

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Электрон-фононное взаимодействие в недодопированных высокотемпературных сверхпроводниках

А.С. Мищенко

Представлены результаты, свидетельствующие о существенной роли электрон-фононного взаимодействия в соединениях, обладающих высокотемпературной сверхпроводимостью. Особое внимание уделяется анализу проявлений электрон-фононного взаимодействия в фотоэмиссии с угловым разрешением и оптической проводимости. На основе сравнения экспериментальных и теоретических данных определена безразмерная константа связи с фононами λ . Недопированные соединения находятся в режиме сильной связи, при котором константа связи λ близка к единице. При допировании дырками константа λ уменьшается, и при оптимальных концентрациях дырок соединения находятся уже в режиме промежуточной связи.

PACS numbers: 71.38. – k, 74.20. – z, 74.72. – h

DOI: 10.3367/UFNr.0179.200912b.1259

Содержание

1. Введение (1259).
 2. Модели, описывающие магнитную подсистему и электрон-фононное взаимодействие (1260).
 - 2.1. Редукция трёхзонной модели.
 - 2.2. Источники электрон-фононного взаимодействия в высокотемпературных сверхпроводниках.
 3. Экспериментальные свидетельства роли электрон-фононного взаимодействия (1262).
 4. Проявления электрон-фононного взаимодействия в спектроскопии (1262).
 - 4.1. Влияние электрон-фононного взаимодействия на фононы.
 - 4.2. Мнимые квазичастицы в спектрах фотоэмиссии.
 - 4.3. Определение константы электрон-фононного взаимодействия λ .
 - 4.4. Изотопический эффект в фотоэмиссии.
 - 4.5. Аномальная температурная зависимость спектров фотоэмиссии.
 - 4.6. Следы электрон-фононного взаимодействия в оптической проводимости.
 - 4.7. Кинки в дисперсии частиц.
 5. Нелокальность электрон-фононного взаимодействия (1274).
 6. Влияние корреляций и других факторов на проявления электрон-фононного взаимодействия (1276).
 7. Заключение (1277).
- Список литературы (1277).

А.С. Мищенко, Cross-Correlated Materials Research Group (CMRG),
ASI, RIKEN, Wako, Saitama 351-0198, Japan
Tel. (81-48) 462 1111, ext. 6362
Fax (81-48) 462 4703
E-mail: mishchenko@riken.jp
Российский научный центр "Курчатовский институт",
пл. Курчатова 1, 123182 Москва, Российская Федерация
Тел. (499) 196-91-48. Факс (499) 943-00-74

Статья поступила 21 мая 2009 г.,
после доработки 2 июля 2009 г.

1. Введение

Дискуссия о роли электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) в физике высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП), которая началась сразу же после открытия ВТСП, в течение многих лет разделяет научных оппонентов на несколько противоборствующих лагерей, говорящих как бы на разных языках, общение между которыми отсутствует из-за нежелания понять или хотя бы выслушать аргументы противоборствующих сторон. Разнообразие мнений охватывает огромный диапазон — от полного отрицания роли ЭФВ в физике ВТСП [1, 2] до утверждения о том, что энергия связи полярона на порядок больше любой характерной энергии магнитной подсистемы и поэтому именно магнитная система должна находиться вне игры [3, 4]. Оба крайних утверждения неоднократно подвергались критике. Например, результаты многих расчётов [5–9] дают основание не согласиться [10, 11] с полным отрицанием роли ЭФВ. С другой стороны, успех обобщённой $t-J$ -модели в описании дисперсии наблюдаемого в спектре фотоэмиссии с угловым разрешением (ФУР) пика [12, 13] не позволяет полностью отрицать роль магнитной подсистемы. Соответственно существует и мнение, что в физике важны взаимодействия как с магнитной, так и с решёточной подсистемами [14].

Если взглянуть на проблему исключительно с точки зрения спектроскопии соединений с ВТСП, то ещё недавно казалось, что спектроскопия явно свидетельствует о том, что влияние ЭФВ на спектры ФУР и оптического поглощения незначительно. Во-первых, дисперсия наблюдаемого в спектрах ФУР пика хорошо согласуется с предсказаниями обобщённой $t-t'-t''-J$ -модели [12], описывающей движение дырки в антиферромагнетике [13, 15, 16]. Во-вторых, результаты расчётов оптического поглощения в рамках $t-J$ -модели предсказывали пик

примерно на той же энергии [17–30], на которой в эксперименте [31–36] наблюдалась полоса инфракрасного поглощения (ПИП).

Кажущееся согласие теоретической интерпретации спектроскопии ВТСП на основе чистой $t-t'-t''-J$ -модели с экспериментом было разрушено экспериментальными и теоретическими методиками нового поколения за считанные годы. С одной стороны, достигшее нескольких мэВ разрешение техники ФУР [12] и внушительные успехи не требующего преобразования Крамерса–Кронига эллипсометрического метода измерения оптического поглощения [37, 38] дали возможность изучить тонкие детали спектров. С другой стороны, разработанные в последнее десятилетие метод диаграммного Монте-Карло (ДМК) на минимуме времени [39–62] и метод стохастической оптимизации для аналитического продолжения с мнимого времени на вещественные частоты [41, 50, 51, 60–63] позволили рассчитывать спектры систем со сложными гамильтонианами, не прибегая к существенным приближениям.

Первым глубочайшим противоречием, взорвавшим гармонию, основанную на хорошем совпадении экспериментальных данных с низким разрешением и результатов приближенных теоретических расчетов, стала загадка ширины линии пика ФУР недопированных ВТСП. Полученный в ходе *точного решения* в рамках $t-J$ -модели пик в спектрах ФУР оказался узким [44], в то время как наблюдаемая в эксперименте ширина линии значительно превышала экспериментальное разрешение. В экспериментальных спектрах ширина линии настолько велика, что ширина зоны дисперсии пика нередко оказывается значительно меньше её [64].

Естественным расширением модели с дыркой в антиферромагнетике является введение в рассмотрение ЭФВ, важная роль которого в физике соединений с ВТСП была недавно продемонстрирована в ряде экспериментов. На первый взгляд, хорошее описание экспериментальной дисперсии пика ФУР обобщенной $t-t'-t''-J$ -моделью являлось серьезным аргументом против ЭФВ, поскольку казалось, что существенное ЭФВ должно изменить дисперсию пика до неузнаваемости. Однако, как было показано в результате точных вычислений, учёт сильного ЭФВ позволяет воспроизвести ситуацию, которая наблюдается в эксперименте. Истинная частица, представляющая собой полярон сильной связи с почти нулевой дисперсией, имеет малый вес и в экспериментальных спектрах не проявляется [49]. В то же время широкий франк-кондоновский пик встряхивания с большим весом, отделенный по энергии от почти бездисперсного полярона, полностью копирует дисперсию невзаимодействующей с фононами частицы [49, 65].

Дальнейшие экспериментальные и теоретические исследования подтвердили полученный из анализа спектров ФУР вывод о важной роли как решёточной, так и магнитной подсистем в формировании спектрального отклика. Существование поляронов в недопированных ВТСП было подтверждено экспериментами с использованием ФУР [66]. Полученные с помощью эллипсометрии спектры оптического поглощения имели два пика вместо одного в ПИП слабодопированных ВТСП [57]. Такая структура спектров оптического поглощения хорошо воспроизводится в рамках $t-t'-t''-J$ -модели при учёте ЭФВ [57]. Другое подтверждение этой точки зрения последовало из анализа аномальной температур-

ной зависимости ширины линий спектра ФУР, которая не поддаётся объяснению ни в чисто магнитных, ни в чисто поляронных моделях [67]. Между тем привлечение к рассмотрению взаимодействия магнитных и решёточных степеней свободы позволяет описать наблюдаемую аномалию [56].

Оценки силы ЭФВ на основе как расчёта в рамках модели взаимодействующего с фононами синглета Джанга–Райса, так и измерений расстояния между энергиями состояния полярона и пика Франка–Кондона дали [68, 69] значение безразмерной константы ЭФВ в недопированных ВТСП $\lambda \approx 1$, которое для $t-t'-t''-J$ -модели определяет режим сильной связи. Однако сила ЭФВ быстро уменьшается при увеличении уровня допирования [57, 70], и при оптимальных значениях концентрации дырок можно говорить уже об ЭФВ с промежуточной силой связи.

Ввиду огромного интереса к ВТСП в последние годы был опубликован целый ряд обзоров, затрагивающих различные аспекты физики ВТСП [5, 12, 14, 30, 32, 71–85].

2. Модели, описывающие магнитную подсистему и электрон-фононное взаимодействие

Хорошо известно, что основным состоянием недопированных ВТСП является состояние антиферромагнетика, допирование которого дырками приводит к возникновению фазы, демонстрирующей высокие температуры сверхпроводящего перехода. Во многих работах, посвящённых вычислению спектральных свойств слабодопированных ВТСП, используется $t-t'-t''-J$ -модель, в которой дырка в двумерном антиферромагнетике является одновременно магнитным и решёточным поляроном, который движется по решётке, излучая и поглощая магноны и фононы.

В спин-волновом приближении для $t-t'-t''-J$ -модели дырка с дисперсией

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 4t' \cos(k_x) \cos(k_y) + 2t'' [\cos(2k_x) + \cos(2k_y)] \quad (1)$$

движется в поле магнонов

$$\hat{H}_{t-J}^0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \quad (2)$$

с дисперсией магнонов $\omega_{\mathbf{k}} = 2J(1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}$, где $\gamma_{\mathbf{k}} = (\cos k_x + \cos k_y)/2$; $h_{\mathbf{k}}$ — оператор уничтожения дырки, $\alpha_{\mathbf{k}}$ — оператор уничтожения магнона. Дырка рассеивается магнонами,

$$\hat{H}_{t-J}^{h-m} = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} M_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} [h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}} + \text{h.c.}], \quad (3)$$

с вершиной рассеяния $M_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}$. Параметры t , t' и t'' — амплитуды прыжков на ближайших и следующих за ближайшими вторых и третьих соседей. Если амплитуды t' и t'' равны нулю и невзаимодействующая с магнонами дырка не имеет дисперсии, то гамильтониан (2), (3) соответствует $t-J$ -модели. Для соединения, допированного дырками (электронами), $t > 0$, $t' < 0$, $t'' > 0$ ($t < 0$, $t' > 0$, $t'' < 0$) [86–89]. Детальное изучение спектральных свойств обобщенной $t-t'-t''-J$ -модели представлено в [86].

В $t-t'-t''-J$ -модели короткодействующее ЭФВ с бездисперсными фононами с частотой Ω_0 , $\hat{H}^{\text{ph}} = \Omega_0 \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}$, описывается гамильтонианом Холстейна

$$\hat{H}^{\text{e-ph}} = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{\sigma}{\sqrt{2M\Omega_0}} (h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + \text{h.c.}), \quad (4)$$

где σ — не зависящая от импульса и массы изотопа константа связи, M — масса принимающих участие в колебаниях решётки ионов, Ω_0 — частота бездисперсных фононов. Коэффициент перед скобкой в правой части (4) является стандартной константой связи модели Холстейна $\gamma = \sigma/\sqrt{2M\Omega_0}$. В дальнейшем сила ЭФВ характеризуется безразмерной константой связи $\lambda = \gamma^2/(4t\Omega_0)$. Часто используется также константа $g = \gamma/\Omega_0$. Следует отметить, что если пренебречь взаимодействием с магнитной подсистемой (3) и положить дисперсию дырки равной $\varepsilon(\mathbf{k}) = 2t(\cos k_x + \cos k_y)$, то модель (2), (4) будет соответствовать стандартной модели Холстейна, в которой дырка с прыжковой амплитудой t на ближайших соседях локально взаимодействует с бездисперсными фононами.

В рамках $t-J$ -гамильтониана, который получается при редукции описывающей реальные ВТСП модели, вершины рассеяния на магнонах $M_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}$ и фононах γ являются абстрактными константами. Генезис ЭФВ и оценки константы λ следуют из рассмотрения динамики решётки в трёхзонной модели и редукции её гамильтониана к гамильтониану (3), (4).

2.1. Редукция трёхзонной модели

Трёхзонная модель [90] содержит одну $3d_{x^2-y^2}$ -орбиталь меди (Cu) и две p -орбитали кислорода (O) в плоскости CuO_2 . Гамильтониан

$$\begin{aligned} \hat{H}_{3\text{B}} = & \varepsilon_{\text{O}} \sum_{i\delta\sigma} a_{i\delta\sigma}^\dagger a_{i\delta\sigma} + \varepsilon_{\text{d}} \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \\ & + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + t_{\text{pd}} \sum_{i\delta\sigma} P_{\delta} (c_{i\sigma}^\dagger a_{i\delta\sigma} + \text{h.c.}) \end{aligned} \quad (5)$$

включает в себя кулоновское отталкивание U на орбитали Cu и интеграл перескока между медью и кислородом t_{pd} . Вектор δ , описывающий положение кислорода в элементарной ячейке, принимает значения $(a/2, 0)$ и $(0, a/2)$ в первом члене и $(\pm a/2, 0)$ и $(0, \pm a/2)$ в последнем. Операторы $a_{i\delta\sigma}^\dagger$ и $c_{i\sigma}^\dagger$ представляют собой соответственно операторы рождения электрона со спином σ на i -м атоме кислорода, отвечающем вектору δ , и на i -м атоме меди. Энергия ε_{d} (ε_{O}) соответствует орбитальным Cu (O).

Из этой модели выводится $t-J$ -модель, в которой узел i соответствует положению иона меди. В недопированном состоянии каждый ион меди находится в конфигурации d^9 и содержит одну дырку. Допированные дырки попадают преимущественно на орбитали кислорода и формируют с дыркой меди синглет Джанга–Райса [91]. Этот синглет является дыркой в гамильтониане $t-J$ -модели

$$\hat{H}_{t-J} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + \text{h.c.}) + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(S_i S_j + \frac{n_i n_j}{4} \right). \quad (6)$$

Здесь $\tilde{c}_{j\sigma}$ — спроектированный (для исключения двойного заполнения) фермионный оператор уничтожения, n_i —

число заполнения на узле i ($n_i < 2$), S_i — оператор спина $1/2$, J — обменный интеграл, $\langle ij \rangle$ определяет ближайших соседей в двумерной решётке. Спин-волновой гамильтониан (соответствующий (2) при $t' = 0$ и $t'' = 0$) получается из гамильтониана $t-J$ -модели, если выразить спиновые операторы через операторы спиновых волн и провести преобразования Фурье и Боголюбова [30, 92–96]. Учёт прыжков на следующих соседях t' и t'' приводит к модели (2), которая воспроизводит [13, 15, 16, 86, 97–100] экспериментальную дисперсию спектров ФУР.

Следует отметить, что $t-J$ -модель может быть также получена из модели Хаббарда [71],

$$H_{\text{H}} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (7)$$

Для исследования взаимовлияния магнитных корреляций и ЭФВ из двух прототипных для $t-J$ -модели гамильтонианов (5) и (7) обычно выбирается модель Хаббарда ввиду её простоты.

2.2. Источники электрон-фононного взаимодействия в высокотемпературных сверхпроводниках

Причиной сильного ЭФВ в такой сильнокоррелированной системе, как ВТСП, является огромная энергия, вовлечённая в формирование синглета Джанга–Райса. В случае жёсткой кристаллической решётки и фиксированного уровня допирования эта энергия величиной несколько электронвольт входит в гамильтониан как тривиальная константа. Однако искажение решётки фононами модулирует интегралы перекрытия t_{pd} и приводит к сильному ЭФВ [68, 101–112]. Расчёты, проведённые в рамках оболочечной модели [113] с использованием констант ЭФВ трёхзонной модели, привели к выводу о том, что безразмерная константа связи имеет порядок единицы, $\lambda \sim 1$ [69]. К такому же значению приводит и оценка λ из сдвига энергии широкого франк-кондоновского пика ФУР относительно химического потенциала [69].

Другим важным источником ЭФВ является сильное дальнедействующее взаимодействие Фрёлиха с фононами, поляризованными вдоль оси c . Некоторые из этих фононов уширяются и смягчаются при допировании [114, 115]. Важность этих фононов отмечалась давно, и взаимодействие полярона с фононами такого типа исследовалось методом Монте-Карло [116] в работе [117]. Недавно интерес к проблеме взаимодействия с этими фононами возродился [118] в связи с новыми прецизионными результатами по ФУР на допированном $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ [119].

Следует отметить, что большая константа связи λ соединений с ВТСП обусловлена сильными электронными корреляциями, так как расчёты силы ЭФВ методами локального функционала плотности (LDA) [120, 121] дают на порядок меньшее значение λ [72]. Однако эти результаты не вызывают доверия, поскольку полученная в рамках LDA ширина фононов [122] на порядок меньше, чем наблюдаемая экспериментально [123]. В недавно опубликованной работе [124] содержится утверждение, что фононы оказывают пренебрежимо малое воздействие на фотоэмиссионные спектры и, следовательно, так называемый кинк (от англ. kink — излом) в спектрах не может быть вызван ЭФВ. Однако, как впоследствии было показано в [125], расчёт методом функционала

плотности [124] также не воспроизводит дисперсию и ширину линии фононов [126–130], а следовательно, результаты этого расчёта являются сомнительными и в описании электронной дисперсии. С другой стороны, полученное согласно сильнокоррелированной физике сильное ЭФВ правильно описывает ширину фононов [68, 108]. Подробное обсуждение различных моделей и типов ЭФВ в ВТСП можно найти в обзоре [14].

3. Экспериментальные свидетельства роли электрон-фононного взаимодействия

Благодаря огромным усилиям, приложенным к развитию теории соединений с ВТСП, многие отдельно взятые их свойства, если проигнорировать противоречия с другими экспериментальными фактами, можно объяснить в рамках большого числа моделей. Например, авторы работы [131] ищут объяснение шахматному упорядочению заряда (checkerboard structure) в более чем десяти предсказанных фазах различной природы. Поэтому при множестве противоречащих друг другу толкований единственными неоспоримыми доказательствами существования значительного ЭФВ являются аномалии фононных спектров и изотопический эффект.

Для определения того, какие из фононов являются аномальными, делаются попытки подогнать измеренный фононный спектр с помощью расчёта в рамках оболочечной модели. Фононы, обладающие энергией значительно меньшей, чем предсказывается оболочечной моделью, считаются аномальными (см. [132–134]). Например, в допированных системах аномальными являются полудыхательные и дыхательные фононы [114, 123, 130, 135–141]. Другим свойством, указывающим на аномальность фонона, является его большая ширина, достигающая иногда 5 мэВ [123], чем он сильно выделяется на фоне других фононов, ширина линий которых определяется разрешением экспериментальной установки. Например, дыхательные и полудыхательные фононы, имеющие сильную связь с синглетом Джанга–Райса, обладают большой шириной, а квадрупольные, не связанные с синглетом, — малой [130]. Значительную ширину (16 мэВ) имеет также фонон O_2^Z , связанный с движением кислорода перпендикулярно плоскости CuO_2 [80, 114]. Ещё одним аномальным фононом является фонон B_{1g} , изменяющий энергию и ширину с изменением температуры [142–146]. Также обнаружена аномалия фононов с волновым вектором $\mathbf{q} = (0, 25, 0, 0)$, которые имеют сильную связь с неоднородностями распределения заряда [126]. Большое количество информации об исследованиях фононных спектров можно найти в обзоре [82].

