Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Владимиров, Д. Иле, Н. М. Плакида, Динамическая спиновая восприимчивость в t - J -модели: метод функции памяти, *ТМФ*, 2005, том 145, номер 2, 240–255

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1899>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.164.48.24

26 апреля 2023 г., 17:57:09

© 2005 г. А. А. Владимиров*, Д. Иле[†], Н. М. Плакида*

ДИНАМИЧЕСКАЯ СПИНОВАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ В t - J -МОДЕЛИ: МЕТОД ФУНКЦИИ ПАМЯТИ

Вычислена динамическая спиновая восприимчивость для t - J -модели в парамагнитной фазе на основе метода уравнений движения для функции релаксации от операторов Хаббарда. С помощью проекционной техники типа Мори функция релаксации выражена через функцию памяти второго порядка. Последняя вычислена в приближении взаимодействующих мод для дырочных возбуждений и спиновых флуктуаций в четвертом порядке по параметру перескока t и обменному взаимодействию J .

Ключевые слова: сильные электронные корреляции, динамическая спиновая восприимчивость, высокотемпературная сверхпроводимость, t - J -модель.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исходные нелегированные образцы медно-оксидных высокотемпературных сверхпроводников являются антиферромагнитными (АФ) изоляторами, спиновая динамика которых хорошо описывается в рамках квазидвумерной модели Гейзенберга [1]. В то же время природа аномальной спиновой динамики легированных образцов требует дальнейшего изучения [2]. Одной из базисных моделей, предложенных для описания высокотемпературных сверхпроводников, является t - J -модель для плоскости CuO_2 сверхпроводящих купратов. Эта модель, или ее расширенная версия – t - t' - J -модель, является эффективной моделью для описания низкоэнергетической части спектра возбуждений. Она выводится из модели Хаббарда в пределе большого кулоновского взаимодействия при исключении дважды занятых электронных состояний с высокой энергией. В результате t - J -модель можно записать в виде однозонной модели с помощью проекционных операторов Хаббарда, которые подчиняются более сложным коммутационным соотношениям по сравнению с ферми- и бозе-операторами. Это обстоятельство затрудняет использование стандартной диаграммной техники при изучении t - J -модели. Разные подходы, такие как метод вспомогательных бозонов [3] или фермионов [4], специальная диаграммная техника для операторов Хаббарда [5], были использованы для изучения спиновой динамики в рамках t - J -модели. В методе вспомогательных полей локальное

*Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна, Россия.

E-mail: plakida@thsun1.jinr.ru

[†]Институт теоретической физики, Лейпцигский университет, D-04109, Лейпциг, Германия.
E-mail:

ограничение на число допустимых квантовых состояний обычно заменяется глобальным, не зависящим от номера узла. Такая замена вносит неконтролируемое приближение в данный подход. В то же время при использовании операторов Хаббарда такой проблемы не возникает, поскольку локальное ограничение автоматически выполняется. Численные вычисления на конечных кластерах также были использованы для изучения t - J -модели (см. работы [6]).

В настоящей работе изучается спиновая динамика в t - J -модели в парамагнитной фазе с помощью метода функции релаксации [7]–[9] в терминах операторов Хаббарда. В работе [10] в рамках этого метода динамическая спиновая восприимчивость была вычислена в приближении низшего порядка для функции памяти в виде корреляционной функции от операторов тока. Проведенные нами численные вычисления показали, что приближение первого порядка является недостаточным для получения физически разумных результатов для динамической спиновой восприимчивости. (Отметим, однако, недавнюю работу [11], где авторам удалось в этом приближении описать появление несоизмерной магнитной фазы.) Поэтому в данной работе функция памяти вычисляется во втором порядке и при этом выражается через корреляционную функцию сил. Вычисление статической восприимчивости мы провели в приближении среднего поля аналогично работе [12] в рамках теории, предложенной в работе [13].

В предельном случае модели Гейзенберга ($t = 0$) наши результаты совпадают с представлением динамической спиновой восприимчивости, полученным Церковниковым [9] в методе проектирования для функций релаксации, и с результатом работы [14], полученным с помощью метода проектирования для запаздывающих коммутаторных функций Грина [15] для двухкомпонентной матрицы от операторов спина ($S_{\mathbf{q}}^{\pm}, i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^{\pm}$). Полученное нами выражение для динамической спиновой восприимчивости для общей t - J -модели согласуется также с результатом работы [16], где был использован стандартный метод проектирования Мори.

Работа построена следующим образом. В разделе 2 вводится формализм метода функции релаксации и находится общее представление для динамической спиновой восприимчивости в терминах функции памяти с помощью проекционной техники типа Мори. В разделе 3 вводится t - J -модель в операторах Хаббарда и вычисляется массовый оператор в приближении взаимодействующих мод. Полученные результаты обсуждаются в разделе 4. В приложениях приводится выражение для оператора силы для спиновых операторов и дается вывод уравнения для статической спиновой восприимчивости.

2. ФОРМАЛИЗМ ФУНКЦИИ РЕЛАКСАЦИИ

Динамическая восприимчивость для спиновых операторов $S_i^{\pm} = S_i^x \pm iS_i^y$ определяется функцией

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\langle \langle S_{\mathbf{q}}^{+} | S_{-\mathbf{q}}^{-} \rangle \rangle_{\omega} = - \sum_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j} \exp\{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)\} \langle \langle S_i^{+} | S_j^{-} \rangle \rangle_{\omega}, \quad (1)$$

где $\langle \langle A | B \rangle \rangle_{\omega}$ обозначает фурье-образ запаздывающей временной коммутаторной функции Грина [8], [15]:

$$\langle \langle A | B \rangle \rangle_{\omega} = -i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle [A(t), B] \rangle, \quad (2)$$

где $\text{Im } \omega > 0$, $A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}$, $\langle AB \rangle$ – статистическое среднее от операторов AB .

