірок із значенням проекції псевдоспіна  $S_i^z = +1/2$  зростає і ефективна обмінна взаємодія між такими вузлами та іншими, яка задається коефіцієнтами  $J_{ij}^{+-}$  та  $J_{ij}^{++}$ , може мати як антиферромагнітний так і ферромагнітний характер залежно від величини параметрів гамільтоніану. Це може бути додатковим механізмом фрустрації обмінної взаємодії у ВТНП сполуках при зміні стехіометрії за киснем.

У **третьому розділі** методом двочасових температурних функцій Гріна досліджено вплив локальних ангармонічних коливань на спектр одноелектронних переходів. Досліджено зміну заповнення підзон і положення хімічного потенціалу із зміною концентрації електронів та параметра асиметрії ангармонічного потенціалу.

Спектр одноелектронних переходів визначався з полюсів функцій Гріна, побудованих на операторах Хаббарда Фермі типу,

$$\langle\langle a_\sigma | X^{mn} \rangle\rangle_{\mathbf{q}, \varepsilon} = \frac{1}{2\pi} \frac{A_{mn}^\sigma}{1 - t_{\mathbf{q}} g_\sigma(\varepsilon)} \frac{\langle X^{mm} + X^{nn} \rangle}{\varepsilon - (\varepsilon_m - \varepsilon_n)}, \quad g_\sigma(\varepsilon) = \sum_{(mn)} \frac{(A_{mn}^\sigma)^2 \langle X^{mm} + X^{nn} \rangle}{\varepsilon - (\varepsilon_m - \varepsilon_n)}, \quad (5)$$

вирази для яких були розраховані у наближенні, що відповідає наближенню Хаббард-I. На основі спектральної теореми були знайдені рівняння для  $\langle X^{mm} \rangle$ , які разом з умовою нормування  $\sum_m X^{mm} = 1$  та рівнянням для хімічного потенціалу  $\sum_r n_r \langle X^{rr} \rangle = n$  дають самоузгоджену систему рівнянь для середніх заселеностей станів.

Коли величина інтегралу переносу є набагато менша від віддалі між рівнями одноелектронних переходів ( $\left| \frac{t_{\mathbf{q}}}{\varepsilon_{mn} - \varepsilon_{m'n'}} \right| \ll 1$  для  $mn \neq m'n'$ ), для спектру одноелектронних переходів отримуємо:

$$\varepsilon_{mn}(t_{\mathbf{q}}) = \varepsilon_{mn} + t_{\mathbf{q}} (A_{mn}^\sigma)^2 \langle X^{mm} + X^{nn} \rangle. \quad (6)$$

В дисертації приведені графіки залежності спектру одноелектронних переходів від концентрації електронів  $n$  та величини параметра асиметрії ангармонічного потенціалу  $h$  (див. рис. 1). Незважаючи на складну структуру спектру, хімічний потенціал у наближенні невзаємодіючих підзон фіксується тільки у зонах  $(\tilde{4}\tilde{1})$  і  $(\tilde{2}\tilde{3})$ , утворених одноелектрон-

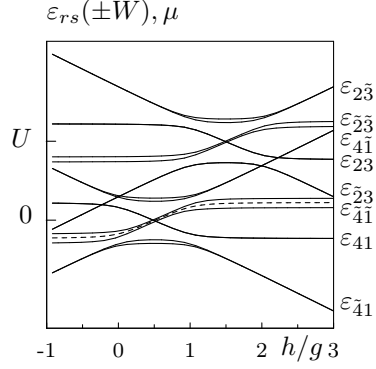


Рис. 1: Спектр одноелектронних переходів (—) та хімічний потенціал (- - -) як функції параметра  $h$ .

зони ( $\tilde{2}\tilde{3}$ ) відбувається при значенні електронної концентрації  $n_0 = 1 + \frac{1}{6} \left( \frac{W}{U_{\text{eff}}} \right)^2 \left( (A_{23}^\dagger)^4 - (A_{41}^\dagger)^4 \right) + \dots \neq 1$  (тут і нижче  $W$  — ширина незбудованої електронної зони). Це є наслідком ефективного «звуження» підзон, яке характеризується параметрами  $(A_{mn}^\sigma)^2$  (див. (6)), під впливом псевдоспінової підсистеми.