Проявление изотопического эффекта в каких-либо электронных характеристиках неоспоримо указывает на наличие ЭФВ. Длительная история исследований изотопического эффекта показала, что изотопический эффект в сверхпроводящей фазе существенно зависит от уровня допирования, почти исчезая при оптимальном уровне допирования и усиливаясь при его уменьшении [147–159]. Эффект является особенно сильным на границе раздела сверхпроводящей фазы, фазы антиферромагнетика и фазы спинового стекла [160]. Помимо выявленного в процитированных выше работах влияния изотопического замещения на температуру сверхпроводящего перехода, сверхтекучую плотность и эффективную массу носителя, обнаружено влияние изотопи-

ческого замещения на температуру антиферромагнитного перехода [161] и температуру перехода в фазу спинового стекла [162]. Сильное влияние изотопического замещения на температуру возникновения псевдощели обнаружено в работах [163–166]. Сдвиг пика, интерпретируемого для недопированных соединений как двухмагнетонный переход плюс однофононный переход [167, 168], был обнаружен при изотопическом замещении в инфракрасной части спектра оптического поглощения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ [169]. Изучение влияния изотопического замещения в спектрах оптического поглощения выявило, что остатки незамещённых ионов O^{16} в матрице O^{18} приводят к появлению дефектных мод на низких энергиях [170]. Влияние изотопического замещения на спектры ФУР подробно рассматривается в разделе 4.4.

Доказательство важности ЭФВ, в дополнение к доказательствам, полученным с помощью классических методик, было найдено в экспериментах [171] по исследованию временной эволюции деформации решётки, следующей за поляризованным возбуждением носителей. В этих экспериментах изменение решётки со временем изучалось методом электронной дифракции с временным разрешением. Туннельные эксперименты также показывают [172], что туннельный ток имеет особенности при тех же самых значениях энергии, на которых находятся пики комбинационного рассеяния [173, 174], что тоже свидетельствует о значительном ЭФВ. Об этом же говорят и данные недавнего эксперимента, в котором наблюдалось аномально большое фотоиндуцированное расширение в купратах [175].

4. Проявления электрон-фононного взаимодействия в спектроскопии

Как отмечалось во введении, одним из главных противоречий между теоретическим описанием и экспериментальными данными по ФУР в недопированных соединениях являлась аномальная ширина линии наблюдаемого сигнала ФУР. Экспериментальный сигнал ФУР в недопированном соединении соответствует одночастичной спектральной функции (функции Лемана (ФЛ)) одной дырки в обобщённой $t-t'-t''-J$ -модели (2), (3). Спектральная функция этой модели [13, 44, 97] представляет собой узкий резонанс на низких энергиях и высокоэнергетический некогерентный континуум. Следует отметить, что в отличие от спина и заряда в одномерных системах, где наблюдается их разделение [176, 177], в двумерной системе спин и заряд не разделяются и вес (Z -фактор) основного состояния не равен нулю [44, 178, 179]. Дисперсия энергии, т.е. зависимость энергии от волнового вектора, этого узкого резонанса в точности воспроизводила экспериментально наблюдаемую дисперсию пика. Однако экспериментально наблюдаемая ширина пика при волновом векторе $(\pi/2, \pi/2)$, соответствующем наинизшей по энергии точке дисперсии, превышает всю ширину дисперсии зоны [64, 66]. С другой стороны, теоретическая ширина пика $t-J$ -модели в основном состоянии с волновым вектором $(\pi/2, \pi/2)$, полученная при точном решении задачи методом ДМК, оказалась пренебрежимо малой [44].

Ранние попытки объяснить аномалию ширины линии взаимодействием с дополнительными бозонными возбуждениями, например фононами [180], наталкивались на общий вопрос: возможна ли в принципе ситуация, при

которой время жизни частицы уменьшено взаимодействием на несколько порядков, а дисперсия абсолютно неперенормирована? Объяснение этого уширения линии дефектностью кристаллической решётки можно отбросить, поскольку допирование вносит дополнительный беспорядок, а пик ФУР, напротив, при увеличении уровня допирования становится более узким.

Первые из наблюдаемых в спектроскопии проявлений ЭФВ были обнаружены в фононных спектрах, где наблюдалось смягчение и уширение фононных линий. Результаты различных теоретических подходов к описанию фононных аномалий ВТСП-соединений приведены в разделе 4.1.

Задача о ФЛ дырки в модели t - J - H , которая была решена в [49], описана в разделе 4.2. Оказалось, что уже при довольно малых константах ЭФВ, $\lambda > 0,4$, ситуация напоминает экспериментальную. Истинная квазичастица превращается в почти бездисперсный полярон с малым радиусом, который почти не виден в спектрах ФУР из-за малого веса. Напротив, широкий пик встряхивания Франка–Кондона наследует дисперсию не взаимодействующей с фононами квазичастицы t - J -модели.

Для того чтобы достичь соответствия с экспериментальной ситуацией, в t - J - H -модели необходимо принять значения константы связи $\lambda > 0,4$ – $0,55$ [49, 181], а в более реалистичной t - t' - t'' - J -модели требуется выполнение условия $\lambda > 0,6$ [52]. Поэтому с особой остротой встала задача определения величины константы ЭФВ λ . Эта задача была решена несколькими методами в [69]. Оценки λ , полученные по данным об изменении энергии синглета Джанга–Райса при деформации решётки фононами, по измерениям ширины линии и по смещению пика ФУР относительно химического потенциала дают одно и то же значение: $\lambda \sim 1$, которое достаточно велико для реализации сценария, предложенного в [49]. Различные способы получения оценок константы ЭФВ подробно описаны в разделе 4.3.

Естественно, для интерпретации спектров ФУР недопированных высокотемпературных сверхпроводников в рамках представлений о поляронах сильной связи требуется проведение решающего эксперимента. Таким экспериментом может быть эксперимент по изучению влияния изотопического замещения на спектры ФУР. Теоретическое изучение изотопического эффекта в спектрах ФУР недопированных соединений проведено в [52] (см. раздел 4.4). Исследование изотопического эффекта в оптимально допированных соединениях, прежде чем был найден заслуживающий доверия результат [182], прошло через несколько противоречивых стадий [183–185]. Исследовать изотопическое замещение в недопированных соединениях ещё сложнее, поэтому экспериментальной проверки предсказаний [52] пока не проводилось.

Ещё в ранних работах по ФУР [67] отмечалось, что за счёт простого поляронного эффекта нельзя объяснить аномально большую температурную зависимость спектров ФУР. Также было показано [186], что чистая t - J -модель тоже не способна объяснить наблюдаемые в эксперименте эффекты. Поэтому в [56] с привлечением к рассмотрению ЭФВ, которое показало свою плодотворность при объяснении других свойств, была изучена температурная зависимость ФУР в рамках t - J - H -модели. Сопоставление теоретических результатов с экспериментальными, демонстрирующее важность вкла-

да в температурную зависимость как решёточных, так и магнитных степеней свободы, приведено в разделе 4.5.

Ещё одно доказательство важности взаимодействия магнитных и решёточных степеней свободы можно получить из анализа структуры спектров оптического поглощения слабодопированных соединений. Двухпиковая структура в инфракрасном диапазоне, которая давно просматривалась в экспериментальных спектрах (см. рис. 3 в [35], рис. 9 в [31], а также [187–192]), была отчётливо выявлена в недавних экспериментах [57]. Раздел 4.6 содержит результаты расчёта спектров оптического поглощения в рамках t - J - H -модели [57], объясняющие двухпиковую структуру поглощения совместным воздействием магнитных и решёточных степеней свободы. Из анализа зависимости оптического поглощения от уровня допирования следует, что большая, $\lambda \sim 1$, эффективная константа ЭФВ в недопированных соединениях уменьшается при допировании, достигая умеренной, но всё же существенной ($\lambda \sim 0,5$) величины при оптимальном уровне допирования.

Картина спектроскопических проявлений ЭФВ будет неполной, если не упомянуть о результатах интенсивных экспериментальных исследований, посвящённых кинкам в спектрах ФУР. Полного согласия в том, чем вызваны эти кинки — взаимодействием зарядовых квазичастиц с магнитной резонансной модой или фононами, до сих пор нет. Однако на основе результатов последних экспериментов по исследованию проявлений изотопического эффекта в спектрах ФУР и по изучению кинков в спектрах ФУР допированных электронами ВТСП можно все-таки с большой степенью уверенности предполагать фононное происхождение этих знаменитых аномалий. Обзор результатов содержится в разделе 4.7.

4.1. Влияние электрон-фононного взаимодействия на фононы

Наличие ЭФВ приводит к уменьшению энергии фононов, их смягчению и затуханию, т.е. к уширению линии, наблюдаемой в эксперименте по рассеянию нейтронов. В одной из самых ранних теоретических работ смягчение фононов продемонстрировано с помощью точной диагонализации на малом кластере редуцированного гамма-матрикса трёхзонной модели [193].

В работах [102, 103, 106, 111] было рассчитано смягчение дыхательного (с волновым вектором $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$) и полудыхательного ($\mathbf{q} = (\pi, 0)$) фононов. Теоретический расчёт предсказал зависимость смягчения этих фононов от концентрации допированных дырок, позднее подтверждённую экспериментально [80]. Результаты расчёта уширения фононов [103] показали в полном согласии с экспериментом, что ширина пика является максимальной при $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ и значительно меньшей при $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$.

В работе [107] рассматривалась природа ЭФВ и исследовалась его зависимость от волновых векторов. В частности, в [107] было показано, что вершинные поправки усиливают эффективное взаимодействие для сверхпроводящего спаривания дырок d-симметрии на тех же волновых векторах, на которых в экспериментах по рассеянию нейтронов наблюдаются максимальное смягчение и уширение продольного оптического фонона.

В работах [194, 195] рассматривался зарядовый отклик ВТСП-соединений, возникающий вследствие ионности этих соединений. В указанных работах ещё до

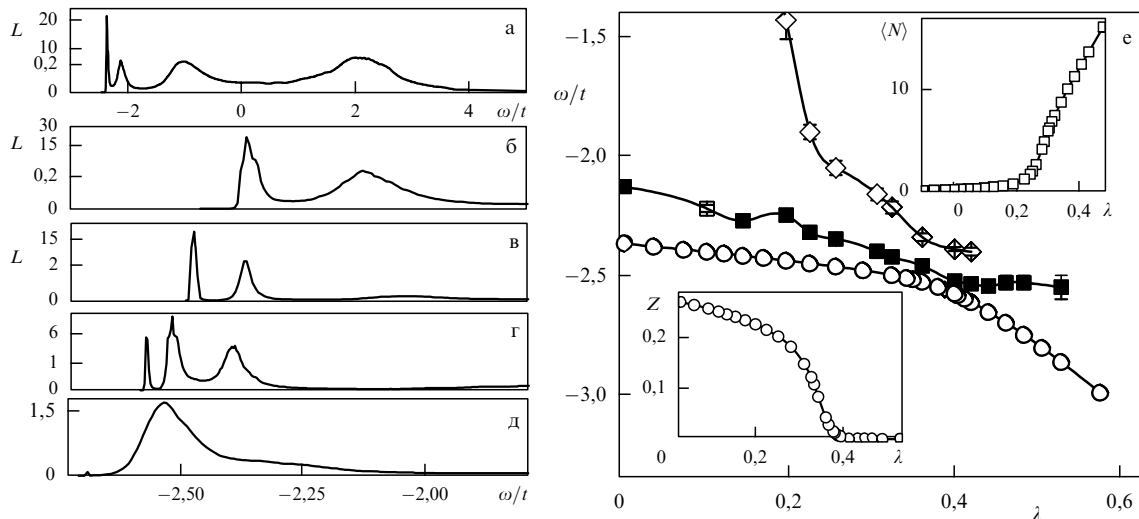


Рис. 1. (а) Функция Лемана основного состояния при $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$, $J/t = 0,3$ и $\lambda = 0$. Низкоэнергетическая часть ФЛ в основном состоянии при $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$, $J/t = 0,3$ и (б) $\lambda = 0$, (в) $\lambda = 0,3$, (г) $\lambda = 0,4$, (д) $\lambda = 0,46$. (е) Зависимость от константы ЭФВ λ при $J/t = 0,3$ энергий наинизших резонансов ФЛ, Z -фактора наинизшего пика (на нижней вставке) и среднего числа фононов $\langle N \rangle$ (на верхней вставке).

проведения экспериментов было предсказано сильное смягчение фононов, связанных с фононами, поляризованными вдоль оси c .

Смягчение фононов в модели Холстейна–Хаббарда было рассчитано методом динамического среднего поля в работе [181], где было показано, что в недопированной системе отталкивание Хаббарда U уменьшает смягчение фононов, вызванное ЭФВ. Однако при увеличении уровня допирования смягчение фононов, согласно наблюдаемой в эксперименте тенденции, усиливается.

В работе [68] с использованием данных первопринципных (*ab initio*) расчётов на основе трёхзонной модели сформулирована t – J -модель с учётом ЭФВ. Спектральная функция фононов этой модели изучена методом точной диагонализации. Дисперсия фононов, рассчитанная при уровне допирования $\delta = 0,125$, совпадает с соответствующими экспериментальными данными.

4.2. Мнимые квазичастицы в спектрах фотоэмиссии

Спектральная функция t – J -Н-модели (2)–(4) ранее исследовалась методом точной диагонализации малых кластеров [196] и в приближении непересекающихся диаграмм (ПНД), в котором не учитывались пересечения ни магнонных линий, ни фононных пропагаторов [197, 198]. Однако малый размер системы в методе точной диагонализации подразумевает наличие дискретного спектра [196, 199], что существенно затрудняет изучение формы линии. Что касается ПНД, то оно пригодно для описания ЭФВ только в рамках применимости теории возмущений [49]. С другой стороны, ПНД применимо к описанию взаимодействия с магнонами, так как спин $S = 1/2$ не может перевернуться более одного раза, и, следовательно, взаимодействие полярона с магнитной подсистемой не может быть сильным.

В разложении ДМК в работе [49] учитывается взаимное пересечение фононных пропагаторов и, для того чтобы избежать проблемы знака, пренебрегается взаимным пересечением магнонных линий. Как показывает сравнение результатов, полученных в ПНД и методом точной диагонализации малых кластеров [92, 93, 96, 200, 201] в t – J -модели, ПНД для магновов при $J/t \leq 0,4$

работает хорошо. Проведённое впоследствии исследование влияния ПНД по магнонам на результаты, полученные в рамках t – J -Н-модели [202], подтвердило выводы предыдущих работ. Недавний расчёт спектров ФУР [203] вариационным методом [204, 205] без привлечения ПНД также показал, что пренебрежение пересечением магнонных линий в работе [49] являлось правомерным.

На рисунке 1а–д представлена рассчитанная низкоэнергетическая часть спектра ФУР в основном состоянии при $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ в режиме слабого, промежуточного и сильного ЭФВ. Зависимости от константы связи энергий резонансов (рис. 1е), $Z^{\mathbf{k}=(\pi/2, \pi/2)}$ -фактора нижнего пика (см. нижнюю вставку на рис. 1е) и среднего числа фононов в поляронном облаке $\langle N \rangle$ (см. верхнюю вставку на рис. 1е) демонстрируют типичную для автолокализации картину (см. [47, 206]).

Зависимость функции Лемана от импульса представлена на рис. 2а–г. Положение квазичастичного пика полярона с малым спектральным весом, обозначенного вертикальной стрелкой на рис. 2а–г, почти не зависит от импульса. Дисперсия широкого пика встряхивания Франка–Кондона с хорошей степенью точности может быть выражена зависимостью (рис. 2д)

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\min} + \frac{W_{J/t}}{5} \left\{ (\cos k_x + \cos k_y)^2 + \frac{1}{4} [\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y)]^2 \right\}, \quad (8)$$

которая прекрасно описывает дисперсию в чистой t – J -модели в широком диапазоне обменных констант $0,1 < J/t < 0,9$ [96]. Следует отметить, что указанное выше свойство дисперсии широкого пика является общим свойством режима сильной связи.

Тот факт, что пик встряхивания Франка–Кондона воспроизводит дисперсию невзаимодействующей с фононами частицы, является прямым следствием близости режима к адиабатическому. Действительно, фононная частота Ω_0 намного меньше, чем ширина зоны t – J -модели $2J$, и адиабатический параметр $\Omega_0/2J = 1/6 \ll 1$ является малым. Кроме того, в пределе сильной связи

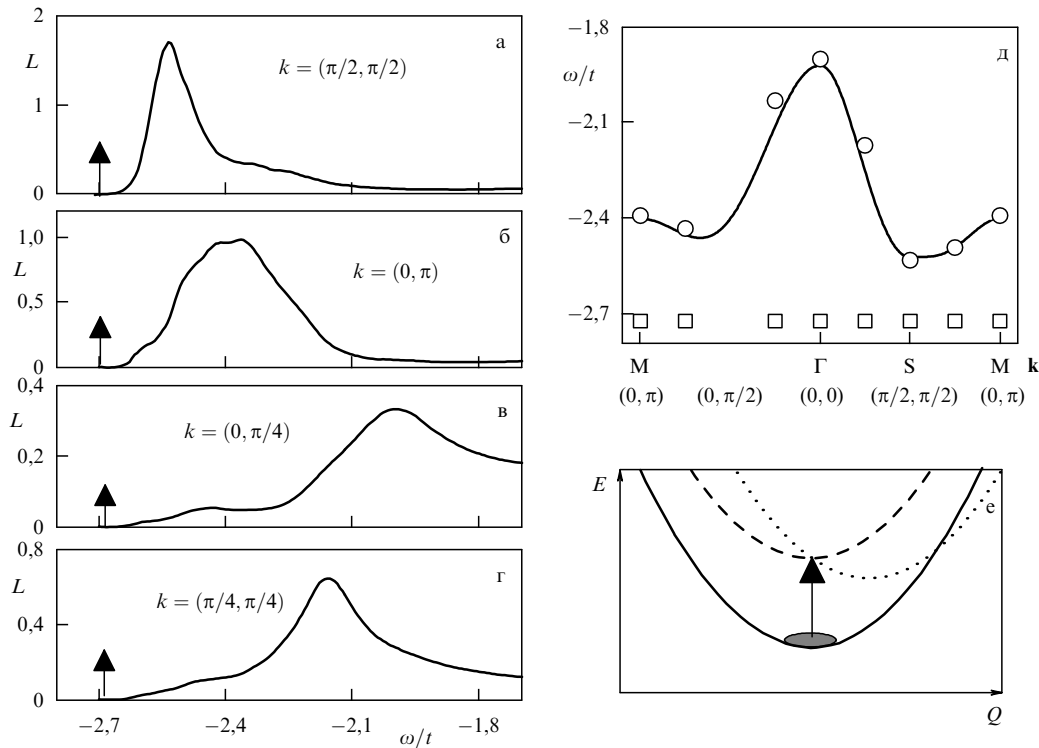


Рис. 2. (а–г) Низкоэнергетическая часть ФЛ дырки при $J/t = 0,3$ и $\lambda = 0,46$, стрелки обозначают положение невидимого низколежащего резонанса с малым весом. (д) Дисперсия энергий резонансов при $J/t = 0,3$: широкий резонанс (кружки) и квазичастица с малым весом (квадраты) при $\lambda = 0,46$. Сплошная кривая — дисперсия дырки (8) в чистой t – J -модели при $J/t = 0,3$ ($W_{J/t=0,3} = 0,6$) и $\varepsilon_{\min} = -2,52$. (е) Потенциалы основного состояния $Q^2/2$ (сплошная кривая), возбуждённого состояния без релаксации $D + Q^2/2$ (штриховая кривая) и возбуждённого состояния после релаксации решётки $D + (Q - \lambda)^2/2 - \lambda^2/2$ (пунктирная кривая); фотоэмиссионный переход электрона из основного состояния, обозначенного затемнённым эллипсом, показан стрелкой.

