

Поляронное представление трехзонной p - d модели с сильным электрон-фоонным взаимодействием

П.А. Козлов¹, И.А. Макаров², Е.И. Шнейдер^{2,3}, науч. рук. д.ф.-м.н., проф. С.Г. Овчинников^{1,2}

- 1) Кафедра теорфизики ИИФРЭ СФУ, аспирант
- 2) ИФСОРАН
- 3) СибГАУ

Купраты, как семейство высокотемпературных сверхпроводников, можно охарактеризовать, тремя главными особенностями: сильной анизотропией структуры и свойств (квазидвумерность), сильными кулоновскими корреляциями на меди, и значительной величиной электрон-фоонного взаимодействия. Несмотря на ряд успехов в исследовании данного класса веществ, адекватная модель купратов до сих пор отсутствует. Ряд экспериментальных данных подтверждают наличие в данных ВТСП как сильных электронных корреляций (СЭК), так и сильного электрон-фоонного взаимодействия (ЭФВ). В связи выше изложенным возникает идея о том, что для корректного описания ВТСП на основе окислов меди необходима теория, которая бы равноценно учитывала как СЭК, так и сильное ЭФВ. Данная работа посвящена решению этой задачи.

В данной работе мы развиваем идеологию обобщенного метода сильной связи с учетом сильного ЭФВ. Мы используем трёхзонную p - d -модель электронной структуры купратов, к которой добавляем две фоонные моды: дыхательную и изгибную, а также ЭФВ. В рамках кластерной теории возмущений мы выполняем разбиение гамильтониана модели на внутри – ячеечную и меж – ячеечную части. Далее выполняется точная диагонализация внутри – ячеечной части гамильтониана, и находятся собственные многоэлектронные поляронные состояния. На основе полученных собственных поляронных состояний строятся X – операторы Хаббарда, посредством которых мы выражаем фермиевские и бозевские операторы и переписываем полный гамильтониан модели в X -представлении операторов Хаббарда.

В работе проводится анализ и сравнение вкладов состояний с различным числом фоонов в основное состояние для вакуумного, однодырочного и двухдырочного секторов гильбертова пространства. Показано, что «фоонная шуба» для синглета Жанга-Райса примерно вдвое «фоонной шубы» для однодырочного дублета. Также вычисляются зависимость величины смещения атома кислорода в зависимости от величины константы ЭФВ, зависимость смещения от числа дырок достаточно слабая.

На следующем этапе планируется расчет зонной структуры поляронов.