В **четвертому розділі** проведено розрахунок поперечної діелектричної сприйнятливості. Такий розрахунок зроблено, з одного боку, при  $T = 0$  у наближенні, що відповідає наближенню Хаббард-I. З другого боку, з допомогою діаграмної техніки виходячи з рядів теорії збурень за електронним переносом отримано вирази для динамічної діелектричної сприйнятливості в узагальненому наближенні хаотичних фаз, проаналізовано її поведінку при зміні температури та співвідношення між параметрами моделі.

Взаємодія з зовнішнім електричним полем  $E_\perp$ , орієнтованим перпендикулярно до шарів  $\text{CuO}_2$ , враховувалася введенням у гамільтоніан доданка

$$H_{\text{int}} = -E_\perp \sum_i \Delta P_i^z, \quad \Delta P_i^z = d_S S_i^z + d_e n_i, \quad (7)$$

ними переходами між станами з найнижчою енергією ( $S_i^z = -\frac{1}{2}$ ). Взаємний вплив підзон стає суттєвим тільки в околі точок  $h = 0, g$  та  $2g$ , коли відповідні підзони зближуються (див. рис. 1) і при зміні електронної концентрації відбувається затягування хімічного потенціалу у зону утворення з участю збуджених станів ( $S_i^z = +\frac{1}{2}$ ). В околі  $n \approx 1$  взаємодія підзон ( $\tilde{4}\tilde{1}$ ) і ( $\tilde{2}\tilde{3}$ ) приводить до порушення електрон-діркової симетрії, коли заповнення нижньої підзони ( $\tilde{4}\tilde{1}$ ) і стрибок хімічного потенціалу у верхню під-

де  $\Delta P_i^z$  — змінна частина поперечної компоненти вектора поляризації, яка включає вклад від псевдоспінової та електронної (за рахунок переносу заряду між провідними шарами  $\text{CuO}_2$  та іншими елементами структури — резервуаром електронів, який визначає рівень хімічного потенціалу) підсистем.

У найпростішому випадку статичну сприйнятливість можна розрахувати використовуючи формули  $\chi = \frac{1}{v_c} d_S \left( \frac{\partial \langle S^z \rangle}{\partial E_\perp} \right)_n$  для режиму  $n = \text{const}$ , та  $\chi = \frac{1}{v_c} \left( d_S \left( \frac{\partial \langle S^z \rangle}{\partial E_\perp} \right)_\mu + d_e \left( \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial E_\perp} \right)_\mu \right)$  для  $\mu = \text{const}$ , де  $\langle S^z \rangle$  та  $\langle n \rangle$  виражаються через середні заселеності станів  $\langle X^{mm} \rangle$ , які розраховувалися у наближенні Хаббард-I. У режимі  $n = \text{const}$  основний вклад у сприйнятливість дає псевдоспінова підсистема, а саме

$$\chi^S = \frac{d_S^2}{2v_c} \sum_{r=1}^4 \frac{\Omega^2}{((n_r g - h)^2 + \Omega^2)^{3/2}} \langle X^{\tilde{r}\tilde{r}} - X^{rr} \rangle. \quad (8)$$

Вираз (8) містить три доданки ( $n_r = 0, 2$  і  $1$ ), кожен з яких описує сприйнятливість одного псевдоспіна поміщеного в поперечне поле  $\Omega$  і поздовжнє поле  $(h - n_r g)$  і дає пік сприйнятливості при  $h = n_r g$ , інтенсивність якого визначається концентрацією електронів.

У режимі  $\mu = \text{const}$ , якщо із зміною зовнішнього поля зона може накладатися на рівень хімічного потенціалу і переміщатися відносно нього, то концентрація електронів у шарі змінюється (див. рис. 2), а також появляється вклад від електронної підсистеми у сприйнятливість  $\chi^e$  та додаткові вклади у її псевдоспінову компоненту (рис. 3). Безпосередня числова оцінка дає  $\chi^e \sim 10^1 \div 10^2$ , що може відповідати великим спостережуваним значенням проникливості  $\varepsilon_{zz}$  (Testardi L.R., *et al. Phys. Rev. B* **37** (1988) 2324) і свідчити про наявність тенденції до діелектричної нестійкості. Приведена на рис. 2 залежність концентрації електронів від величини поля відповідає т.зв. електропольовому ефекту (Xi X.X., *et al. Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 1240), суть якого полягає у зміні концентрації носіїв і, як наслідок, температури переходу у надпровідний стан при накладанні електричного поля  $E_\perp$ .