существует ещё один важный параметр. Этим параметром является отношение между характерным временем акта экспериментального измерения $\tau_{\text{мр}} = \hbar/\Delta E$ (где ΔE — разность энергий основного состояния полярона и пика встряхивания) и характерным временем колебаний решётки $\tau \approx 1/\Omega_0$. Отношение $\tau_{\text{мр}}/\tau$ намного меньше единицы, и, следовательно, быстрый процесс фотоэмиссии "видит" ионы в замороженной конфигурации, вследствие чего, конфигурация решётки при электронном переходе не изменяется [54, 207]. При достаточно низкой температуре спектральная функция перехода в пределе Франка–Кондона может быть представлена в виде суммы переходов между нижним, $E_{\text{low}}(Q)$, и верхним, $E_{\text{up}}(Q)$, листами адиабатического потенциала, взвешенных адиабатической волновой функцией нижнего листа $|\psi_{\text{low}}(Q)|^2$ [65]. Если ЭФВ отсутствует и в начальном, $E_{\text{low}}(Q) = Q^2/2$, и в конечном, $E_{\text{up}}(Q) = D + Q^2/2$, состояниях перехода, то спектральный пик имеет максимум при энергии D . Однако если ЭФВ $\Delta E_{\text{up}}(Q) = -\lambda Q$ присутствует только в конечном состоянии, т.е. только тогда, когда в моттовском диэлектрике в результате акта фотоэмиссии возникает дырка, то верхний лист адиабатического потенциала $E_{\text{up}}(Q) = D - \lambda^2/2 + (Q - \lambda)^2/2$ имеет при $Q = 0$ ту же самую энергию. Следовательно, поскольку максимум функции вероятности $|\psi_{\text{low}}(Q)|^2$ находится на $Q = 0$, пик спектральной функции перехода уширяется, но его энергия не сдвигается [65] (рис. 2е).

Поведение полученного в расчёте пика соответствует поведению экспериментальных пиков ФУР. Дисперсия широкого пика на рис. 2 воспроизводит дисперсию узкого пика t – J -модели (рис. 2а–д). Нижний, практи-

чески бездисперсный, пик, соответствующий полярону с малым радиусом, имеет малый вес и, следовательно, может наблюдаться в эксперименте только при особых условиях. С другой стороны, в соответствии с результатами эксперимента зависимость веса широкого пика $Z^{(k)}$ в точности воспроизводит поведение $Z^{(k)}$ -фактора узкого резонанса в чистой t – J -модели. Причина этого состоит в том, что в адиабатическом пределе $\Omega_0/2J \ll 1$ весь вес острого резонанса t – J -модели переходит при сильном ЭФВ в широкий пик Франка–Кондона. Эта теоретическая картина подразумевает, что химический потенциал слабодопированных купратов не связан с широким резонансом, наблюдаемым в спектрах ФУР, а привязан к настоящей квазичастице с малым Z -фактором. Впоследствии этот вывод был экспериментально подтверждён в работе [66] (рис. 3). Положение химического потенциала на рис. 3б привязано к энергии, обозначенной точкой В, в то время как энергия широкого пика в точке А сильно отделена от химического потенциала, значения которого для различных образцов обозначены горизонтальными прямыми.

4.3. Определение константы электрон-фононного взаимодействия λ

Наиболее тщательное определение константы ЭФВ λ было проведено в работе [69]. К этому времени предложенная в работе [49] картина "невидимой" бездисперсной квазичастицы и широкого пика встряхивания Франка–Кондона получила экспериментальное подтверждение при измерении ФУР на соединении $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ [66]. Поэтому в работе [69] для объяс-

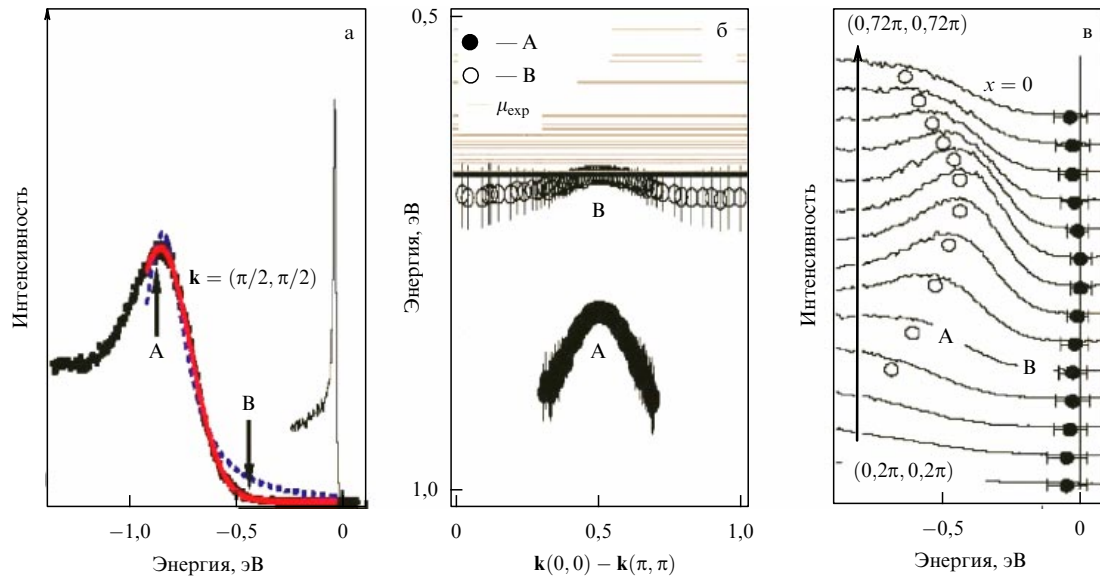


Рис. 3. (а) Спектр ФУР недопированного $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ в нодальной точке $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$, подогнанный лоренцианом (штриховая кривая) и гауссианом (сплошная жирная кривая). Точки А и В определяют максимум пика и точку возникновения ненулевой спектральной плотности соответственно. Узкий пик в окрестности нулевой энергии — спектр ФУР в SrRuO_4 . (б) Дисперсия энергии в точках А и В. (в) Экспериментальные спектры в окрестности нодальной точки. (По данным работы [66].)

нения широкой линии спектра ФУР в недопированном соединении La_2CuO_4 использовался редуцированный гамильтониан трёхзонной модели с сильным ЭФВ [68]. Использование полученных в работе [68] данных о силе и структуре ЭФВ в рамках оболочечной модели [113] дало возможность описать аномалии фононной дисперсии в La_2CuO_4 [68].

ЭФВ в реалистической модели с 21 фононной модой имеет вид

$$H_{\text{ср}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}\nu} g_{\mathbf{q}\nu} (1 - n_i) \sqrt{2\omega_{\mathbf{q}\nu}} Q_{\mathbf{q}\nu} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_i). \quad (9)$$

Гамильтониан (9) описывает одноузельное взаимодействие с дырками, образующими синглет в t - J -модели. Взаимодействие линейно по обобщённой фононной координате $Q_{\mathbf{q}\nu}$ и пропорционально константам связи $g_{\mathbf{q}\nu}$. Фононная мода с частотой $\omega_{\mathbf{q}\nu}$ определяется её волновым вектором $\mathbf{q}$ и индексом ветви ν ; n_i обозначает электронное заполнение узла $\mathbf{R}_i$, N — число узлов.

При определении эффективной константы связи как суммы

$$\lambda \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\nu} \frac{|g_{\mathbf{q}\nu}|^2}{4t\omega_{\mathbf{q}\nu}} \quad (10)$$

в работе [69] при $t = 0,4$ эВ получено значение $\lambda = 1,2$. В [69] также вычислено дифференциальное спектральное распределение константы связи

$$\gamma(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\nu} \frac{|g_{\mathbf{q}\nu}|^2}{\omega_{\mathbf{q}\nu}} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}\nu}). \quad (11)$$

Авторы [69] сравнили спектральное распределение (11) с измеренной в работе [208] тонкой структурой действительной части перенормировки спектра квазичастиц в окрестности кинка. Хорошее согласие положения пиков этих двух зависимостей подтверждает как фононную

природу кинка, так и правильность оценки силы ЭФВ, по крайней мере, по порядку величины.

Для определения константы ЭФВ из экспериментальных данных о разнице между энергией истинной квазичастицы с малым весом и энергией пика встряхивания Франка – Кондона в уравнении (10) было проведено скалирование полученных из редукции трёхзонной модели констант $g_{\mathbf{q}\nu} \rightarrow \Lambda g_{\mathbf{q}\nu}$. При $\Lambda = 1$ теоретическое значение энергии связи (1,2 эВ) значительно превышает экспериментальное (0,5 эВ). Так как энергия связи пропорциональна Λ^2 , даже небольшое завышение констант связи, обусловленное недостаточным учётом экранирования в оболочечной модели, может привести к такому эффекту. Разумная оценка энергии связи и ширины пика получается при $\Lambda = 0,8$, что соответствует константе ЭФВ $\lambda = 0,75$. Таким образом, примерное значение константы ЭФВ в купратах $\lambda \approx 0,75 - 1,2$ больше критического параметра $\lambda_c = 0,6$, необходимого для перехода t - t' - t'' - J -Н-модели в режим сильной связи [52] и реализации предложенного в работе [49] сценария.

Другим источником сведений о величине ЭФВ является температурная зависимость спектров ФУР в недопированных соединениях. Из сравнения теоретических данных по температурной зависимости ширины пика Франка – Кондона [56] с экспериментальными [209] также можно заключить, что значение константы ЭФВ находится в диапазоне $0,5 < \lambda < 1,0$.

К таким же значениям привело сопоставление спектров ФУР с результатами теоретического расчёта высокоэнергетического спектра t - J -Н-модели. Экспериментально наблюдаемые в спектрах ФУР при энергиях от 1 эВ до 2 эВ "водопады" [210–214] были успешно объяснены как обусловленные поведением искусственно уширенных высокоэнергетических резонансов Эйри в t - J -модели [215, 216]. Предпринятая впоследствии попытка объяснить уширение за счёт конечной температуры и взаимодействия с фононами показала, что воспроизвести ширину линии высокоэнергетических

резонансов, учитывая только конечную температуру, невозможно, необходим также учёт ЭФВ [217]. Значения параметров $\gamma = 0,5t$ и $\Omega_0 = 0,1t$ [217] позволяют оценить константу ЭФВ как $\lambda = 0,63$, что совпадает с другими оценками.

Недавний эксперимент по ФУР допированных электронами ВТСП-соединений $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ($x = 0,1, 0,15, 0,18$), $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ($x = 0,15$) и $\text{Eu}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ [218] привёл к оценке $\lambda = 0,8$. Константа связи определялась из сравнения резкого увеличения ширины линий экспериментальных спектров, возникающего при прохождении энергии кинка, с теоретическим скачкообразным возрастанием ширины линии при прохождении бездисперсного эйнштейновского фона. Значение $\lambda = 0,8$ хорошо соответствует результатам других методов.

Другой метод определения λ был предложен в работе [219]. Сравнение величины изотопического сдвига пика оптического поглощения недопированного соединения [169] с результатами теоретических расчётов [220] привело к выводу о том, что λ немного больше единицы.

Недавно разработанная техника электронной дифракции с временным разрешением позволила изучить временную эволюцию релаксации состояний [171], возникающих при поляризованном возбуждении носителей. Сопоставление экспериментальных результатов с результатами теории релаксации электронов в металлах [221] позволяет определить λ . Авторы работы [171] получили анизотропную λ , которая, в зависимости от кристаллографического направления, находится в диапазоне $0,08 < \lambda < 0,55$.

Ещё один метод определения константы связи λ связан с описанием оптического поглощения при высоких энергиях, больших 2 эВ, с помощью расчётов, основанных на электронной зонной структуре [5, 222–224]. Правильное описание эксперимента требует введения больших констант связи, $\lambda > 1$ [225, 226]. Также следует отметить, что ряд расчётов методом функционала плотности [227–231] даёт значения λ в диапазоне $0,6 \leq \lambda \leq 1,5$.

4.4. Изотопический эффект в фотоэмиссии

Объектом изучения изотопического эффекта (ИЭ) в ФУР являлись кинки в дисперсии квазичастиц, наблюдаемые в ВТСП-системах при достаточно высоком уровне допирования. Сообщение о чрезвычайно сильном ИЭ при замещении O^{16} и O^{18} со сдвигами дисперсии более чем в 10 мэВ [183, 232] было воспринято с настороженностью, которая была вызвана не столько большой величиной сдвига, сколько тем, что изотопический сдвиг наблюдался не только на энергиях кинка, но и в энергетическом интервале, простирающемся на несколько сотен мэВ.

Группа Д. Дессо (D. Dessau) приложила огромные усилия для того, чтобы проверить результаты работ [183, 232]. Измерения показали [184], что аномальный ИЭ при больших энергиях отсутствует и все сдвиги в спектрах ФУР соответствуют изотопическому изменению фононной частоты на 3 мэВ. Отмечено, что даже ничтожный угловой сдвиг образца в $0,1^\circ$ может приводить к существенным сдвигам дисперсии на высоких энергиях. Авторы работы [184] отмечают, что их результат совместим с результатами туннельных экспериментов [233, 234], в которых наблюдался сдвиг спектральных особенностей на величину порядка 3 мэВ. В последовавшей за этим работе [235] различие результатов работ [183, 184, 232]

объяснялось разным уровнем допирования излучаемых образцов.

Наиболее детальный анализ влияния ИЭ в спектрах ФУР приведён в [182]. Сдвиг дисперсии наблюдается только в окрестности кинка, и его характерная величина составляет $(3,4 \pm 0,5)$ мэВ. Изумительная точность измерений в [182] связана с применением новой методики низкоэнергетической ФУР с разрешением, значительно превышающим разрешение обычной техники ФУР [236]. Результаты соответствующего расчёта ИЭ показывают, что дыхательная мода на энергии 70 мэВ должна иметь изотопический сдвиг 3,9 мэВ, что хорошо согласуется с экспериментально полученным значением.

Теоретически ИЭ в поляронных системах исследовался во многих работах. Модель Холстейна изучалась с помощью метода интегралов по траекториям [116] в работах [237–240] и метода динамической теории среднего поля в [241]. Влияние изотопического замещения на эффективную массу оказалось особенно большим, когда система была близка к переходу в режим сильной связи. В работе [242] ИЭ изучался в рамках восприимчивости модели Кампа–Шриффера [243] и рассматривалось его влияние на ФУР. ИЭ в рамках модели Холстейна–Хаббарда рассматривался в [244–246].

Среди работ по ИЭ следует выделить изучение спектров ФУР в рамках реалистичной трёхзонной модели [247]. В работе [247] не учитывается взаимовлияние ЭФВ и электронных корреляций, однако реалистичность трёхзонной модели позволяет сделать множество полезных заключений. Как и в эксперименте [182], самый сильный ИЭ наблюдается в окрестности фононной частоты. Авторы [247] на основе рассмотрения вкладов в перенормировку спектров ФУР от электронной подсистемы пришли к заключению, что кинк не может быть вызван электрон-электронным взаимодействием — он обусловлен ЭФВ.

В настоящее время является важным проведение экспериментов по изучению эффекта изотопического замещения в недопированных соединениях. Кроме ВТСП-соединений имеется ряд других систем, в которых механизм уширения спектров ФУР за счёт сильного ЭФВ может рассматриваться как один из альтернативных сценариев. К таким системам относятся двухатомные молекулы [248], манганиты с колоссальным магнетосопротивлением [249], квазиодномерные проводники Пайерлса [250, 251], магнетиты Верве [252].

Теоретическое изучение ИЭ в недопированных соединениях было проведено в работе [52]. Безразмерная константа связи $\lambda = \gamma^2/4t\Omega$ в (4) является инвариантом в простейшем случае ИЭ. При стандартном соотношении $\Omega \sim 1/\sqrt{M}$ между фононной частотой и массой безразмерная константа ЭФВ λ не зависит от изотопического фактора $\kappa_{\text{iso}} = \Omega/\Omega_0 = \sqrt{M_0/M}$, который определён как отношение фононных частот изотопически замещённой (Ω) и нормальной (Ω_0) систем. Параметры t , t' , t'' и J были выбраны так, чтобы они хорошо воспроизводили дисперсию ФУР в недопированных соединениях [13]: $J/t = 0,4$, $t'/t = -0,34$ и $t''/t = 0,23$. В работе [12] приняты значения частоты фонона $\Omega_0 = 0,2t$ и изотопического фактора при замещении кислорода O^{16} изотопом O^{18} $\kappa_{\text{iso}} = \sqrt{16/18}$.

Для того чтобы гарантировать стабильность процедуры аналитического продолжения ДМК-результатов в мнимом времени на вещественные энергии, в работе [52]

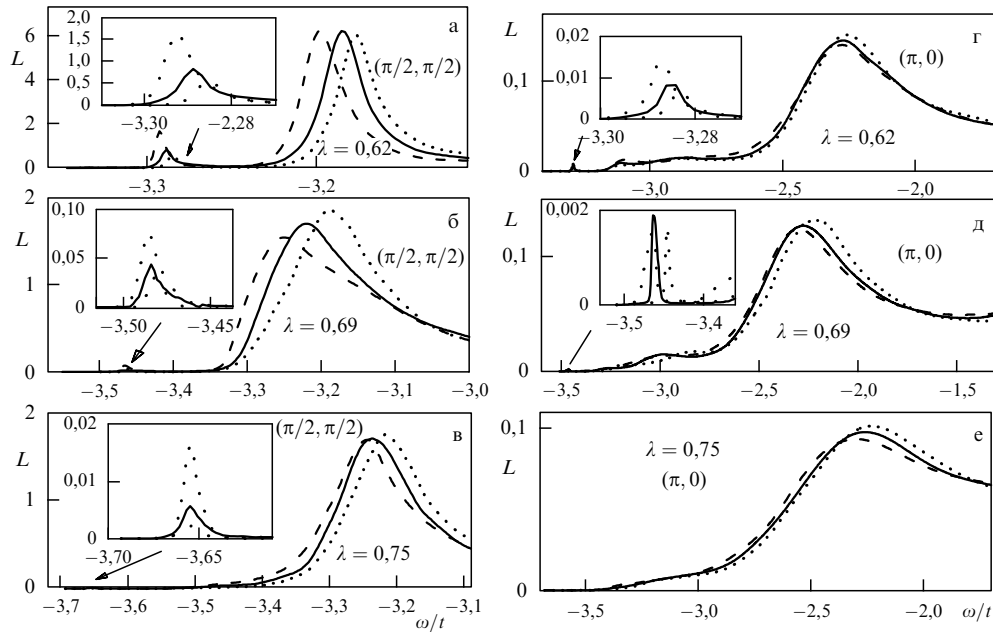


Рис. 4. Низкоэнергетическая часть ФЛ дырки: нормальное соединение (сплошная кривая), изотопически замещённое соединение (пунктирная кривая) "антиизотопически" замещённое соединение (штриховая кривая). ФЛ при разных величинах связи в нодальной $(\pi/2, \pi/2)$ точке (а – в) и антинодальной $(\pi, 0)$ точке (г – е). На вставках показан низкоэнергетический пик настоящей квазичастицы.

были рассчитаны ФЛ для исходного ($\kappa_{\text{nor}} = 1$), изотопически замещённого ($\kappa_{\text{iso}} = \sqrt{16/18}$) и "антиизотопически" замещённого ($\kappa_{\text{ant}} = \sqrt{18/16}$) соединений. Монотонная зависимость ФЛ от κ служит доказательством стабильности спектрального анализа и позволяет оценить погрешность любой рассчитываемой величины A , используя результаты для $A_{\text{iso}} - A_{\text{nor}}$, $A_{\text{nor}} - A_{\text{ant}}$ и $(A_{\text{iso}} - A_{\text{ant}})/2$.

На рисунке 4 показано проявление ИЭ в низкоэнергетической части ФЛ дырки при разных значениях константы связи ЭФВ в нодальной и антинодальной точках. Очевиден сдвиг всех спектральных сигналов в сторону больших энергий при увеличении массы изотопа ($\kappa < 1$). Также можно заметить, что сдвиг широкого пика Франка – Кондона (ПФК) намного больше сдвига узкого пика настоящей квазичастицы. Более того, при больших λ сдвиг энергии квазичастицы стремится к нулю и ИЭ сводится к уменьшению спектрального веса Z при увеличении массы изотопа. С другой стороны, сдвиг ПФК при больших силах ЭФВ не подавляется. Во всех рассмотренных случаях, за исключением ФЛ в нодальной точке при $\lambda = 0,62$ (рис. 4а), где вес описываемой δ -функцией квазичастицы всё-таки оставался большим, существует следующая общая особенность ИЭ: высота ПФК возрастает при увеличении массы изотопа. Принимая во внимание правило сумм для ФЛ $\int_{-\infty}^{+\infty} L_k(\omega) d\omega = 1$ и нечувствительность высокоэнергетической части ФЛ к силе ЭФВ [52], можно заключить, что с увеличением массы изотопа ПФК становится уже. С целью прояснить основные тенденции ИЭ при сильной связи в работе [52] была проанализирована точно решаемая модель независимых осцилляторов (МНО) [253]. Функция Лемана МНО представляет собой распределение Пуассона:

$$L(\omega) = \exp\left(-\frac{\xi_0}{\kappa}\right) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{[\xi_0/\kappa]^l}{l!} \mathcal{G}_{\kappa,l}(\omega), \quad (12)$$

где $\xi_0 = \gamma_0^2/\Omega_0^2 = 4t\lambda/\Omega_0$ — безразмерная константа связи для исходной системы и $\mathcal{G}_{\kappa,l}(\omega) = \delta(\omega + 4t\lambda - \Omega_0\kappa l)$ — это δ -функция. Свойства распределения Пуассона объясняют многие свойства ИЭ, проявляющиеся в поведении функции Лемана.

Энергия $\omega_{\text{OP}} = -4t\lambda$ нулевой фононной линии $l = 0$ в выражении (12) не зависит от изотопического фактора. Это объясняет слабую изотопическую зависимость энергии квазичастицы, представленную на вставках рис. 4. Кроме того, в МНО изменение веса нулевой фононной линии $Z^{(0)}$ удовлетворяет соотношению

$$\frac{Z_{\text{iso}}^{(0)}}{Z_{\text{nor}}^{(0)}} = \exp\left[-\frac{\xi_0(1-\kappa)}{\kappa}\right].$$

Оценки в рамках МНО совпадают с данными метода ДМК в пределах 15 % в нодальной точке и 25 % в антинодальной. В режиме сильной связи наличие воздействия ИЭ на ПФК следует из свойств нулевого $M_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} L(\omega) d\omega = 1$, первого $M_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega L(\omega) d\omega = 0$, и второго $M_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 L(\omega) d\omega = \kappa \xi_0 \Omega_0^2$ моментов смешённого распределения Пуассона (12). Моменты M_0 и M_2 предсказывают следующее соотношение: $\mathcal{D} = h_{\text{iso}}^{\text{FCP}}/h_{\text{nor}}^{\text{FCP}} = 1/\sqrt{\kappa} \approx 1,03$, между высотами ПФК исходного и изотопически замещённого соединений. Эта оценка находится в прекрасном согласии с данными ДМК в антинодальной точке для любого из рассмотренных значений константы связи ЭФВ. В нодальной точке согласие наблюдается только при $\lambda = 0,75$ ($\mathcal{D} \approx 1,025$), в то время как при меньших λ система при том же самом волновом векторе ещё не описывается режимом сильной связи. Сдвиг низкоэнергетического края ПФК на полувысоте $\Delta_{1/2}$ должен быть пропорционален изменению квадратного корня второго момента $\Delta_{\sqrt{M_2}} = \sqrt{\xi_0} \Omega_0 [1 - \sqrt{\kappa}]$. Как было обнаружено при численном моделировании (12) с распределениями Гаусса $\mathcal{G}_{\kappa,l}(\omega)$ вместо δ -функций, соотношение $\Delta_{1/2} \approx \Delta_{\sqrt{M_2}}/2$ в диапазоне $0,62 < \lambda < 0,75$ выполняется с точностью до 10 %.

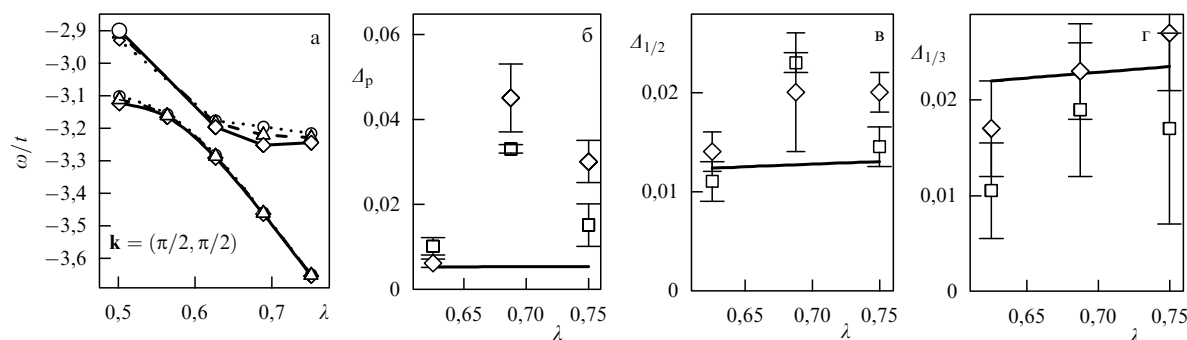


Рис. 5. (а) Энергии основного состояния и широких пиков для нормального (треугольники), изотопически замещённого (кружки) и "антиизотопически" замещённого (ромбы) соединений. Сравнение оценок ИЭ в МНО (линии) с данными точного расчёта в нодальной (квадраты) и антинодальной (ромбы) точках: (б) сдвиг вершины ПФК, (в) сдвиг переднего края ПФК на полувысоте и (г) сдвиг переднего края ПФК на одной трети высоты.

Также установлено, что сдвиг переднего края ПФК на одной трети высоты $\Delta_{1/3}$ удовлетворяет соотношению $\Delta_{1/3} \approx \Delta_{\sqrt{M_2}}$. Результаты метода ДМК хорошо согласуются с результатами, полученными в МНО, при сильном ЭФВ, $\lambda = 0,75$ (рис. 5). Однако сдвиги ПФК Δ_p и $\Delta_{1/2}$ существенно усилены в области автолокализации. Физическая причина усиления ИЭ в этой области едина для всех режимов и условий. Влияние неадиабатического матричного элемента, смешивающего основное и возбуждённое состояния, существенно зависит от частоты фонона. В адиабатическом приближении переход — резкий и неаналитический по λ [206], тогда как неадиабатический матричный элемент превращает переход в гладкий кроссовер [254]. Поэтому чем меньше частота (рис. 5а), тем острее перелом в зависимости энергии возбуждённых состояний от константы λ .

Для недопированных соединений теоретические результаты [52] не содержат приближений, за исключением приближения непересекающихся диаграмм для магнов, которое достаточно хорошо работает в данной области параметров [202]. Воздействие ИЭ на спектр ФУР значительно усиливается в области параметров, близких к автолокализации, а в области сильной связи может быть хорошо описано моделью независимых осцилляторов. Сдвиг вершины ПФК является хорошо измеряемой величиной в режиме промежуточной связи, поскольку при таком режиме этот сдвиг значительно больше. С другой стороны, сдвиг ведущего края ПФК является удобной для измерения величиной в пределе сильной связи, так как этот сдвиг возрастает с увеличением ЭФВ как $\sqrt{\lambda}$.

4.5. Аномальная температурная зависимость спектров фотоэмиссии

Уникальной чертой слабодопированных ВТСП является то, что ЭФВ и взаимодействие с магнитной подсистемой неразрывно связаны. Ярким следствием этой связи является уникальная температурная зависимость спектров ФУР. Действительно, масштаб экспериментальной зависимости ФУР значительно больше, чем предсказывается обычной теорией поляронов [67]. Сама по себе магнитная подсистема также является неподходящим кандидатом на роль фактора, ответственного за аномальную температурную зависимость [186], так как типичный масштаб энергий магнов $\sim 2J \approx 0,2$ эВ даже больше типичной энергии фононов $\sim \Omega_0 \approx 0,04$ эВ.

Недавние исследования выявили ещё одно загадочное обстоятельство, поставившее сам поляронный сценарий под вопрос. Температурная зависимость ширины линии франк-кондоновского пика линейна по температуре в диапазоне $200 \text{ K} < T < 400 \text{ K}$ [209] и обращается в нуль при экстраполяции до $T = 0$.

До недавнего времени свойства спектров ФУР в рамках t - J -Н-модели (причём только для нулевой температуры) изучались с помощью метода точной диагонализации [196, 255, 256], приближения непересекающихся диаграмм (ПНД) [197, 198] и метода ДМК [49, 52]. Основной трудностью для исследования t - J -Н-модели (2)–(4) является наличие двух совершенно различных взаимодействий дырки с бозонами. ФУР в рамках t - J -Н-модели для ненулевых температур изучалась в [56, 257], где температурная зависимость спектров ФУР t - J -Н-модели рассматривались методом гибридного динамического усреднения по импульсам (МГДУИ). МГДУИ является самосогласованным и сочетает в себе преимущества метода усреднения по импульсам (МУИ) [258–266], сохраняющего информацию о дисперсии магнов, и самосогласованного метода динамического среднего поля (МДСП) [267–277], который, в свою очередь, может успешно учитывать сильное, но локальное взаимодействие с решёткой.

Несмотря на сходный масштаб энергий, характеризующих фононную и магонную подсистемы, взаимодействия дырки с фононами и магнами существенно различаются. Взаимодействие с магнами всегда является слабым и сильно зависит от импульса, в то время как связь с фононами — сильная, но локальная. Действительно, спин $S = 1/2$ не может перевернуться более одного раза, что обеспечивает наличие не более одного магна на узле [278]. Поэтому ПНД, по крайней мере при малых значениях J/t [93, 202], является удовлетворительным приближением. Наоборот, ПНД неправильно описывает ЭФВ уже в режиме промежуточной связи [49]. Поэтому в t - J -Н-модели достаточно учитывать зависящие от импульса магны в ПНД, но при этом суммировать колебательные степени свободы непертурбативным методом. Непертурбативными, пригодными для любой силы связи подходами, в которых пренебрегается зависимостью собственно-энергетической части от волнового вектора, являются МУИ и МДСП. В рамках этих методов часть собственной энергии дырки, обусловленная ЭФВ, может быть выражена явно в виде бесконечной

дроби:

$$\Sigma_{\text{h-ph}}[\alpha(\omega)] = \frac{\gamma^2 \alpha(\omega - \Omega_0)}{1 - \frac{2\gamma^2 \alpha(\omega - \Omega_0) \alpha(\omega - 2\Omega_0)}{1 - \frac{3\gamma^2 \alpha(\omega - 2\Omega_0) \alpha(\omega - 3\Omega_0)}{1 - \dots}}} \quad (13)$$

Различие между МДСП и МУИ состоит в разном определении функции $\alpha(\omega)$, которая находится из самосогласованной процедуры в МДСП и сопоставляется в МУИ с усреднённой по волновому вектору $\mathbf{k}$ затравочной функцией Грина. Таким образом, в процедуре, предложенной в работе [56], полная собственная энергия представляется как сумма вкладов от магнитной и фононной подсистем:

$$\Sigma_{t-J\text{-H}}(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma_{\text{h-mag}}^{\text{SCBA}}(\mathbf{k}, \omega) + \Sigma_{\text{h-ph}}[\alpha_{t-J\text{-H}}(\omega)] \quad (14)$$

Слабое анизотропное взаимодействие с магнонами учтено в ПНД:

$$\Sigma_{\text{h-mag}}^{\text{SCBA}}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{M_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^2}{\omega - \omega_{\mathbf{q}} - \Sigma_{t-J\text{-H}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \omega_{\mathbf{q}}) + i\epsilon} \quad (15)$$

а функция $\alpha(\omega)$ для фононной части собственной энергии дырки,

$$\alpha_{t-J\text{-H}}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega - \Sigma_{\text{h-mag}}^{\text{SCBA}}(\mathbf{k}, \omega) + i\epsilon} \quad (16)$$

выражена через усреднённую по импульсам затравочную функцию Грина, зависимость которой от импульса $\mathbf{k}$ определяется, в свою очередь, магнонной собственной энергией (15), полученной в ПНД. Использование в уравнении (16) МУИ вместо МДСП имеет решающее значение, так как МДСП не позволяет даже отличить t - J -модель от приводящей к некогерентному движению дырки t - J_z -модели. Напротив, сравнение с результатами, полученными с помощью метода ДМК [49], показывает, что решения уравнений (13)–(16) воспроизводят не только параметры основного состояния (энергию и спектральный вес), но и ФЛ дырки [56].

Важным преимуществом предложенного в [56] подхода является то, что он легко обобщается для случая конечных температур. Переходя при описании собственной энергии $\Sigma_{\text{h-mag}}^{\text{SCBA}}(\mathbf{k}, \omega)$ к формализму Мацубары [253, 279], получаем

$$\Sigma_{\text{h-mag}}^{\text{SCBA}}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{M_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^2 (1 + n_{\text{B}}(\omega_{\mathbf{q}}))}{\omega - \omega_{\mathbf{q}} - \Sigma_{t-J\text{-H}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \omega_{\mathbf{q}}) + i\epsilon} + \sum_{\mathbf{q}} \frac{M_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{q}}^2 (n_{\text{B}}(\omega_{\mathbf{q}}))}{\omega + \omega_{\mathbf{q}} - \Sigma_{t-J\text{-H}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega + \omega_{\mathbf{q}}) + i\epsilon} \quad (17)$$

где $n_{\text{B}}(\omega)$ — распределение Бозе–Эйнштейна. Для обобщения уравнения (13) для конечных температур в работе [56] воспользовались тем, что $\alpha(\omega)$ -функция редуцирована к локальному, не зависящему от импульса значению, и, следовательно, [270, 271]

$$\Sigma_{\text{h-ph}}[\alpha(\omega)] = \alpha^{-1}(\omega) - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1-x)x^n}{\alpha^{-1}(\omega) - A_n(\omega) - B_n(\omega)} \quad (18)$$

где $x = \exp(-\beta\Omega_0)$,

$$A_n(\omega) = \frac{n(g\Omega_0)^2 \alpha(\omega + \Omega_0)}{1 - \frac{(n-1)(g\Omega_0)^2 \alpha(\omega + \Omega_0) \alpha(\omega + 2\Omega_0)}{1 - \frac{(n-2)(g\Omega_0)^2 \alpha(\omega + 2\Omega_0) \alpha(\omega + 3\Omega_0)}{1 - \dots}}},$$

$$B_n(\omega) = \frac{(n+1)(g\Omega_0)^2 \alpha(\omega - \Omega_0)}{1 - \frac{(n+2)(g\Omega_0)^2 \alpha(\omega - \Omega_0) \alpha(\omega - 2\Omega_0)}{1 - \frac{(n+3)(g\Omega_0)^2 \alpha(\omega - 2\Omega_0) \alpha(\omega - 3\Omega_0)}{1 - \dots}}}.$$

Уравнения (14), (16)–(18) являются самосогласованной системой. Три первые правила сумм для спектральной плотности [258, 265], полученной из решения системы уравнений, выполняются при любых значениях силы ЭФВ и температуры. Следовательно, результаты для положения и ширины пика в рамках этого метода заслуживают доверия [56].

Температурная зависимость ФЛ при $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ и различных значениях силы ЭФВ показана на рис. 6. Тенденции изменения положения и ширины пика находятся в согласии с наблюдаемыми в экспериментах [67, 180, 209, 280]. С повышением температуры расстояние между энергией пика Франка–Кондона и химическим потенциалом и ширина пика увеличиваются. Все температурные эффекты усиливаются при наличии ЭФВ, подтверждая тем самым, что именно переплетение магнитных и решёточных флуктуаций ответственно за аномальное поведение ФУР. Зависимость ширины пика от температуры приведена на рис. 6. Отметим, что при сильной связи с фононами ширина пика является константой при температурах меньших $T \simeq \Omega_0/2 \approx 200$ К, а при увеличении температуры в области $T > 200$ К демонстрирует возрастающую линейную зависимость, наивно экстраполируя которую в область низких температур, можно было бы получить нулевую ширину при $T = 0$. В действительности, согласно экспериментальным данным [67, 281], ширина насыщается при $T \geq \Omega_0/2$. Также подчеркнём, что производная ширины пика по температуре при $T \geq \Omega_0/2$ не зависит от силы ЭФВ, в то время как постоянная компонента ширины пика Франка–Кондона является прямым следствием сильной связи с фононами.

В работе [217] исследовалась температурная зависимость высокоэнергетических зон ФУР. Обнаруженные в спектрах ФУР на энергиях 1–2 эВ так называемые водопады, т.е. такие участки спектров в координатах энергия–импульс, на которых дисперсия становится параллельной оси энергии [210–214], были успешно описаны с помощью t - J -модели при нулевой температуре, в которую было добавлено искусственное уширение [215, 216]. Следует отметить, что пики встряхивания Франка–Кондона, спектры ФУР и оптического поглощения которых были исследованы в работах [49, 56], имеют характерную энергию не более 0,3 эВ, в то время как водопады наблюдаются в высокоэнергетической части спектральной функции. В работе [217] была поставлена задача воспроизвести уширение с помощью учёта при вычислениях конечной температуры и взаимодействия с оптическими фононами. Авторы работы [217] обобщили метод самосогласованного решения уравнения Дайсона [93, 94, 282] для случая конечных температур и включили в рассмотрение взаимодействие с оптическими фононами. Расчёты показали, что для объяснения

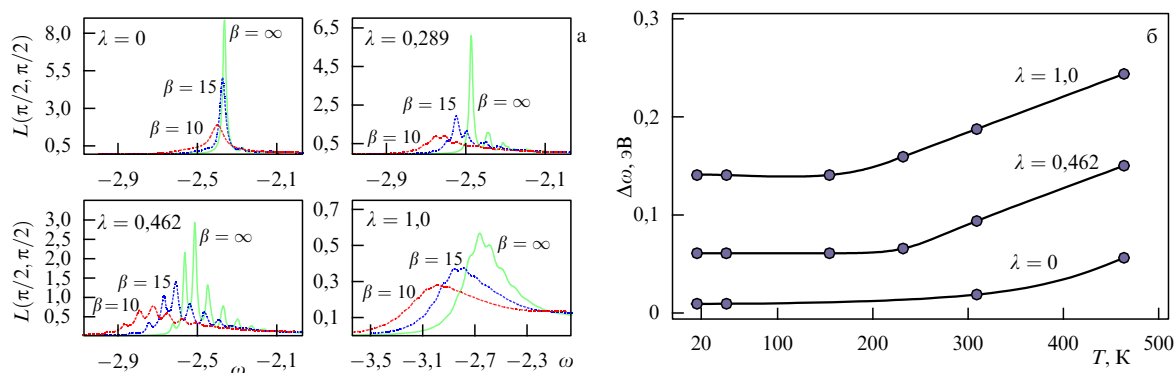


Рис. 6. (а) Функция Лемана при различных значениях силы ЭФВ λ и температуры $\beta = t/T$. (б) Ширина пика $\Delta\omega$ как функция температуры T для t - J -модели ($\lambda = 0$) и для t - J -Н-модели в пределе сильного ЭФВ ($\lambda = 0,462$ и $\lambda = 1$). Температура T в градусах Кельвина определена в предположении, что $t = 0,4$ эВ.

экспериментально наблюдаемого уширения спектра на высоких энергиях необходимо учитывать ЭФВ.

Альтернативное объяснение водопадов предложено в [283]. Специфическая спектральная плотность на больших энергиях объясняется вкладами от локализованных состояний. Эти же локализованные состояния, как показано в [283], приводят к резкой потере интенсивности пиков вдоль определённых направлений зоны Бриллюэна.