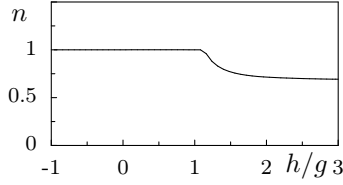


Рис. 2: Зміна концентрації електронів у провідному шарі при зміні поля  $h/g$ .

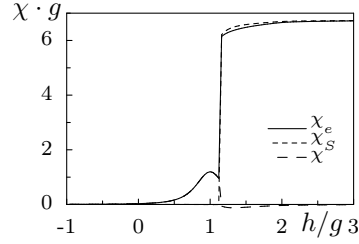


Рис. 3: Повна, електронна і псевдоспінова компоненти сприйнятливості в режимі  $\mu = \text{const}$ .

В загальному динамічна діелектрична сприйнятливість  $\chi_{\mathbf{q}}^{PP}(\omega_n)$  виражається через мацубарівську функцію Гріна  $K_{\mathbf{q}}^{PP}(\omega_n)$ , побудовану на операторах поляризації елементарної комірки.  $\chi_{\mathbf{q}}^{PP}(\omega_n) = K_{\mathbf{q}}^{PP}(\omega_n)$  у режимі  $\mu = \text{const}$ ; в режимі  $n = \text{const}$  слід враховувати зміну положення хімічного потенціалу при накладанні зовнішнього поля, що дає

$$\chi_{\mathbf{q}}^{PP}(\omega_n) = K_{\mathbf{q}}^{PP}(\omega_n) - K_{\mathbf{q}}^{Pn}(\omega_n) \{K_{\mathbf{q}}^{nn}(\omega_n)\}^{-1} K_{\mathbf{q}}^{nP}(\omega_n) \delta(\mathbf{q}) \delta(\omega_n).$$

У випадку відсутності електронного переносу ( $t_{ij} = 0$ ) вирази для кореляційних функцій були розраховані аналітично і, зокрема, у випадку  $U \rightarrow \infty$ ,  $n < 1$  ( $n = \text{const}$ ) отримано

$$\chi^{SS}(\omega_n) = \frac{\beta}{4} \delta(\omega_n) \sum_{r=1}^4 \frac{(n_r g - h)^2 \langle X^{rr} + X^{\tilde{r}\tilde{r}} \rangle}{((n_r g - h)^2 + \Omega^2) \cosh^2 \frac{\beta}{2} \sqrt{(n_r g - h)^2 + \Omega^2}} \quad (9)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{r=1}^4 \frac{\Omega^2 \langle X^{rr} + X^{\tilde{r}\tilde{r}} \rangle \tanh \frac{\beta}{2} \sqrt{(n_r g - h)^2 + \Omega^2}}{\sqrt{(n_r g - h)^2 + \Omega^2} (n_r g - h)^2 + \Omega^2 - (i\omega_n)^2},$$

де перший доданок (пропорційний  $\delta(\omega_n)$ ) визначає різницю між ізотермічною та ізольованою сприйнятливістю. Полюси функції (9) дають спектр низькочастотних збуджень  $\hbar\omega_r = \sqrt{(n_r g - h)^2 + \Omega^2}$  ( $n_r = 0, 1, 2$ ). Взаємодія псевдоспінів з електронною підсистемою приводить до вібронного розщеплення коливного спектру. Інтенсивності відповідних мод визначаються температурою, параметрами гамільтоніана та заселеністю відповідних електронних станів, міняючись із зміною концентрації

електронів, що може проявлятися на експерименті як «перерозподіл» інтенсивностей коливних мод.