4.6. Следы электрон-фононного взаимодействия в оптической проводимости

Оптическая проводимость (ОП) слабодопированных ВТСП имеет следующие характерные черты (см. [31, 32, 95]). В недопированных соединениях ОП $\sigma(\omega)$ имеет пик на частоте $\omega \approx 1,5$ эВ, что соответствует переходу с переносом заряда между р-орбиталями кислорода и d-орбиталями меди. При допировании появляется спектральный вес на малых частотах, который связан с динамикой дырок. В частности, с увеличением уровня допирования вес низкочастотной части ОП, подчиняющейся закону Друде, пропорционален концентрации дырок x , а скорость релаксации теории Друде $1/\tau$ пропорциональна температуре T . С другой стороны, ОП $\sigma(\omega)$ на промежуточных частотах понята не очень хорошо. В особенности это касается пика инфракрасного поглощения (ПИП) с зависящей от допирования частотой $\omega_{\text{MIR}} \approx 0,5$ эВ, интерпретация которого до сих пор далеко не однозначна [33]. Уже давно стало понятным, что чистая t - J -модель не способна объяснить экспериментально наблюдаемый ПИП. Теоретическая частота ПИП соответствует энергии $2J \approx 0,28$ эВ (при типичных параметрах $t = 0,4$ эВ и $J = 0,35t$), что почти в два раза меньше наблюдаемой при низких уровнях допирования экспериментальной величины 0,5 эВ. Стало очевидным, что необходимо проверить, способно ли ЭФВ, ярко проявляющееся в спектрах ФУР, сдвинуть теоретический ПИП на более высокие энергии.

Ранее ОП в t - J -Н-модели исследовалась методом точной диагонализации малых кластеров [196], в приближении непересекающихся диаграмм (ПНД) для магнов и фононов [198] и методом динамического среднего поля в системах с бесконечной размерностью [269]. Однако малые системы в методе точной диагонализации не давали возможности изучить тонкую структуру спектров ОП, а ПНД для фононов не работает уже при

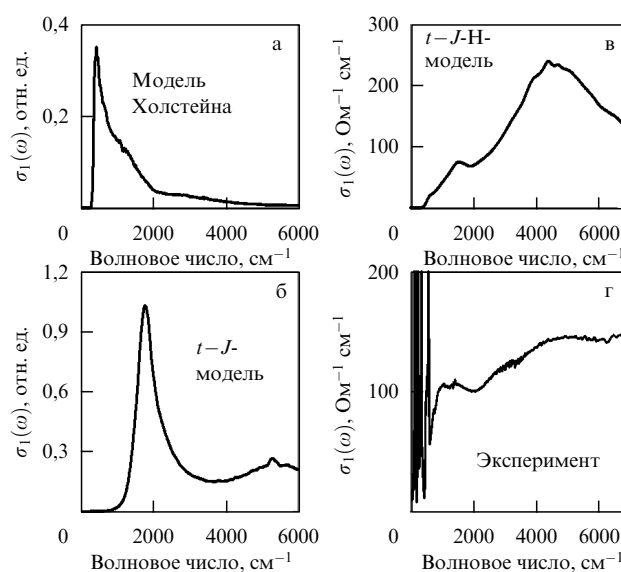


Рис. 7. Сравнение типичных ОП в различных моделях в двумерии с экспериментальными данными для слабодопированных ВТСП: (а) модель Холстейна при $\lambda = 0,44$, (б) t - J -модель при $J = 0,3$, (в) t - J -Н-модель при $J = 0,3$ и $\lambda = 0,39$, (г) ОП в плоскости допированного (1,5 % дырок) $(\text{Eu}_{1-x}\text{Ca}_x)\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ при $T = 10$ К. Энергетическая шкала теоретических данных представлена в [см⁻¹] в предположении, что $t = 0,3$ эВ ($1 \text{ эВ} = 8065,5 \text{ см}^{-1}$). Абсолютные значения теоретической ОП σ_1 оценивались исходя из параметра прыжка $a = 3,86$ Å и объёмной концентрации дырок $n_h = 1,72 \times 10^{-23} \text{ см}^{-3}$.

промежуточных силах ЭФВ. Что касается метода динамического среднего поля, то непонятно, насколько хорошо система с бесконечной размерностью отображает свойство двумерной динамики в CuO_2 -плоскости.

В работе [57] ОП была рассчитана методом ДМК в двумерной системе без использования ПНД в фононном канале. Данные расчётов сравнивались как с предыдущими измерениями, так и с новыми высокоточными измерениями, проведёнными методом эллипсометрии. Рисунок 7а показывает ОП в модели Холстейна (только ЭФВ), рис. 7б — в t - J -модели (только взаимодействие с магнонами) и рис. 7в — в t - J -Н-модели. На рисунке 7г представлен экспериментальный результат. Ни t - J -модель (рис. 7б), ни модель Холстейна (рис. 7а) не согласуются с экспериментом. В то же время t - J -Н-модель воспроизводит основные особенности экспериментального спектра. Чётко выраженной особенностью

как экспериментальной ОП, так и ОП t - J -модели является их явная двухпиковая структура: ПИП на частоте $\omega_{\text{MIR}} = 4600 \text{ см}^{-1}$ и более низкоэнергетический пик на частоте $\omega = 1000 \text{ см}^{-1}$, который находится прямо над инфракрасно активными фоновыми модами, расположенными на частотах меньших 800 см^{-1} . Высокоэнергетический пик, наблюдаемый в эксперименте, не соответствует тому пику, на частоте $\omega_{t-J} \approx 2J \approx 2000 \text{ см}^{-1}$, который получен в чистой t - J -модели (рис. 7б). Благодаря учёту ЭФВ оптическая проводимость, полученная в t - J -модели (рис. 7в), гораздо ближе к экспериментальной ОП (рис. 7г) — пик ОП в t - J -модели значительно сдвинут в сторону высоких частот относительно пика на частоте $\omega_{t-J} \approx 2J \approx 2000 \text{ см}^{-1}$ t - J -модели.

Как показано в [57], низкоэнергетический пик ОП является спутником фононов с нижним порогом на фоновой частоте [48], а более высокоэнергетический ПИП является магнным спутником низкоэнергетического пика. Причину сдвига ПИП в сторону более высоких энергий легче всего объяснить в режиме сильной связи, где для ОП применима схема Франка–Кондона [54] и флуктуации энергии, имеющие характерный масштаб энергии Франка–Кондона, могут считаться замороженными на время процесса оптического возбуждения. В этом случае энергия перехода дырки из основного состояния в возбуждённое состояние t - J -модели с замороженной решёткой равна сумме энергии испущенного магнона и энергии Франка–Кондона. Таким образом, наличие двух пиков и их энергии определяются взаимодействием решёточной и магнитной подсистем.

Все результаты расчётов ОП в t - J -модели [17–30] указывают на существование пика на частоте $\omega_{t-J} \approx 2J$, природа которого до недавнего времени не была ясна. В работе [57] показано, что наличие этого пика связано с переходом дырки из основного состояния в когерентной зоне t - J -модели с волновым вектором $(\pi/2, \pi/2)$ в другой минимум в точке $(-\pi/2, \pi/2)$. Сопровождающее этот переход испускание магнона с энергией $\approx 2J$ и импульсом $(\pi, 0)$ обеспечивает выполнение закона сохранения импульса при оптическом переходе и определяет энергию пика. Для того чтобы доказать определяющую роль вышеописанного процесса в ОП t - J -модели, в работе [57] рассмотрено аналитическое выражение для ОП в гильбертовом пространстве, учитывающее только один магнон (результат представлен штрихпунктирной кривой на рис. 8):

$$\text{Re } \sigma(\omega) = 4\pi t^2 e^2 (\omega N)^{-1} \sum_{\mathbf{q}} |\langle \psi_{\mathbf{k}_0-\mathbf{q}}^{(1)} | O_{\mathbf{q}} | \psi_{\mathbf{k}_0}^{(1)} \rangle|^2 \times \\ \times \delta[\omega - \omega_{\mathbf{q}} - (E_{\mathbf{k}_0-\mathbf{q}}^{(1)} - E_{\mathbf{k}_0}^{(1)})]. \quad (19)$$

Здесь $|\psi_{\mathbf{k}}^{(1)}\rangle$ — наинизшее состояние базиса с одним магноном с энергией $E_{\mathbf{k}}^{(1)}$, $\mathbf{k}_0 = (\pi/2, \pi/2)$ и $O_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger h_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k})$. Прямым вычислением суммы по $\mathbf{q}$ в выражении (19) было найдено, что главный вклад в ОП происходит от магнонов с импульсами в окрестности $(\pi, 0)$.

Рисунок 8 показывает изменение ОП с возрастанием ЭФВ. При слабом ЭФВ поглощение демонстрирует кроме основного ПИП пик, примыкающий к энергии фонона. Кстати, очевидную двухпиковую структуру ОП ВТСП в инфракрасном диапазоне можно разглядеть и в

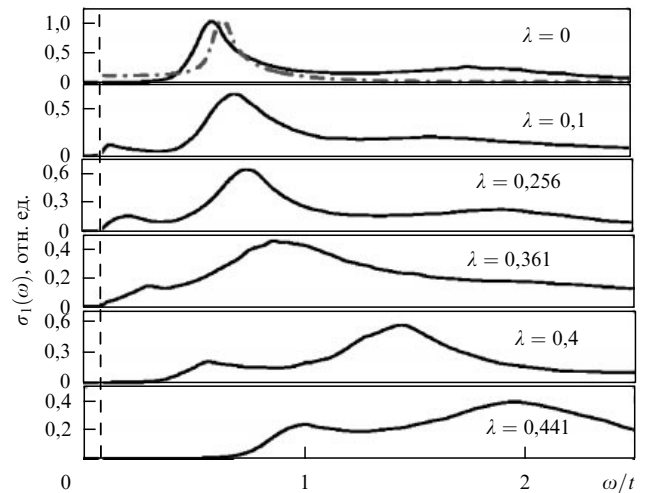


Рис. 8. Полученная методом ДМК оптическая проводимость одной дырки в t - J -модели при $J/t = 0,3$ и различных значениях константы ЭФВ λ (сплошные кривые). Штриховая прямая при $\omega/t = 0,1$ обозначает частоту фонона. Штрихпунктирная кривая в верхней части рисунка — результат расчёта по выражению (19).

старых измерений (см., например, рис. 3 в [35], рис. 9 в [31], а также [187–192]). Но особенно хорошо этот пик виден в измеренной эллипсометрией низкотемпературной ОП в плоскости допированного (1,5 % дырок) $\text{Eu}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ (рис. 7г). Этот возникший вследствие ЭФВ пик остаётся вблизи энергии фонона вплоть до наступления знаменующего переход в режим сильной связи кроссовера автолокализации, который в t - J -модели происходит при $\lambda \approx 0,4$ [49]. Действительно, при этой силе ЭФВ резко изменяется зависимость пиков ОП от константы связи λ (рис. 9а).

С целью объяснить природу низкоэнергетического пика в работе [57] была рассчитана ОП в модели Холстейна с интегралом перекрытия $\tilde{t} = 0,4t$, уменьшенным таким образом, чтобы воспроизвести увеличение эффективной массы в t - J -модели. Для такой модели Холстейна автолокализация наблюдается при константе связи $\lambda = 0,4$. Как видно из рис. 9б, эта эффективная модель очень хорошо воспроизводит низкоэнергетический пик ОП t - J -модели.

Исходя из зависимости угла кинка в ФУР, можно предположить что ЭФВ уменьшается при увеличении уровня допирования [70, 285] и причиной экспериментально наблюдаемого при допировании [33, 34, 36] смягчения энергии ПИП является изменение силы ЭФВ. Следует отметить, что уменьшение эффективного ЭФВ для газа поляронов теоретически доказано для модели Фрёлиха [286–289], однако для моделей с короткодействующим ЭФВ таких расчётов не проводилось. Сопоставление [57] экспериментального положения ПИП с результатами для t - J -модели даёт оценку изменения силы эффективного ЭФВ с изменением уровня допирования (рис. 9в, г). На рисунке 9в, г изображено отношение константы связи при данном уровне допирования к константе связи при нулевом уровне допирования. Однако, так как абсолютное значение константы ЭФВ для соединения LSCO при нулевом уровне допирования $\lambda(x=0) \approx 1$ известно из других источников (см. раздел 4.3), данные на рис. 9в можно рассматривать как абсолютные значения $\lambda^{\text{LSCO}}(x)$. Зависимости константы

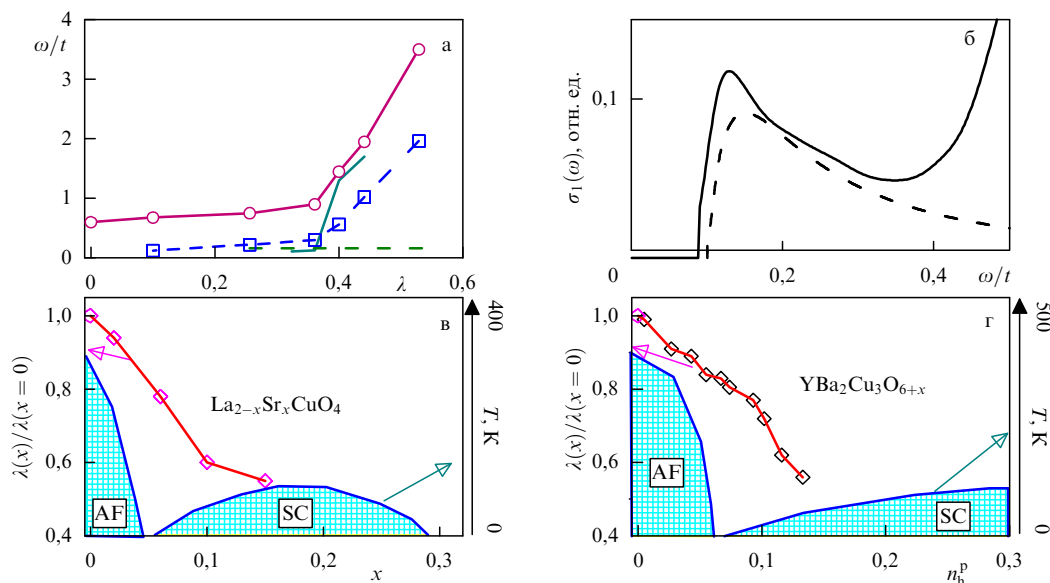


Рис. 9. Зависимость от силы ЭФВ λ энергий доминирующего пика ОП (сплошная кривая с кружками) и низкоэнергетического индуцированного ЭФВ пика (штриховая кривая с квадратами). Энергии доминирующих пиков модели Холстейна при $t = 1$ (штриховая кривая) и при $\tilde{t} = 0,4$ (сплошная кривая). (б) ОП t - J -Н-модели (сплошная кривая) и ОП эффективной модели Холстейна с $\tilde{t} = 0,4$ (штриховая кривая) при той же силе ЭФВ $\lambda = 0,1$. Зависимость отношения $\lambda(x)/\lambda_0$ эффективной константы связи ЭФВ к её значению в отсутствие допирования $\lambda_0 = \lambda(x = 0)$ (в) от концентрации допирования x для LSCO и (г) от "истинной" концентрации дырок n_h^p в медно-кислородной плоскости для YBCO [284]. Отношение $\lambda(x)/\lambda_0$ оценивалось по положению ПИП. Зависимости наложены на соответствующие фазовые x - T - и n_h^p - T -диаграммы; AF — антиферромагнитное состояние, SC — состояние сверхпроводимости.

связи от концентрации дырок в проводящей плоскости в LSCO и YBCO очень похожи и дают вполне универсальную картину. Рисунок 9в, г свидетельствует о том, что сверхпроводимость появляется тогда, когда эффективное ЭФВ уже переходит из режима сильной связи в режим промежуточной связи. Хотя дырки уже обладают достаточной свободой для того, чтобы их движение было когерентным, эффективная сила ЭФВ, $\lambda \approx 0,5$, все ещё является существенной.

Альтернативное объяснение зависимости энергии ПИП рассмотрено в [269, 290], где вместо предложенного в [57] изменения с уровнем допирования силы ЭФВ λ предполагается зависимость от концентрации обменного интеграла J . Хотя, с точки зрения ОП, трудно отдать предпочтение какому-либо одному из этих двух альтернативных подходов, но предположение о зависимости константы λ от концентрации легко объясняет сильную зависимость кинка в дисперсии частиц от концентрации [285] дырок [70, 119, 208, 291], в то время как подход [269, 290] не даёт этому факту согласованного объяснения. Эксперимент в допированных электронами соединениях $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ был недавно интерпретирован как свидетельствующий о независимости константы λ от концентрации [218]. Однако если сравнить рис. 9в с рис. 4д из работы [218], то становится ясно, что диапазон концентраций, в котором проводились измерения, явно недостаточно велик для уверенного вывода о неизменности λ .

ОП и ранее часто интерпретировалась в рамках поляронного подхода [187, 289, 292–296]. Все эти работы обсуждали структуру спектра ОП с одним пиком и не описывали сложной структуры наблюдаемого в эксперименте спектра. Однако недавно появилось альтернативное объяснение двухпиковой структуры ОП [297], не привлекающее к рассмотрению магнитную подсистему. Авторы работы [297] заостряют внимание

на результатах точного расчёта ОП поляронов Фрелиха методом ДМК [48, 54], показывающих, что при некоторых значениях константы связи наблюдается двухпиковая структура. Следует отметить, что двухпиковая структура ОП наблюдается в определённом диапазоне констант связи и в модели полярона Холстейна [298]. Однако область существования двухпиковой структуры в моделях Холстейна и Фрелиха ограничена узким диапазоном констант ЭФВ, в то время как двухпиковость ОП является устойчивым свойством t - J -Н-модели. Интересным результатом работы [297], полученным методом когерентных состояний [299, 300], является найденная корреляция энергии максимумов пиков ОП и ФУР в режиме сильной связи. Полученная зависимость позволяет предсказать положение максимума ОП по максимуму ФУР и наоборот. В дальнейших расчётах следует проверить, выполняется ли это свойство также и для t - J -Н-модели.

Несколько иная интерпретация низколежащего пика в ОП даётся в работе [301], где приводятся аргументы в пользу того, что этот пик связан с локальными магнитными возбуждениями. В этой трактовке низколежащий пик присутствует в достаточно узком диапазоне параметров. Поэтому в рамках такой интерпретации довольно трудно объяснить тот факт, что пик, лежащий немного выше энергий фононов, является стойкой характерной чертой огромного числа ВТСП-соединений с разными уровнями допирования [31, 35, 187–192]. Недавно проведённые расчёты [302] показывают, что пик на частотах, слегка превышающих частоты фононов, является устойчивой чертой ОП. Расчёты [302] проводились в рамках МУИ, который был улучшен добавлением в базис таких возбуждений, как коррелированное возбуждение двух и трёх фононов.

Хорошо известно, что при достаточно высоких уровнях допирования ОП ВТСП-соединений хорошо описы-

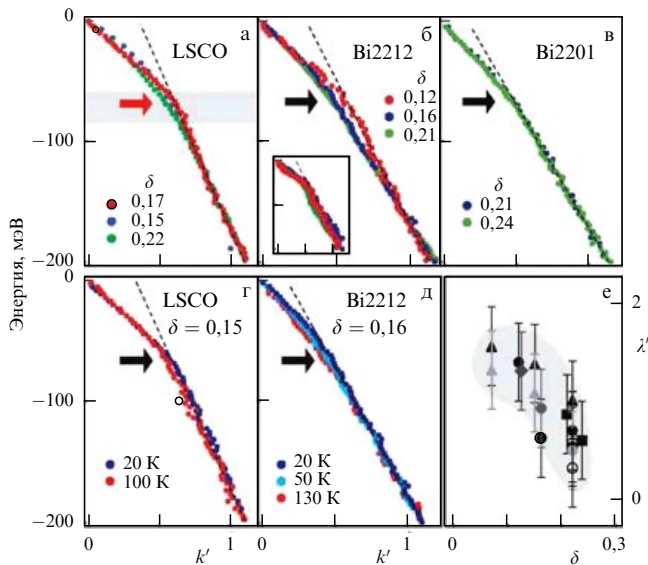


Рис. 10. (а–д) Дисперсии квазичастиц в направлении $(0,0) - (\pi,\pi)$ в соединениях $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO), $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ (Bi-2201) и $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ (Bi-2212) при разных температурах и уровнях допирования. (е) Константа λ' , оценённая по изменению наклона дисперсии исходя из теории слабой связи для металла из не взаимодействующих электронов. Величина $1 + \lambda'$ равна отношению большей скорости выше энергии кинка и меньшей скорости ниже энергии кинка. Параметр $\lambda' > \lambda$ задаёт верхнюю границу оценок безразмерной константы ЭФВ λ . (Данные работы [70].)