Розрахунок мацубарівських функцій Гріна, що визначають сприйнятливості, у випадку  $t_{ij} \neq 0$  проводився з використанням регулярної теорії збурень за величиною електронного переносу  $t_{ij}$  у формі діаграмної техніки для операторів Хаббарда (Слободян П.М., Стасюк И.В. *ТМФ* **19** (1974) 423). Всі подальші розрахунки проводилися для випадку  $\Omega = 0$ , коли оператори  $S_i^z$  та  $n_i$  виражаються через діагональні оператори Хаббарда  $X_i^{mm}$ , а всі функції Гріна — через функції  $K_{lm}^{(pq)}(\tau - \tau') = \langle \mathcal{T} \tilde{X}_l^{pp}(\tau) \tilde{X}_m^{qq}(\tau') \rangle^c$ . Фур'є образ даних функцій може бути записаний у вигляді

$$K = \bar{\bar{b}} + \Pi'' + {}'\Pi\bar{\bar{b}} + \bar{\bar{b}}\Pi' + {}'\Pi\bar{\bar{b}}\Pi', \quad (10)$$

де  $\bar{\bar{b}}$  — повний кумулянт другого порядку, що задовільняє рівняння типу Дайсона  $\bar{\bar{b}} = \tilde{b} + \tilde{b}\Pi\bar{\bar{b}}$  (тут  $\tilde{b}$  — кумулянт другого порядку, який розраховувався у наближенні середнього поля). Вираз (10) містить також вклади від повних петлевих діаграм  $\Pi$ ,  $\Pi'$ ,  ${}'\Pi$ ,  $\Pi''$ , які визначалися з рівнянь типу Бете-Солпітера

$$\begin{aligned} \Pi'' &= \Pi''_0 + \Pi''_0 \Pi' + {}'\Pi_0 \Pi'', & \Pi' &= \Pi'_0 + \Pi'_0 \Pi' + \Pi_0 \Pi'', \\ {}'\Pi &= {}'\Pi_0 + {}'\Pi_0 {}'\Pi + \Pi_0 \Pi'', & \Pi &= \Pi_0 + \Pi_0 {}'\Pi + \Pi'_0 \Pi, \end{aligned} \quad (11)$$

що були отримані у т.зв. узагальненому наближенні хаотичних фаз при сумуванні рядів петлевих діаграм. Дане наближення аналогічне до використаного Ю.Ізюмовим та Б.Летфуловим (Izyumov Yu.A., Letfulov V.M. *J. Phys.: Condens. Matter* **3** (1991) 5373) при розрахунку магнітної сприйнятливості моделі Хаббарда. Поляризаційні внески нульового наближення  $\Pi_0$ ,  $\Pi'_0$ ,  ${}'\Pi_0$ ,  $\Pi''_0$  будувалися з одноелектронних функцій Гріна, що розраховувалися у наближенні Хаббард-I. Тоді як функції  $\Pi'_0$ ,  ${}'\Pi_0$ ,  $\Pi''_0$  визначаються тільки переходами між станами однієї одноелектронної зони, функція  $\Pi_0$  містить вклади і від міжзонних переходів

$$\Pi_0(mr, np) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \frac{n_+ [\varepsilon_{mr}(\mathbf{k})] - n_+ [\varepsilon_{np}(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{i\omega_n + \varepsilon_{mr}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{np}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}, \quad (12)$$

де  $n_+(\lambda)$  — розподіл Фермі. Функція  $\Pi_{ij}^{rs}$  описує ефективну взаємодію між станами  $|r\rangle$  та  $|s\rangle$  комірок  $i$  та  $j$  через електрони провідності.

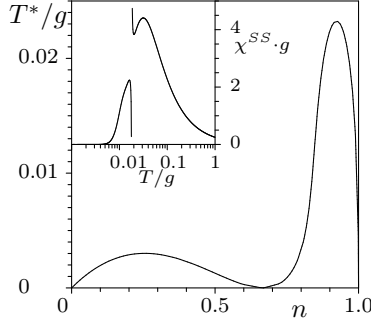


Рис. 4: Температурна залежність  $\chi^{SS}$  та фазова діаграма  $T^* - n$  ( $U \rightarrow \infty$ ,  $h/g = 1.05$ ,  $\Omega = 0$ ,  $W/g = 0.2$ ,  $n = 0.95$ ,  $q = 0$ ).