вается моделью Друде с зависящими от частоты обратным временем релаксации $1/\tau(\omega)$ и эффективной массой $m^*(\omega)$ [31, 303]. Описывающие эксперимент зависимости этих величин от частоты могут быть получены в рамках модели с сильным ЭФВ [225].

4.7. Кинки в дисперсии частиц

В теории ВТСП-соединений трудно найти другое явление, которое привело бы, как кинки, к длительному противостоянию сторонников и противников того, что ЭФВ играет существенную роль в этих соединениях. Типичные спектры для разных соединений, уровней допирования и температур показаны на рис. 10. Первоначально [70, 291, 304–309] аномалии приписывались энергии в 70 мэВ. Однако более точный анализ показал [119, 208], что существуют структуры с меньшей энергией. Кинки наблюдаются не только вдоль нодального направления $(0,0) - (\pi,\pi)$, но и в других направлениях [307–311].

Наличие кинков объяснялось как взаимодействием с фононами [109, 110, 247, 312], так и взаимодействием с магнитной резонансной модой [310, 313–319], наблюдаемой в магнитном рассеянии нейтронов ВТСП-соединениями [320–323]. Авторы работы [324] учли взаимодействие как с различными фоновыми модами, так и с магнитной резонансной модой и пришли к заключению, что, основываясь только на расчётах, трудно сделать вывод о том, какая из мод вызывает кинк.

Следовательно, окончательное заключение о природе кинка могут дать только эксперименты. Работа [218] предоставила одно из двух неопровержимых доказательств фоновой природы кинка. Заметим, что второе доказательство было представлено в работе по изучению влияния изотопического эффекта на ФУР [182], опубликованной всего спустя один месяц после работы [218].

Как отмечено в [218], в допированных дырками ВТСП оптические фононы имеют энергии 40 и 70 мэВ [135, 142], а магнитная резонансная мода находится на энергии 40 мэВ [320, 325]. Поэтому провести различие между магнитным и фоновым сценариями трудно ввиду их примерно одинаковых энергетических масштабов. Однако фононы допированных электронами ВТСП находятся на тех же частотах, а магнитная резонансная мода, как недавно было обнаружено [326, 327], находится на энергии 10 мэВ, которая не соответствует энергии кинка. Другое доказательство фоновой природы кинка следует из ИЭ [182]. Сдвиг дисперсии наблюдается только в окрестности кинка, и его характерная величина составляет $3,4 \pm 0,5$ мэВ. Согласно результатам расчётов, дыхательная мода на энергии 70 мэВ должна иметь изотопический сдвиг 3,9 мэВ, что согласуется с наблюдаемым в эксперименте значением.

5. Нелокальность

электрон-фононного взаимодействия

Простейшая модель (2)–(4) не объясняет всех особенностей ВТСП-соединений. Причина этого заключается в том, что ЭФВ зависит от волнового вектора как фонона, так и дырки [68, 101, 104–109, 111, 112]. Кроме того, некоторые свойства t – J – H -модели находятся в противоречии с экспериментальными данными. Например, эффективная масса t – J – H -модели в режиме сильной связи очень велика, что не соответствует достаточно малым массам носителей, наблюдаемым в эксперименте [33]. Вопиющее противоречие с экспериментом было обнаружено также в работе [256], где было показано, что режим сильной связи в t – J – H -модели приводит к локализованной статической дырке с четырьмя оборванными связями вокруг неё. В этом случае перколяционная модель предсказывает, что дальний антиферромагнитный порядок сохраняется при увеличении концентрации дырок вплоть до значения $x \approx 0,5$, что находится в существенном противоречии с экспериментальными значениями $x \approx 0,02$ – $0,04$. Подобная тенденция была также замечена в работе [328], где было указано, что ЭФВ помогает антиферромагнетизму, так как подавляет разрушающее антиферромагнетизм движение дырок.

Таким образом, ответы на поставленные вопросы могут лежать в более реалистичных t – t' – t'' – J -моделях, в которых ЭФВ является нелокальным. Изучение нелокальных моделей методом точной диагонализации [196, 256] существенно ограничено малыми размерами кластера (обычно не более 10 узлов). В работах [55, 257] на основе подхода когерентных состояний [329, 330] был разработан новый метод, в котором когерентные состояния трактуются в духе алгоритма Ланцоша. Этот метод позволяет получить заслуживающие доверия результаты для основного состояния t – t' – t'' – J -модели с нелокальным ЭФВ в двумерных системах размером в 64 узла. Метод проверен сравнением его результатов с известными ДМК-результатами для t – J – H -модели. Как было показано в [55], локальное ЭФВ в t – t' – t'' – J -модели, в отличие от такого же локального ЭФВ в t – J – H -модели, оказывает различное влияние на состояния квазичастиц в нодальной, $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$, и антинодальной, $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, точках зоны Бриллюэна. Также было обнаружено, что нелокальное ЭФВ существенно меняет основные черты спин-решётчного полярона. Во-первых, в соответствии

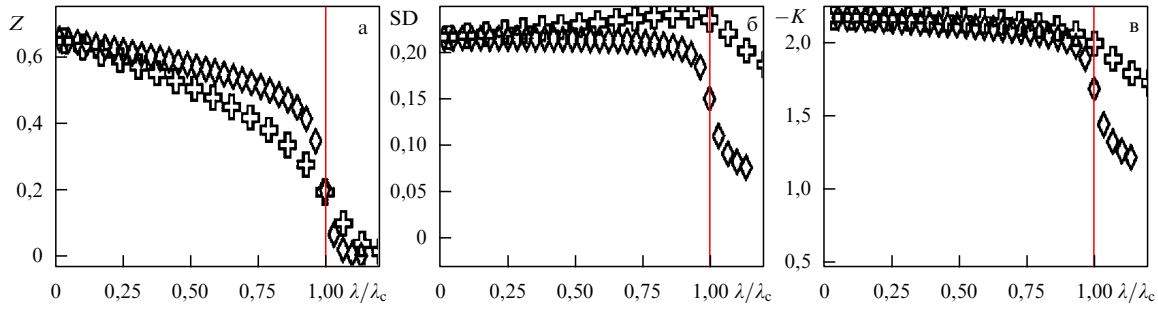


Рис. 11. Спектральный вес (а), спиновое отклонение вокруг дырки (б) и средняя кинетическая энергия индуцированных магнами перескоков на ближайших соседей (в) при значениях параметров $J/t = 0,4$, $\Omega_0/t = 0,2$, $t' = -0,5t$, $t'' = 0,4t$, $N = 16$ для $g_1 = 0$ (ромбы) и $g_1 = 0,5g$ (кресты). Критическое λ_c для разных моделей установлено при таком ЭФВ, при котором спектральный вес уменьшается на 70 % по сравнению с таковым при $\lambda = 0$.

с общими результатами [117, 238] эффективная масса спин-решеточного полярона в режиме сильной связи значительно меньше, чем у полярона с локальным ЭФВ. Во-вторых, перескоки дырки на ближайших соседей не так сильно подавлены, как в случае локального ЭФВ, и, следовательно, найденный в t - J -модели аномально устойчивый антиферромагнитный порядок в реалистичных моделях не возникает.

Минимальный гамильтониан t - t' - t'' - J -модели с нелокальным ЭФВ состоит из суммы гамильтониана t - t' - t'' - J -модели, гамильтониана фононов с частотой Ω_0 и гамильтониана нелокального ЭФВ:

$$H_{h-ph} = \Omega_0 \sum_l g(l) \sum_{i \in A} f_i^\dagger f_i (c_{i+l}^\dagger + c_{i+l}) + \Omega_0 \sum_l g(l) \sum_{i \in B} h_i^\dagger h_i (c_{i+l}^\dagger + c_{i+l}), \quad (20)$$

который определен с помощью констант локального, $g(0) = g$, и нелокального, $g(\delta) = g_1$, взаимодействия со смещениями ближайших соседей; f и h — операторы уничтожения дырок на двух подрешетках, A и B , t - J -модели.

В рамках метода [55], начиная с состояния дырки в антиферромагнетике, определяют состояния базиса $|h\rangle_j [\prod_i |\mu_i\rangle] |\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_l, l\rangle$, где $|h\rangle_j$ — состояние дырки на узле j , а i пробегает все узлы решетки. В состояниях $|\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_l, l\rangle$ ограничиваются магнами, компонент l -го порядка которых достаточно для того, чтобы воспроизвести результаты ПНД [331]. Как показано в [55], диагонализировав этот усеченный базис в рамках приближения, в котором разрешено уничтожение только последнего рожденного фонона [332], при $J/t \geq 0,3$ можно воспроизвести результаты ПНД, учитывая только четыре магнана.

Наибольшей проблемой для численного решения считается фононный базис, ограничивавший ранее размеры системы кластером в 10 узлов [196]. Для преодоления этой трудности в работе [55] были использованы когерентные состояния (КС) [329, 330], которые представляют собой каноническое преобразование фононного базиса

$$|h, i\rangle = \exp[gh(b_i - b_i^\dagger)] |0\rangle_i^{(ph)} = \exp\left(-\frac{g^2 h^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-gh)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle_i, \quad (21)$$

где число h является свободным параметром. При $h = 0$ КС представляет собой затравочное состояние без ЭФВ, а при $h = 1$ — точное решение для модели независимых осцилляторов с локальной константой связи g . Как показало сравнение результатов [55] с результатами метода ДМК [49], во всех режимах ЭФВ достаточно ограничиться базисом из четырех КС (21).

Для изучения влияния нелокальности ЭФВ на свойства системы было проведено сравнение t - t' - t'' - J -модели с моделью, содержащей взаимодействие со смещением на ближайшем соседе $g_1 = g/2$ (см. (20)). На рисунке 11 представлена зависимость от константы ЭФВ веса квазичастиц Z в основном состоянии, спинового отклонения и вклада в кинетическую энергию K , возникающего вследствие индуцированных магнами прыжков на ближайших соседей. Спиновое отклонение, $SD = (S_{AFM} - \langle S_{NN} \rangle) / S_{AFM}$, является мерой того, на сколько спин S_{NN} на соседнем с дыркой узле (nearest neighbor) отклоняется от значения спина в идеальном антиферромагнетике S_{AFM} . Уменьшение Z -фактора является мерой подавления когерентного движения дырки, связанного с её когерентным переносом на большие расстояния, а абсолютное значение K и SD являются мерами активности перескоков на ближайших соседей. Уменьшение двух последних величин (рис. 11б, в) свидетельствует об индуцированном ЭФВ подавлении движения дырки по ближайшим соседям.

Появление нелокальности в ЭФВ ведёт к следующим изменениям. Во-первых, когерентное движение сильнее подавляется при $\lambda < \lambda_c$ и слабее — при $\lambda > \lambda_c$ (рис. 11а). Во-вторых, движение дырки по ближайшим соседям подавляется нелокальным ЭФВ значительно слабее, чем локальным взаимодействием Холстейна. Последнее обстоятельство может быть легко проинтерпретировано для режима сильной связи, в котором приобретает смысл понятие адиабатического потенциала. Для локального взаимодействия Холстейна самосогласованный адиабатический потенциал дырки представляет собой почти δ -функцию, что предотвращает движение дырки по ближайшим соседям. Напротив, в случае дальнедействующего ЭФВ с пологой потенциальной ямой дырка не ограничена одним узлом и, следовательно, остаётся мобильной и в режиме сильной связи. Эта мобильность даёт возможность разрушения антиферромагнитного порядка и в режиме сильной связи. Также важно, что эффективная масса полярона в режиме сильной связи в случае нелокального ЭФВ намного

меньше. Например, при $\lambda = 1, 1\lambda_c$ массы различаются по порядку величины. Для локального ЭФВ диагональная (вдоль $k_x = k_y$) масса $m_d = 200$, а поперечная (вдоль $k_x = -k_y$) масса $m_t = 88$, в то время как для нелокального ЭФВ $m_d = 20$ и $m_t = 10$. Уменьшение эффективной массы в режиме сильной связи при усилении нелокальности ЭФВ уже неоднократно наблюдалось в ряде других моделей [117, 238, 333–336]. Интересно отметить, что дальнотействующее ЭФВ при наличии одноузельного отталкивания связывает два полярона в мобильные межцентровые биполароны [337, 338]. При наличии некоторых структурных особенностей решётки эти биполароны могут быть даже суперлёгкими [339].

Нелокальность взаимодействия должна проявляться и в оптической проводимости [14, 340]. Например, в модели Холстейна пик ОП в режиме сильной связи наблюдается на энергии $2\varepsilon_p$, равной двум энергиям связи полярона ε_p , а в модели с дальнотействием — на значительно меньших энергиях [340]. Это можно объяснить тем, что ОП определяется корреляционной функцией ток–ток, а оператор тока в таких моделях соответствует переносу электрона на соседний узел. В модели Холстейна электрон, передвигаясь на соседний узел, теряет энергию ε_p и, кроме того, оставляет на прежнем узле возбуждённые фононы с той же суммарной энергией. Тогда как в случае дальнотействующего ЭФВ фононы возбуждены и на узле, и вдали от узла, что приводит к более слабой перестройке искажения решётки при переходе на соседний узел и, как следствие, к понижению энергии пика ОП.

Более того, важным является не только радиус эффективного взаимодействия, но и его тонкая структура. В работе [341] сравнивались действие мод, изгибающих CuO_4 -кластер (buckling), и мод дыхательных (breathing) фононов. После редукции к t – J -модели гамильтониан ЭФВ приобретает следующий вид:

$$H_{\text{Br-Bu}} = \gamma \sum_{i,\delta} (b_{i,\delta} + b_{i,\delta}^\dagger)(n_i \pm n_{i+\delta}), \quad (22)$$

где i обозначает положения меди, а вектор $\delta = (x, y)$ определяет разные направления связи. Знак плюс (минус) соответствует моде изгиба (дыхательной моде). Как показано с помощью метода точной диагонализации [341], дыхательная мода подавляет кинетическую энергию намного сильнее, чем мода изгиба. Причина этого заключается в том, что дыхательный фонон уменьшает энергию на одном узле, повышая при этом энергию на соседнем. Напротив, мода изгиба понижает или повышает энергию на обоих соседних узлах одновременно, что препятствует эффективному подавлению кинетической энергии. Подробное изучение влияния структуры ЭФВ на свойства полярона проводилось в [117, 237, 238, 335]. Сравнение спектральных свойств полярона Холстейна и спектральных свойств полярона, взаимодействующего с дыхательной модой, проводилось в [342].

6. Влияние корреляций и других факторов на проявление электрон-фононного взаимодействия

Когда речь идет о роли ЭФВ, необходимо точно сформулировать, какие из свойств системы рассматриваются. Например, влияние ЭФВ на электроны и

фононы имеет качественно различную природу. Пусть дырка (фонон) в системе без ЭФВ обладает дисперсией $\varepsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})$ ($\varepsilon(\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k})$). В невзаимодействующей системе наблюдаемая в эксперименте с использованием ФУР (нейтронного рассеяния) спектральная функция $S(\mathbf{k}, \omega)$ является дельта-функцией: $S(\mathbf{k}, \omega) = \delta(\omega - \varepsilon(\mathbf{k}))$. ЭФВ приводит к появлению собственно-энергетической части функции Грина дырки (фонона) $\Theta(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ ($\Theta(\mathbf{k}, \omega) = P(\mathbf{k}, \omega)$), при которой измеряемая экспериментально спектральная функция принимает вид

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{|\text{Im } \Theta(\mathbf{k}, \omega)|}{[\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) - \text{Re } \Theta(\mathbf{k}, \omega)]^2 + [|\text{Im } \Theta(\mathbf{k}, \omega)|]^2}. \quad (23)$$

Мнимая часть $|\text{Im } \Theta(\mathbf{k}, \omega)|$ определяет уширение вследствие ЭФВ.

Для фононной собственно-энергетической части в t – J -модели, где подразумевается, что хаббардовское отталкивание $U \rightarrow \infty$ и зарядовые флуктуации полностью подавлены, справедливо [102, 343] правило сумм

$$\frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \int_{-\infty}^{\infty} |\text{Im } P(\mathbf{k}, \omega)| d\omega \approx \gamma^2 [2\delta(1 - \delta)]. \quad (24)$$

Здесь N — число узлов в системе, δ — концентрация допированных дырок, равная нулю в полузаполненной системе. Естественно, при бесконечном кулоновском отталкивании U на каждом узле находится строго по одному электрону, флуктуации заряда подавлены и никакого влияния на фононы при $\delta \rightarrow 0$ нет. При возрастании δ появляются свободные места и возрастает вклад ЭФВ в ширину фононов. С другой стороны, для сильного вклада ЭФВ в спектр электронных квазичастиц допировать систему необязательно. При $\delta = 0$ можно получить правило сумм для собственно-энергетической части дырки [343]

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 \text{Im } \Sigma(\mathbf{k}, \omega - i0^+) d\omega = \gamma^2. \quad (25)$$

Таким образом, влияние ЭФВ на ФУР является сильным и в полузаполненной системе. Физическая причина этого заключается в том, что ФУР создаёт свою дырку даже в полузаполненной системе, которая сама по себе является зарядом, флуктуации которого не подавляются кулоновским отталкиванием. Правила сумм для собственно-энергетической части для модели Холстейна – Хаббарда изучались также в [344].

Если кратко просуммировать результаты изучения влияния сильных корреляций, т.е. кулоновского отталкивания U , на ЭФВ, то можно сказать, что U подавляет ЭФВ. Расчёты, проведённые в рамках подхода динамического среднего поля [345–347], показали, что в парамагнитной системе влияние ЭФВ на электронный спектр сильно подавлено. Наличие антиферромагнитного состояния значительно повышает роль ЭФВ по сравнению с его ролью в парамагнитной системе [181], однако кулоновское отталкивание в общем случае ослабляет ЭФВ. Также показано, что допирование приводит к дополнительному подавлению вклада ЭФВ в электронные свойства, а вклад ЭФВ в фононные спектральные свойства возрастает. Второе обстоятельство является прямым следствием правила сумм (24).

Однако для случая малого заполнения t - J -модели можно с уверенностью сказать, что, по сравнению с ЭФВ в модели Холстейна с одной частицей на две зоны, в t - J -модели ЭФВ является более сильным. Этот результат был давно получен самыми различными методами [196, 348–350] и недавно перепроверен с помощью диаграммной техники Монте-Карло [49]. Сравнивая критическую константу ЭФВ в модели t - J -Н (2)–(4) $\lambda_{t-J}^c \approx 0,4$ [49] и критическую константу модели Холстейна с тем же интегралом перекрытия t $\lambda_H^c \approx 1$, можно прийти к заключению, что взаимодействие дырки с магнонами ускоряет переход в режим сильной связи. В случае одной дырки на две зоны в t - J -модели ситуация может быть кратко представлена следующим образом. Соотношение между эффективной константой ЭФВ λ для t - J -модели и λ_0 для модели Холстейна с затравочной массой $m_0 = 1/(2t)$ определяется рядом факторов [14, 197, 202]:

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} \approx 4Z_0^2 \frac{\sqrt{m_{\parallel}m_{\perp}}}{m_0}. \quad (26)$$

В выражении (26) фактор уменьшения $Z_0 < 1$ в t - J -модели определяется сдвигом большей части спектральной плотности на высокие частоты. С другой стороны, две большие эффективные массы когерентной зоны t - J -модели, $m_{\parallel} > m_0$ и $m_{\perp} > m_0$, усиливающие влияние ЭФВ, являются прямым следствием антиферромагнитных корреляций. Решающее значение при некоторых параметрах приобретает множитель 4 в (26), возникающий из-за четырёхкратного вырождения основного состояния на волновых векторах $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$. Для $J/t = 0,2$ значение $Z_0^2 = 0,05$, а $\sqrt{m_{\parallel}m_{\perp}} = 10m_0$. Следовательно, в этом случае, в частности из-за наличия множителя 4, мы имеем двукратное увеличение эффективности ЭФВ. Для больших J/t , например $J/t = 2$, усиление может быть существенным ($\lambda/\lambda_0 \approx 16$). Можно заключить, что усиление или ослабление роли ЭФВ определяется тонкими деталями модели, размерностью и заполнением системы электронами. Например, ЭФВ в основном состоянии одномерного диэлектрика Мотта подавляется кулоновским отталкиванием [351], в то время как его роль в формировании спектра экситонов в одномерной системе за счёт кулоновского отталкивания усиливается [352].