(Müller V., et al. *Ferroelectrics* **130** (1992) 45). Виявлені розбіжності можна трактувати як прояв діелектричної нестійкості у псевдоспіновій чи електронній підсистемі. Були розраховані фазові діаграми температура нестійкості ( $T^*$ ) — концентрація електронів ( $n$ ) — модуляція структури ( $q$ ) і встановлено, що при  $h > g$  нестійкість є тільки при  $q = 0$  і відповідає втраті стійкості системи відносно флюктуацій поляризації сегнетоелектричного типу, а при  $0 < h < g$ , залежно від концентрації електронів, є для  $q = 0$  або при  $q = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ , що відповідає втраті стійкості відносно флюктуацій заряду. В кінці розділу обговорюється можливість внеску виявлених нестійкостей у константу зв'язку між електронами та ініціювання фазового переходу у надпровідний стан.

В заключному розділі приведені **основні результати та висновки:**

1. Запропоновано підхід з використанням техніки вузлових операторів для опису систем з локальним ангармонізмом ґратки та сильною

- електронною кореляцією, що дозволив точно врахувати локальну взаємодію між електронами і ангармонічними коливаннями ґратки.
2. Взаємодія електронів з локальними ангармонічними коливаннями у випадку сильного електрон-коливного зв'язку приводить до розщеплення хаббардівських зон на додаткові підзони (віброне розщеплення спектру).
  3. Дано узагальнення  $t-J$  моделі при наявності взаємодії електронів з локальними ангармонічними коливаннями ґратки. Встановлено, що ефективна обмінна взаємодія між електронами є оператором за псевдоспіновими змінними і залежно від стану коливної підсистеми може мати як антиферомагнітний так і феромагнітний характер.
  4. Взаємодія з локальними ангармонічними коливаннями приводить до ефективного звуження підзон і, як наслідок, порушення електрон-діркової симетрії та можливості діркової чи електронної провідності при половинному заповненні електронних станів.
  5. Динамічна діелектрична сприйнятливість для моделі з локальним ангармонізмом у статичній границі містить члени пропорційні  $\delta(\omega_n)$ , які визначають різницю між ізотермічною та ізольованою сприйнятливостями, і має різний вигляд в режимах  $\mu = \text{const}$  та  $n = \text{const}$ .
  6. Спектр низькочастотних коливань містить додаткові моди, частоти і інтенсивності яких міняються при зміні параметра асиметрії ангармонічного потенціалу і концентрації електронів.
  7. На основі моделі, що розглядається, запропоновано пояснення електропольового ефекту (зміни концентрації електронів у провідних шарах  $\text{CuO}_2$  високотемпературних надпровідників при накладанні зовнішнього поперечного електричного поля).
  8. Встановлено наявність розбіжностей (несгійкостей) на температурній залежності сприйнятливості. Побудовано фазові діаграми температура несгійкості — концентрація електронів — модуляція структури. Виявлені розбіжності, залежно від значення параметра асиметрії ангармонічного потенціалу і концентрації електронів, відповідають втраті



стійкості системи відносно флюктуацій поляризації або густини електронного заряду. В рамках моделі, що розглядається, запропоновано пояснення спостережуваних на експерименті аномалій температурної поведінки діелектричної сприйнятливості та великих значень поперечної діелектричної проникливості.

**Основні результати дисертації опубліковані в роботах:**

1. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Schachinger E. On the electron spectrum of the Hubbard model including interaction with local anharmonic vibrations // *Physica C*. — 1993. — **213**, N 1. — P. 57–70.
2. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. Dielectric properties and electron spectrum of the Müller model in the HTSC theory // *Acta Physica Polonica A*. — 1993. — **84**, N 2. — P. 293–313.
3. Стасюк І.В., Швайка А.М. Електронний спектр та ефективна обмінна взаємодія в моделі Мюллера в теорії ВТНП. — *Фізика конденсованих систем*. — 1993. — вип. 1. — С. 62–79.
4. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. Statistical mechanics of model with local anharmonicity in the theory of HTSC systems. In *Proc. Inter. Conf. "Physics in Ukraine"*, volume Low Temperature Physics, pages 236–239, Kiev, 22–27 June 1993.
5. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Schachinger E. The electron spectrum of the Hubbard model with coupling to pseudospin degrees of freedom. // *Physica B*. — 1994. — **194–196**. — P. 1965–1966.
6. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. Electron spectrum and dielectric susceptibility of the Hubbard model with local lattice anharmonicity. // *Acta Physica Polonica A*. — 1994. — **85**, N 2. — P. 363–366.
7. Стасюк І.В., Швайка А.М. Об электронном спектре модели Хаббарда при учете взаимодействия с локальными ангармоническими колебаниями. — Львов, 1991. — 25 с. (Препринт / АН Украины. Ин-т физ. конд. сист.: ИФКС-91-56Р).
8. Стасюк І.В., Швайка А.М. Эффективное обменное взаимодействие электронов в модели Мюллера в теории ВТСП. — Львов, 1992. — 21 с.