Одним из факторов, существенно влияющим на роль ЭФВ в физике ВТСП, является наблюдаемая в экспериментах по сканирующей туннельной спектроскопии [353–355] и ядерному квадрупольному резонансу [356] неоднородность. Как показано в работе [357], умеренное и даже слабое ЭФВ может вызывать драматические изменения свойств неоднородного электронного газа. Подобное заключение подтверждается и другими расчётами [59, 358, 359] в рамках метода ДМК. Влияние ЭФВ также усиливается при наличии поверхностей и границ раздела [360].

7. Заключение

Большое количество обсуждаемых в данном обзоре теоретических и экспериментальных результатов свидетельствует об огромной роли ЭФВ в соединениях с ВТСП. Не умаляя достоинств других работ можно сказать, что одним из результатов, который изменил угол зрения исследователей на происходящее в недопи-

рованных ВТСП, можно считать предсказанное в работе [49] и обнаруженное в эксперименте [66] разделение химического потенциала и широких пиков, наблюдаемых в ФУР. Далее, в результате проведённого в работе [69] анализа несколькими способами продемонстрировано, что в недопированных соединениях с ВТСП константа ЭФВ $\lambda \approx 1$. Другими работами, предоставившими ключевую информацию о слабодопированных соединениях, стали виртуозный эксперимент по изучению изотопического эффекта в кинках электронной дисперсии [182] и исследования кинков в допированных электронами соединениях [218]. В первом эксперименте убедительно продемонстрирована роль фононов в физике кинка, а во втором чётко показано, что в допированных электронами соединениях энергия кинка и энергия магнитной резонансной моды, долгое время считавшейся ответственной за объяснение природы кинка, не совпадают.

Результаты многочисленных теоретических исследований убедительно свидетельствуют о важности роли фононов в соединениях с ВТСП. Первоначальные, упрощённые модели для идеальных систем с короткодействующим ЭФВ при нулевой температуре претерпели значительные изменения — проведены обобщения для случаев конечной температуры, нелокального взаимодействия и систем с нарушением трансляционной инвариантности. Дальнейшее развитие теоретических исследований, претендующее на реалистичное описание соединений с ВТСП, должно идти по пути развития методов, которые способны работать без существенных приближений в бесконечной системе с дефектами при конечной температуре.

Автор благодарен Н.В. Прокофьеву, Б.В. Свистуну, Е.А. Буровскому, Ю. Кагану, А.С. Александрову, О.П. Сушкову, К.А. Кикоину, N. Nagaosa, G. De Filippis, V. Cataudella, A. Sakamoto, Z.-X. Shen, T.P. Devereaux, C. Bernhard, J. Zaanen, G. Sawatzky, K.M. Shen, K.W. Kim, H. Fehske, T. Egami, J. Ranninger, C. Castellani, C.A. Perroni, J.T. Devreese, T. Tohyama, O. Gunnarsson, G. Sangiovanni, E. Cappelluti, C. Kim, A. Alvermann, M. Berciu за бесценную помощь в обсуждении и формулировке результатов. Обзор написан при поддержке грантом РФФИ 07-02-0067а.

Список литературы

1. Andreson P W *The Theory of Superconductivity in the High- T_c Cuprates* (Princeton, NJ: Princeton Univ. Press, 1997)
2. Anderson P W *Science* **316** 1705 (2007)
3. Alexandrov A S *J. Phys. Condens. Matter* **19** 125216 (2007)
4. Alexandrov A S *Phys. Rev. B* **53** 2863 (1996)
5. Максимов Е Г *УФН* **170** 1033 (2000) [Maksimov E G *Phys. Usp.* **43** 965 (2000)]
6. Максимов Е Г и др. *Письма в ЖЭТФ* **80** 623 (2004) [Maksimov E G et al. *JETP Lett.* **80** 548 (2004)]
7. Moussa J E, Cohen M L *Phys. Rev. B* **74** 094520 (2006)
8. Cohen M L *J. Supercond. Novel Magn.* **19** 283 (2006)
9. Pickett W E *J. Supercond. Novel Magn.* **19** 291 (2006)
10. Максимов Е Г, Долгов О В *УФН* **177** 983 (2007) [Maksimov E G, Dolgov O V *Phys. Usp.* **50** 933 (2007)]
11. Максимов Е Г *УФН* **178** 175 (2008) [Maksimov E G *Phys. Usp.* **51** 167 (2008)]
12. Damascelli A, Hussain Z, Shen Z-X *Rev. Mod. Phys.* **75** 473 (2003)
13. Xiang T, Wheatley J M *Phys. Rev. B* **54** R12653 (1996)
14. Gunnarsson O, Röscher O J. *Phys. Condens. Matter* **20** 043201 (2008)
15. Belinicher V I, Chernyshev A L, Shubin V A *Phys. Rev. B* **53** 335 (1996)

16. Belinicher V I, Chernyshev A L, Shubin V A *Phys. Rev. B* **54** 14914 (1996)
17. Rice T M, Zhang F C *Phys. Rev. B* **39** 815 (1989)
18. Stephan W, Horsch P *Phys. Rev. B* **42** 8736 (1990)
19. Poilblanc D, Dagotto E *Phys. Rev. B* **44** 466 (1991)
20. Poilblanc D *Phys. Rev. B* **44** 9562 (1991)
21. Dagotto E et al. *Phys. Rev. B* **45** 10741 (1992)
22. Igarashi J, Fulde P *Phys. Rev. B* **48** 12713 (1993)
23. Jaklič J, Prelovšek P *Phys. Rev. B* **50** 7129 (1994)
24. Jackeli G, Plakida N M *Phys. Rev. B* **60** 5266 (1999)
25. Moraghebi M, Yunoki S, Moreo A *Phys. Rev. B* **66** 214522 (2002)
26. Tikofsky A M, Laughlin R B, Zou Z *Phys. Rev. Lett.* **69** 3670 (1992)
27. Plakida N M Z. *Phys. B* **103** 383 (1997)
28. Eder R, Wróbel P, Ohta Y *Phys. Rev. B* **54** R11034 (1996)
29. Kyung B, Mukhin S I *Phys. Rev. B* **55** 3886 (1997)
30. Dagotto E *Rev. Mod. Phys.* **66** 763 (1994)
31. Basov D N, Timusk T *Rev. Mod. Phys.* **77** 721 (2005)
32. Kastner M A et al. *Rev. Mod. Phys.* **70** 897 (1998)
33. Lee Y S et al. *Phys. Rev. B* **72** 054529 (2005)
34. Cooper S L et al. *Phys. Rev. B* **47** 8233 (1993)
35. Thomas G A et al. *Phys. Rev. B* **45** 2474 (1992)
36. Uchida S et al. *Phys. Rev. B* **43** 7942 (1991)
37. Azzam R M A, Bashara N M *Ellipsometry and Polarized Light* (Amsterdam: North-Holland, 1996)
38. Fluckiger D U *J. Opt. Soc. Am. A* **15** 2228 (1998)
39. Prokof'ev N V, Svistunov B V, Tupitsyn I S *ЖЭТФ* **114** 570 (1998) [*JETP* **87** 310 (1998)]
40. Prokof'ev N V, Svistunov B V *Phys. Rev. Lett.* **81** 2514 (1998)
41. Mishchenko A S et al. *Phys. Rev. B* **62** 6317 (2000)
42. Mishchenko A S, Nagaosa N *Phys. Rev. Lett.* **86** 4624 (2001)
43. Mishchenko A S et al. *Int. J. Mod. Phys. B* **15** 3940 (2001)
44. Mishchenko A S, Prokof'ev N V, Svistunov B V *Phys. Rev. B* **64** 033101 (2001)
45. Burovski E A et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 186402 (2001)
46. Mishchenko A S et al. *Nonlinear Opt.* **29** 257 (2002)
47. Mishchenko A S et al. *Phys. Rev. B* **66** 020301 (2002)
48. Mishchenko A S et al. *Phys. Rev. Lett.* **91** 236401 (2003)
49. Mishchenko A S, Nagaosa N *Phys. Rev. Lett.* **93** 036402 (2004)
50. Мищенко А С *УФН* **175** 925 (2005) [Mishchenko A S *Phys. Usp.* **48** 887 (2005)]
51. Mishchenko A S, Nagaosa N *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** 011003 (2006)
52. Mishchenko A S, Nagaosa N *Phys. Rev. B* **73** 092502 (2006)
53. Mishchenko A S, Nagaosa N *J. Phys. Chem. Solids* **67** 259 (2006)
54. De Filippis G et al. *Phys. Rev. Lett.* **96** 136405 (2006)
55. De Filippis G et al. *Phys. Rev. Lett.* **99** 146405 (2007)
56. Cataudella V et al. *Phys. Rev. Lett.* **99** 226402 (2007)
57. Mishchenko A S et al. *Phys. Rev. Lett.* **100** 166401 (2008)
58. Burovski E, Fehske H, Mishchenko A S *Phys. Rev. Lett.* **101** 116403 (2008)
59. Mishchenko A S et al. *Phys. Rev. B* **79** 180301(R) (2009)
60. Mishchenko A S, in *Polarons in Bulk Materials and Systems with Reduced Dimensionality: Proc. of the Intern. School of Physics "Enrico Fermi"* Course CLXI (Eds G Iadonisi, J Ranninger, G De Filippis) (Amsterdam: IOS Press, 2006) p. 177
61. Mishchenko A S, Nagaosa N, in *Polarons in Complex Matter* (Springer Series in Material Science, Ed. A S Alexandrov) (Berlin: Springer, 2007) p. 503
62. Mishchenko A S, in *Computational Many-Particle Physics* (Lecture Notes in Physics, Vol. 739, Eds H Fehske, R Schneider, A Weiß) (Berlin: Springer, 2008) p. 367
63. Vafayi K, Gunnarsson O *Phys. Rev. B* **76** 035115 (2007)
64. Wells B O et al. *Phys. Rev. Lett.* **74** 964 (1995)
65. Rösch O, Gunnarsson O *Eur. Phys. J. B* **43** 11 (2005)
66. Shen K M et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 267002 (2004)
67. Kim C et al. *Phys. Rev. B* **65** 174516 (2002)
68. Rösch O, Gunnarsson O *Phys. Rev. Lett.* **92** 146403 (2004)
69. Rösch O et al. *Phys. Rev. Lett.* **95** 227002 (2005)
70. Lanzara A et al. *Nature* **412** 510 (2001)
71. Изюмов Ю А *УФН* **167** 465 (1997) [Izyumov Yu A *Phys. Usp.* **40** 445 (1997)]
72. Pickett W E *Rev. Mod. Phys.* **61** 433 (1989)
73. Timusk T, Statt B *Rep. Prog. Phys.* **62** 61 (1999)
74. Tohyama T, Maekawa S *Supercond. Sci. Technol.* **13** R17 (2000)
75. Kulić M L *Phys. Rep.* **338** 1 (2000)
76. Alexandrov A S *Theory of Superconductivity: From Weak to Strong Coupling* (Bristol: IOP Publ., 2003)
77. Kivelson S A et al. *Rev. Mod. Phys.* **75** 1201 (2003)
78. Norman M R, Pépin C *Rep. Prog. Phys.* **66** 1547 (2003)
79. Norman M R, Pines D, Kallin C *Adv. Phys.* **54** 715 (2005)
80. Pintschovius L *Phys. Status Solidi B* **242** 30 (2005)
81. Lee P A, Nagaosa N, Wen X-G *Rev. Mod. Phys.* **78** 17 (2006)
82. Egami T, in *Polarons in Bulk Materials and Systems with Reduced Dimensionality: Proc. of the Intern. School of Physics "Enrico Fermi"* Course CLXI (Eds G Iadonisi, J Ranninger, G De Filippis) (Amsterdam: IOS Press, 2006) p. 101
83. Zhou X J et al., in *Handbook of High-Temperature Superconductivity: Theory and Experiment* (Ed. J R Schrieffer) (Berlin: Springer, 2007) p. 87; cond-mat/0604284
84. Yoshida T et al. *J. Phys. Condens. Matter* **19** 125209 (2007)
85. Fink J et al. *Lect. Notes Phys.* **715** 295 (2007)
86. Tohyama T *Phys. Rev. B* **70** 174517 (2004)
87. Tohyama T, Maekawa S *Phys. Rev. B* **64** 212505 (2001)
88. Tohyama T, Maekawa S *Phys. Rev. B* **67** 092509 (2003)
89. Kim C et al. *Phys. Rev. Lett.* **80** 4245 (1998)
90. Emery V J *Phys. Rev. Lett.* **58** 2794 (1987)
91. Zhang F C, Rice T M *Phys. Rev. B* **37** 3759 (1988)
92. Kane C L, Lee P A, Read N *Phys. Rev. B* **39** 6880 (1989)
93. Liu Z, Manousakis E *Phys. Rev. B* **45** 2425 (1992)
94. Liu Z, Manousakis E *Phys. Rev. B* **44** 2414 (1991)
95. Manousakis E *Rev. Mod. Phys.* **63** 1 (1991)
96. Marsiglio F et al. *Phys. Rev. B* **43** 10882 (1991)
97. Kyung B, Ferrell R A *Phys. Rev. B* **54** 10125 (1996)
98. Lee T K, Shih C T *Phys. Rev. B* **55** 5983 (1997)
99. Tohyama T, Maekawa S *Phys. Rev. B* **49** 3596 (1994)
100. Lee T K, Ho C-M, Nagaosa N *Phys. Rev. Lett.* **90** 067001 (2003)
101. Devereaux T P, Virosztek A, Zawadowski A *Phys. Rev. B* **51** 505 (1995)
102. Khaliullin G, Horsch P *Phys. Rev. B* **54** R9600 (1996)
103. Khaliullin G, Horsch P *Physica C* **282–287** 1751 (1997)
104. Opel M et al. *Phys. Rev. B* **60** 9836 (1999)
105. Devereaux T P, Virosztek A, Zawadowski A *Phys. Rev. B* **59** 14618 (1999)
106. Horsch P, Khaliullin G, Oudovenko V *Physica C* **341–348** 117 (2000)
107. Ishihara S, Nagaosa N *Phys. Rev. B* **69** 144520 (2004)
108. Rösch O, Gunnarsson O *Phys. Rev. B* **70** 224518 (2004)
109. Devereaux T P et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 117004 (2004)
110. Cuk T et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 117003 (2004)
111. Horsch P, Khaliullin G *Physica B* **359–361** 620 (2005)
112. Bulut N, Scalapino D J *Phys. Rev. B* **54** 14971 (1996)
113. Chaplot S L et al. *Phys. Rev. B* **52** 7230 (1995)
114. Pintschovius L, Reichardt W, in *Neutron Scattering in Layered Cooper-Oxide Superconductors* (Ed. A Furrer) (Dordrecht: Kluwer Acad., 1998) p. 165
115. Timusk T et al., in *Anharmonic Properties of High-T_c Cuprates* (Eds D Mihailović et al.) (Singapore: World Scientific, 1995) p. 171
116. Kornilovitch P E *Phys. Rev. Lett.* **81** 5382 (1998)
117. Alexandrov A S, Kornilovitch P E *Phys. Rev. Lett.* **82** 807 (1999)
118. Meevasana W et al. *Phys. Rev. B* **74** 174524 (2006)
119. Meevasana W et al. *Phys. Rev. Lett.* **96** 157003 (2006)
120. Hohenberg P, Kohn W *Phys. Rev.* **136** B864 (1964)
121. Kohn W, Sham L J *Phys. Rev.* **140** A1133 (1965)
122. Bohnen K-P, Heid R, Krauss M *Europhys. Lett.* **64** 104 (2003)
123. Pintschovius L, Braden M *Phys. Rev. B* **60** R15039 (1999)
124. Giustino F, Cohen M L, Louie S G *Nature* **452** 975 (2008)
125. Reznik D et al. *Nature* **455** E6 (2008)
126. Reznik D et al. *Nature* **440** 1170 (2006)
127. Reznik D et al. *J. Low Temp. Phys.* **147** 353 (2007)
128. Pintschovius L et al. *Phys. Rev. B* **69** 214506 (2004)
129. Uchiyama H et al. *Phys. Rev. Lett.* **92** 197005 (2004)
130. Pintschovius L, Reznik D, Yamada K *Phys. Rev. B* **74** 174514 (2006)
131. Hanaguri T et al. *Nature* **430** 1001 (2004)
132. Кикоин К А, Мищенко А С *ЖЭТФ* **94** (11) 237 (1988) [Kikoin K A, Mishchenko A S *Sov. Phys. JETP* **67** 2309 (1988)]
133. Kikoin K A, Mishchenko A S *J. Phys. Condens Matter* **2** 6491 (1990)
134. Mishchenko A S, Kikoin K A *J. Phys. Condens Matter* **3** 5937 (1991)
135. McQueeney R J et al. *Phys. Rev. Lett.* **82** 628 (1999)
136. Pintschovius L et al. *Physica C* **185–189** 156 (1991)
137. Pintschovius L, Braden M *J. Low Temp. Phys.* **105** 813 (1996)
138. Reichardt W *J. Low Temp. Phys.* **105** 807 (1996)
139. McQueeney R J et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 077001 (2001)
140. Pintschovius L et al. *Phys. Rev. Lett.* **89** 037001 (2002)

141. Chung J-H et al. *Phys. Rev. B* **67** 014517 (2003)
142. Reznik D et al. *Phys. Rev. Lett.* **75** 2396 (1995)
143. Pyka N et al. *Phys. Rev. Lett.* **70** 1457 (1993)
144. Cooper S L et al. *Phys. Rev. B* **37** 5920 (1988)
145. Thomsen C et al. *Phys. Rev. B* **37** 9860 (1988)
146. Macfarlane R M, Rosen H, Seki H *Solid State Commun.* **63** 831 (1987)
147. Franck J P, in *Physical Properties of High Temperature Superconductors IV* (Ed. D M Ginsberg) (Singapore: World Scientific, 1994) p. 189
148. Franck J P et al. *Phys. Rev. B* **44** 5318 (1991)
149. Batlogg B et al. *Phys. Rev. Lett.* **59** 912 (1987)
150. Zech D et al. *Nature* **371** 681 (1994)
151. Zhao G et al. *Nature* **385** 236 (1997)
152. Zhao G et al. *J. Phys. Condens. Matter* **10** 9055 (1998)
153. Zhao G, Keller H, Conder K J. *J. Phys. Condens. Matter* **13** R569 (2001)
154. Hofer J et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 4192 (2000)
155. Khasanov R et al. *J. Phys. Condens. Matter* **16** S4439 (2004)
156. Khasanov R et al. *Phys. Rev. Lett.* **92** 057602 (2004)
157. Khasanov R et al. *Phys. Rev. B* **74** 064504 (2006)
158. Khasanov R et al. *Phys. Rev. B* **75** 060505(R) (2007)
159. Tallon J L et al. *Phys. Rev. Lett.* **94** 237002 (2005)
160. Khasanov R et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 077001 (2008)
161. Zhao G, Singh K K, Morris D E *Phys. Rev. B* **50** 4112 (1994)
162. Shengelaya A et al. *Phys. Rev. Lett.* **83** 5142 (1999)
163. Raffia F et al. *Phys. Rev. Lett.* **81** 5912 (1998)
164. Rubio Temprano D et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 1990 (2000)
165. Rubio Temprano D et al. *Eur. Phys. J. B* **19** 5 (2001)
166. Rubio Temprano D et al. *Phys. Rev. B* **66** 184506 (2002)
167. Lorenzana J, Sawatzky G A *Phys. Rev. Lett.* **74** 1867 (1995)
168. Lorenzana J, Sawatzky G A *Phys. Rev. B* **52** 9576 (1995)
169. Grüninger M et al. *Phys. Rev. B* **62** 12422 (2000)
170. Bernhard C et al. *Phys. Rev. B* **69** 052502 (2004)
171. Carbone F et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **105** 20161 (2008)
172. Shim H et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 247004 (2008)
173. Sugai S et al. *Solid State Commun.* **76** 371 (1990)
174. Lampakis D, Liarokapis E, Panagopoulos C *Phys. Rev. B* **73** 174518 (2006)
175. Radović Z, Božović N, Božović I *Phys. Rev. B* **77** 092508 (2008)
176. Kim C et al. *Phys. Rev. Lett.* **77** 4054 (1996)
177. Kim C et al. *Phys. Rev. B* **56** 15589 (1997)
178. Brunner M, Assaad F F, Muramatsu A *Phys. Rev. B* **62** 15480 (2000)
179. Leung P W, Gooding R J *Phys. Rev. B* **52** R15711 (1995)
180. Pothuizen J J M et al. *Phys. Rev. Lett.* **78** 717 (1997)
181. Sangiovanni G et al. *Phys. Rev. Lett.* **97** 046404 (2006)
182. Iwasawa H et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 157005 (2008)
183. Gweon G-H et al. *Nature* **430** 187 (2004)
184. Douglas J F et al. *Nature* **446** E5 (2007)
185. Iwasawa H et al. *Physica C* **463-465** 52 (2007)
186. Van den Brink J, Sushkov O P *Phys. Rev. B* **57** 3518 (1998)
187. Lupi S et al. *Phys. Rev. Lett.* **83** 4852 (1999)
188. Lupi S et al. *Phys. Rev. B* **45** 12470 (1992)
189. Lupi S et al. *Phys. Rev. B* **57** 1248 (1998)
190. Quijada M A et al. *Phys. Rev. B* **60** 14917 (1999)
191. Onose Y et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 217001 (2001)
192. Wang N L et al. *Phys. Rev. B* **67** 134526 (2003)
193. von Szczepanski K J, Becker K W Z. *Phys. B* **89** 327 (1992)
194. Falter C, Klenner M *Phys. Rev. B* **50** 9426 (1994)
195. Falter C, Klenner M, Hoffmann G A *Phys. Rev. B* **52** 3702 (1995)
196. Bäuml B, Wellein G, Fehske H *Phys. Rev. B* **58** 3663 (1998)
197. Ramšak A, Horsch P, Fulde P *Phys. Rev. B* **46** 14305 (1992)
198. Kyung B et al. *Phys. Rev. B* **54** 13167 (1996)
199. Röder H, Fehske H, Silver R N *Europhys. Lett.* **28** 257 (1994)
200. Schmitt-Rink S, Varma C M, Ruckenstein A E *Phys. Rev. Lett.* **60** 2793 (1988)
201. Martinez G, Horsch P *Phys. Rev. B* **44** 317 (1991)
202. Gunnarsson O, Rösch O *Phys. Rev. B* **73** 174521 (2006)
203. Bonča J et al. *Phys. Rev. B* **77** 054519 (2008)
204. Bonča J, Trugman S A, Batistić I *Phys. Rev. B* **60** 1633 (1999)
205. Bonča J, Maekawa S, Tohyama T *Phys. Rev. B* **76** 035121 (2007)
206. Rashba E I, in *Modern Problems in Condensed Matter Sciences* Vol. 2 (Eds V M Agranovich, A A Maradudin) (Amsterdam: North-Holland, 1982) p. 543; Ioselevich A S, Rashba E I, in *Modern Problems in Condensed Matter Sciences* Vol. 34 (Amsterdam: North-Holland, 1992) p. 347
207. Мищенко А С *Письма в ЖЭТФ* **66** 460 (1997) [Mishchenko A S *JETP Lett.* **66** 487 (1997)]
208. Zhou X J et al. *Phys. Rev. Lett.* **95** 117001 (2005)
209. Shen K M et al. *Phys. Rev. B* **75** 075115 (2007)
210. Ronning F et al. *Phys. Rev. B* **71** 094518 (2005)
211. Graf J et al. *Phys. Rev. Lett.* **98** 067004 (2007)
212. Xie B P et al. *Phys. Rev. Lett.* **98** 147001 (2007)
213. Valla T et al. *Phys. Rev. Lett.* **98** 167003 (2007)
214. Meevasana W et al. *Phys. Rev. B* **75** 174506 (2007)
215. Manousakis E *Phys. Rev. B* **75** 035106 (2007)
216. Manousakis E *Phys. Lett. A* **362** 86 (2007)
217. Kar S, Manousakis E *Phys. Rev. B* **78** 064508 (2008)
218. Park S R et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 117006 (2008)
219. Zhao G *Phys. Rev. B* **75** 104511 (2007)
220. Eremin I, Kamaev O, Eremin M V *Phys. Rev. B* **69** 094517 (2004)
221. Allen P B *Phys. Rev. Lett.* **59** 1460 (1987)
222. Мазин И И и др. *Письма в ЖЭТФ* **47** 94 (1988) [Mazin I I et al. *JETP Lett.* **47** 113 (1988)]
223. Maksimov E G et al. *Phys. Rev. Lett.* **63** 1880 (1989)
224. Рашкеев С Н и др. *ЖЭТФ* **97** 1688 (1990) [Rashkeev S N et al. *Sov. Phys. JETP* **70** 952 (1990)]
225. Shulga S V, Dolgov O V, Maksimov E G *Physica C* **178** 266 (1991)
226. Maksimov E G et al. *Solid State Commun.* **112** 449 (1999)
227. Jarlborg T *Solid State Commun.* **71** 669 (1989)
228. Cohen R E, Pickett W E, Krakauer H *Phys. Rev. Lett.* **64** 2575 (1990)
229. Zeyher R Z. *Phys. B* **80** 187 (1990)
230. Krakauer H, Pickett W E, Cohen R E *Phys. Rev. B* **47** 1002 (1993)
231. Mazin I I et al., in *Lattice Effects in High-T_c Superconductors* (Eds Y Bar-Yam et al.) (Singapore: World Scientific, 1992) p. 235
232. Gweon G-H et al. *Phys. Rev. Lett.* **97** 227001 (2006)
233. Lee J et al. *Nature* **442** 546 (2006)
234. De Lozanne A *Nature* **442** 522 (2006)
235. Gweon G-H et al., arXiv:0708.1027
236. Koralek J D et al. *Phys. Rev. Lett.* **96** 017005 (2006)
237. Hague J P et al. *Phys. Rev. B* **73** 054303 (2006)
238. Spencer P E et al. *Phys. Rev. B* **71** 184310 (2005)
239. Kornilovitch P E, Alexandrov A S *Phys. Rev. B* **70** 224511 (2004)
240. Kornilovitch P E *Phys. Rev. B* **59** 13531 (1999)
241. Paci P et al. *Phys. Rev. Lett.* **94** 036406 (2005)
242. Seibold G, Grilli M *Phys. Rev. B* **72** 104519 (2005)
243. Kampf A P, Schrieffer J R *Phys. Rev. B* **42** 7967 (1990)
244. Andergassen S et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 056401 (2001)
245. Fratini S, Ciuchi S *Phys. Rev. B* **72** 235107 (2005)
246. Paci P et al. *Phys. Rev. B* **74** 205108 (2006)
247. Koikegami S, Aiura Y *Phys. Rev. B* **77** 184519 (2008)
248. Sawatzky G A *Nature* **342** 480 (1989)
249. Dessau D S et al. *Phys. Rev. Lett.* **81** 192 (1998)
250. Perfetti L et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 216404 (2001)
251. Perfetti L et al. *Phys. Rev. B* **66** 075107 (2002)
252. Schrupp D et al. *Europhys. Lett.* **70** 789 (2005)
253. Mahan G D *Many-Particle Physics* (New York: Kluwer Acad./Plenum Publ., 2000)
254. Gerlach B, Löwen H *Rev. Mod. Phys.* **63** 63 (1991)
255. Röder H, Fehske H, Büttner H *Phys. Rev. B* **47** 12420 (1993)
256. Prelovšek P, Zeyher R, Horsch P *Phys. Rev. Lett.* **96** 086402 (2006)
257. Cataudella V et al. *J. Supercond. Novel Magn.* **22** 17 (2009)
258. Berciu M *Phys. Rev. Lett.* **97** 036402 (2006)
259. Goodvin G L, Berciu M, Sawatzky G A *Phys. Rev. B* **74** 245104 (2006)
260. Berciu M *Phys. Rev. Lett.* **98** 209702 (2007)
261. Berciu M, Goodvin G L *Phys. Rev. B* **76** 165109 (2007)
262. Covaci L, Berciu M *Europhys. Lett.* **80** 67001 (2007)
263. Covaci L, Berciu M *Phys. Rev. Lett.* **100** 256405 (2008)
264. Goodvin G L, Berciu M *Phys. Rev. B* **78** 235120 (2008)
265. Barišić O S *Phys. Rev. Lett.* **98** 209701 (2007)
266. Barišić O S *Phys. Rev. B* **76** 193106 (2007)
267. Freericks J K, Jarrell M, Scalapino D J *Phys. Rev. B* **48** 6302 (1993)
268. Cappelluti E, Ciuchi S *Phys. Rev. B* **66** 165102 (2002)
269. Cappelluti E, Ciuchi S, Fratini S *Phys. Rev. B* **76** 125111 (2007)
270. Cini M, D'Andrea A J. *Phys. C* **21** 193 (1988)
271. Ciuchi S et al. *Phys. Rev. B* **56** 4494 (1997)
272. Millis A J, Mueller R, Shraiman B I *Phys. Rev. B* **54** 5389 (1996)
273. Benedetti P, Zeyher R *Phys. Rev. B* **58** 14320 (1998)
274. Meyer D, Hewson A C, Bulla R *Phys. Rev. Lett.* **89** 196401 (2002)

275. Han J E, Gunnarsson O, Crespi V H *Phys. Rev. Lett.* **90** 167006 (2003)
276. Capone M, Ciuchi S *Phys. Rev. Lett.* **91** 186405 (2003)
277. Capone M, Carta P, Ciuchi S *Phys. Rev. B* **74** 045106 (2006)
278. Barentzen H *Phys. Rev. B* **53** 5598 (1996)
279. Yunoki S, Macridin A, Sawatzky G, Частная переписка (не опубликовано)
280. Pothuizen J J M, PhD Thesis (Groningen: Rijksuniversiteit, 1998)
281. Kim C, Частная переписка (не опубликовано)
282. Liu Z, Manousakis E *Phys. Rev. B* **51** 3156 (1995)
283. Alexandrov A S, Reynolds K *Phys. Rev. B* **76** 132506 (2007)
284. Liang R, Bonn D A, Hardy W N *Phys. Rev. B* **73** 180505(R) (2006)
285. Mishchenko A S et al., не опубликовано
286. De Filippis G, Cataudella V, Iadonisi G *Eur. Phys. J. B* **8** 339 (1999)
287. Lorenzana J *Europhys. Lett.* **53** 532 (2001)
288. Tempere J, Devreese J T *Eur. Phys. J. B* **20** 27 (2001)
289. Tempere J, Devreese J T *Phys. Rev. B* **64** 104504 (2001)
290. Cappelluti E, Ciuchi S, Fratini S *Phys. Rev. B* **79** 012502 (2009)
291. Johnson P D et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 177007 (2001)
292. Mihailović D et al. *Phys. Rev. B* **42** 7989 (1990)
293. Bi X-X, Eklund P C *Phys. Rev. Lett.* **70** 2625 (1993)
294. Alexandrov A S, Mott N *Polarons & Bipolarons* (Singapore: World Scientific, 1995)
295. Devreese J T, Tempere J *Solid State Commun.* **106** 309 (1998)
296. Devreese J T J. *Phys. Condens. Matter* **19** 255201 (2007)
297. Myasnikova A E, Myasnikov E N *Phys. Rev. B* **77** 165136 (2008)
298. Мищенко А С, не опубликовано
299. Мясников Э Н, Мясникова А Э, Матропас З П *ЖЭТФ* **129** 548 (2006) [Myasnikov E N, Myasnikova A E, Matropas Z P *JETP* **102** 480 (2006)]
300. Мясников Э Н, Мясникова А Э, Матропас З П *ФТТ* **48** 984 (2006) [Myasnikov E N, Myasnikova A E, Matropas Z P *Phys. Solid State* **48** 1046 (2006)]
301. Vidmar L, Bonča J, Maekawa S *Phys. Rev. B* **79** 125120 (2009)
302. De Filippis G, Cataudella V, Mishchenko A S, Perroni C A, Nagaosa N, не опубликовано
303. Schlesinger Z et al. *Phys. Rev. Lett.* **65** 801 (1990)
304. Valla T et al. *Science* **285** 2110 (1999)
305. Kaminski A et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 1788 (2000)
306. Bogdanov P V et al. *Phys. Rev. Lett.* **85** 2581 (2000)
307. Kaminski A et al. *Phys. Rev. Lett.* **86** 1070 (2001)
308. Gromko A D et al. *Phys. Rev. B* **68** 174520 (2003)
309. Sato T et al. *Phys. Rev. Lett.* **91** 157003 (2003)
310. Norman M R et al. *Phys. Rev. Lett.* **79** 3506 (1997)
311. Kim T K et al. *Phys. Rev. Lett.* **91** 167002 (2003)
312. Zeyher R, Greco A *Phys. Rev. B* **64** 140510 (2001)
313. Norman M R, Ding H *Phys. Rev. B* **57** R11089 (1998)
314. Eschrig M, Norman M R *Phys. Rev. Lett.* **85** 3261 (2000)
315. Manske D, Eremin I, Bennemann K H *Phys. Rev. Lett.* **87** 177005 (2001)
316. Eschrig M, Norman M R *Phys. Rev. Lett.* **89** 277005 (2002)
317. Manske D, Eremin I, Bennemann K H *Phys. Rev. B* **67** 134520 (2003)
318. Chubukov A V, Norman M R *Phys. Rev. B* **70** 174505 (2004)
319. Manske D *Theory of Unconventional Superconductors: Cooper-Pairing Mediated by Spin Excitations* (Heidelberg: Springer, 2004)
320. Fong H F et al. *Nature* **398** 588 (1999)
321. Mook H A et al. *Phys. Rev. Lett.* **70** 3490 (1993)
322. Fong H F et al. *Phys. Rev. Lett.* **75** 316 (1995)
323. Vignolle B et al. *Nature Phys.* **3** 163 (2007)
324. Sandvik A W, Scalapino D J, Bickers N E *Phys. Rev. B* **69** 094523 (2004)
325. Dai P et al. *Science* **284** 1344 (1999)
326. Wilson S D et al. *Nature* **442** 59 (2006)
327. Zhao J et al. *Phys. Rev. Lett.* **99** 017001 (2007)
328. Macridin A et al. *Phys. Rev. Lett.* **97** 056402 (2006)
329. Cataudella V et al. *Phys. Rev. B* **70** 193105 (2004)
330. De Filippis G et al. *Phys. Rev. B* **72** 014307 (2005)
331. Ramšak A, Horsch P *Phys. Rev. B* **48** 10559 (1993)
332. Brinkman W F, Rice T M *Phys. Rev. B* **2** 1324 (1970)
333. Fujimori A et al. *J. Phys. Chem. Solids* **57** 1379 (1996)
334. Perroni C A, Cataudella V, De Filippis G *J. Phys. Condens. Matter* **16** 1593 (2004)
335. Berciu M, Sawatzky G A *Europhys. Lett.* **81** 57008 (2008)
336. Bonča J, Trugman S A *Phys. Rev. B* **64** 094507 (2001)
337. Alexandrov A S *Phys. Rev. B* **53** 2863 (1996)
338. Alexandrov A S, Kornilovitch P E *J. Phys. Condens. Matter* **14** 5337 (2002)
339. Hague J P et al. *Phys. Rev. Lett.* **98** 037002 (2007)
340. Fehske H, Loos J, Wellein G *Phys. Rev. B* **61** 8016 (2000)
341. Sakai T, Poilblanc D, Scalapino D J *Phys. Rev. B* **55** 8445 (1997)
342. Slezak C et al. *Phys. Rev. B* **73** 205122 (2006)
343. Rösch O, Gunnarsson O *Phys. Rev. Lett.* **93** 237001 (2004)
344. Rösch O, Sangiovanni G, Gunnarsson O *Phys. Rev. B* **75** 035119 (2007)
345. Capone M et al. *Phys. Rev. Lett.* **92** 106401 (2004)
346. Sangiovanni G et al. *Phys. Rev. Lett.* **94** 026401 (2005)
347. Sangiovanni G, Capone M, Castellani C *Phys. Rev. B* **73** 165123 (2006)
348. Zhong J, Schüttler H-B *Phys. Rev. Lett.* **69** 1600 (1992)
349. Fehske H et al. *Phys. Rev. B* **51** 16582 (1995)
350. Wellein G, Röder H, Fehske H *Phys. Rev. B* **53** 9666 (1996)
351. Matsueda H, Tohyama T, Maekawa S *Phys. Rev. B* **74** 241103(R) (2006)
352. Matsueda H et al. *Phys. Rev. B* **77** 193112 (2008)
353. Hanaguri T et al. *Nature* **430** 1001 (2004)
354. Kohsaka Y et al. *Science* **315** 1380 (2007)
355. Pan S H et al. *Nature* **413** 282 (2001)
356. Singer P M, Hunt A W, Imai T *Phys. Rev. Lett.* **88** 047602 (2002)
357. Pavlenko N, Kopp T *J. Phys. Condens. Matter* **20** 395203 (2008)
358. Hague J P, Kornilovitch P E, Alexandrov A S *Phys. Rev. B* **78** 092302 (2008)
359. Berciu M, Mishchenko A S, Nagaosa N, arXiv:0906.1233
360. Pavlenko N, Kopp T *Phys. Rev. Lett.* **97** 187001 (2006)

Electron – phonon interaction in high-temperature superconductors

A.S. Mishchenko

Cross-Correlated Materials Research Group (CMRG),
 ASI, RIKEN, Wako, Saitama 351-0198, Japan
 Tel. (81-48) 462 11 11, ext. 63 62. Fax (81-48) 462 47 03
 E-mail: mishchenko@riken.jp
 Russian Research Centre "Kurchatov Institute",
 pl. Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russian Federation
 Tel. (7-499) 196-91 48. Fax (7-499) 943-00 74

Results indicating an important role of the electron – phonon interaction in high-temperature superconductivity compounds are presented with emphasis on its implications for angle resolved photoemission and optical conductivity. The dimensionless phonon coupling constant λ is determined by comparing the experimental and theoretical results. While undoped materials are in the strong coupling (λ -near-unity) regime, hole doping decreases λ , bringing compounds to the intermediate coupling regime at the optimum hole concentrations.

PACS numbers: **71.38. – k**, **74.20. – z**, **74.72. – h**

Bibliography — 360 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **179** (12) 1259 – 1280 (2009)

DOI: 10.3367/UFNr.0179.200912b.1259

Received 21 May 2009, revised 2 July 2009

Physics – Uspekhi **52** (12) (2009)