- (Препринт / АН України. Ін-т фіз. конд. сист.: ІФКС-92-15Р).
9. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. Dielectric properties and electron spectrum of the Müller model in the HTSC theory. — Lviv, 1992. — 32 P. (Preprint / Ukr. Acad. Sci. Inst. Cond. Matt. Phys.: ICMP-92-10E).
  10. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. Model with local anharmonicity in the theory of HTSC systems. I. Correlation functions. — Lviv, 1993. — 40 P. (Preprint / Ukr. Acad. Sci. Inst. Cond. Matt. Phys.: ICMP-93-12E).
  11. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. Model with local anharmonicity in the theory of HTSC systems. II. “Transverse” dielectric susceptibility. — Lviv, 1993. — 28 P. (Preprint / Ukr. Acad. Sci. Inst. Cond. Matt. Phys.: ICMP-93-13E).
  12. Швайка А.М. Модель з локальним ангармонізмом в теорії ВТНП систем. Випадок нульового переносу. — Львів, 1994. — 20 с. (Препринт / НАН України. Ін-т фіз. конд. сист.: ІФКС-94-8У).
  13. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Danyliv O.D. Dielectric instability and charge ordering in the local anharmonic model of high- $T_c$  superconductors. In *Abstracts of the Ampere Workshop On Magnetic Resonances and Microwave Absorption in the High- $T_c$  Superconducting Materials*, page 60, Poznań, Poland, April 10–13 1994.
  14. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. Dielectric instability and local anharmonic model in the theory of high- $T_c$  superconductivity. In *Abstracts & Program of the 4th International Conference “Materials & Mechanisms of Superconductivity. High-Temperature Superconductors”*, page 308, Grenoble (France), 5–9 July 1994.
  15. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. Dielectric instability and vibronic-type spectrum of local anharmonic model of high- $T_c$  superconductors. In *Abstracts of the Ukrainian-Polish & East-European Workshop on Ferroelectricity and Phase Transitions*, page 5, Uzhgorod-V.Remety, Ukraine, September 18–24 1994.

**Shvaika A.M. Investigation of the model with local anharmonicity in the theory of high- $T_c$  superconductors.**

*Thesis on search of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 — theoretical physics. Lviv State University, Lviv, 1994.*

15 scientific papers containing the theoretical studies of the effective interactions, energy spectrum and dielectric susceptibility of high- $T_c$  superconductors within the model with local anharmonicity are defended. It is found that effective exchange interaction depends on the state of vibrational subsystem. Single-electron spectrum and its anomalies caused by pseudospin-electron coupling are investigated. Evaluation of the dielectric susceptibility within the generalized random phase approximation is performed; the existence of its temperature anomalies is established.

**Швайка А.М. Исследование модели с локальным ангармонизмом в теории высокотемпературных сверхпроводников.**

*Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 — теоретическая физика. Львовский государственный университет, Львов, 1994.*

Защищается 15 научных работ, содержащих теоретические исследования эффективных взаимодействий, энергетического спектра и диэлектрической восприимчивости высокотемпературных сверхпроводников в рамках модели с локальным ангармонизмом. Установлено, что эффективное обменное взаимодействие определяется состоянием колебательной подсистемы. Исследован спектр одноэлектронных переходов и его особенности, вызванные псевдоспин-электронной связью. В обобщённом приближении хаотических фаз выполнен расчёт диэлектрической восприимчивости, установлено наличие её температурных аномалий.

Ключові слова: *високотемпературні надпровідники, електронні кореляції, ангармонічні коливання, діелектричні нестійкості.*

---

Підписано до друку 27.12.94 р. Формат 60×84/16.  
Ум. друк. арк. 1. Зам. 2/45. Тираж 100 прим.  
Віддруковано з оригінал-макету в СП “Малті-М”.