В парамагнитной фазе с нулевой намагниченностью подрешеток среднее от коммутатора $\langle [S_i^+, S_j^-] \rangle = 2\delta_{ij} \langle S_i^z \rangle$ равно нулю. Поскольку эта величина входит в качестве начального значения ($t = 0$) в уравнение движения для функции Грина (1), удобнее рассматривать уравнение движения для релаксационной функции Кубо–Мори (см. [8], [17]):

$$((A | B))_\omega = -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} (A(t), B), \quad (3)$$

где $(A(t), B)$ – скалярное произведение Кубо–Мори, определяемое выражением

$$(A(t), B) = \int_0^\beta d\lambda \langle A(t - i\lambda) B \rangle, \quad (4)$$

и принята система единиц: $\hbar = k_B = 1$, $\beta = 1/T$. Функции Грина (2) и функции релаксации (3) связаны соотношением

$$\omega ((A | B))_\omega = \langle \langle A | B \rangle \rangle_\omega - \langle \langle A | B \rangle \rangle_{\omega=0}. \quad (5)$$

В дальнейшем мы также воспользуемся следующими полезными соотношениями, полученными из определений (2)–(4):

$$(i\dot{A} | B)_\omega = ((A | -i\dot{B}))_\omega = \langle \langle A | B \rangle \rangle_\omega, \quad (6)$$

$$(i\dot{A}, B) = (A, -i\dot{B}) = \langle [A, B] \rangle, \quad (7)$$

$$(A, B) = -\langle \langle A | B \rangle \rangle_{\omega=0}, \quad (8)$$

где $i\dot{A} = idA/dt = [A, H]$.

Используя приведенные выше определения, мы можем выразить динамическую спиновую восприимчивость (1) через спиновую функцию релаксации $\Phi(\mathbf{q}, \omega) = ((S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^-))_\omega$:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{\mathbf{q}} - \omega \Phi(\mathbf{q}, \omega), \quad (9)$$

где $\chi_{\mathbf{q}} \equiv \chi(\mathbf{q}, 0) = (S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-)$ – статическая спиновая восприимчивость. Используя метод уравнения движения, получим следующую систему уравнений для функции релаксации:

$$\omega ((S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^-))_\omega = \chi_{\mathbf{q}} + ((i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^-))_\omega, \quad (10)$$

$$\omega ((i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^-))_\omega = ((i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_\omega. \quad (11)$$

Здесь мы приняли во внимание, что в последнем уравнении согласно соотношению (7) статическая корреляционная функция $(i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-) = \langle [S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle = (2/\sqrt{N}) \langle S_{\mathbf{q}=0}^z \rangle = 0$ в парамагнитной фазе.

Для дальнейших вычислений необходимо применить проекционную технику для разделения когерентных и некогерентных процессов в распространении спиновых флуктуаций. Существует несколько проекционных методов решения этой проблемы. Наиболее

часто используется метод Мори [18], основанный на введении неприводимых операторов и неприводимого оператора Лиувилля для исключения секулярных членов из временных корреляционных функций (см. также монографию [17]). В то время как нахождение неприводимых операторов, основанное на проекционной технике для статических корреляционных функций, достаточно просто, вычисление временной зависимости с помощью неприводимого оператора Лиувилля имеет определенные трудности и иногда приводит к необоснованным результатам (см. работу [19]). Церковников предложил общий метод проектирования для временных функций Грина [8], в котором в качестве скалярного произведения используется исходная временная функция Грина. При таком подходе уравнения для спроектированных функций Грина удовлетворяют формально точной цепочке уравнений, обрыв которой на некотором шаге позволяет получить приближенное выражение для исходной функции Грина. Этот метод был использован им в работе [9] для вывода динамической спиновой восприимчивости в модели Гейзенберга в парамагнитной фазе.

Здесь мы применим упрощенную версию проекционной техники типа Мори для функций Грина [7], которая использовалась для вывода в модели Гейзенберга уравнения Дайсона, совпадающего с результатами диаграммной техники [20]. Метод основан на введении неприводимых (*irreducible*) операторов со скалярным произведением, определенным для статических корреляционных функций. Для учета только спроектированной части временной зависимости корреляционных функций мы определяем собственную (*proper*) часть матрицы рассеяния, играющую роль массового оператора, который, как и в методе Мори, не содержит функций Грина, описывающих свободное распространение частиц.

Следуя выбранному методу, мы должны спроектировать операторы спинового тока $i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}$ на исходный оператор спиновой плотности, определяя его неприводимую часть с помощью уравнения

$$i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm} = [S_{\mathbf{q}}^{\pm}, H] = \omega_{\mathbf{q}}^{(0)} S_{\mathbf{q}}^{\pm} + \{i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{\text{irr}}, \quad (\{i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{\text{irr}}, S_{-\mathbf{q}}^{\mp}) = 0. \quad (12)$$

Условие ортогональности для неприводимой части записано для скалярного произведения, определенного как одновременная функция Кубо–Мори (4). Формальное определение неприводимой части дает нам следующее выражение для частоты спиновых флуктуаций нулевого порядка $\omega_{\mathbf{q}}^{(0)}$:

$$\omega_{\mathbf{q}}^{(0)} = \frac{(i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}, S_{-\mathbf{q}}^{\mp})}{(S_{\mathbf{q}}^{\pm}, S_{-\mathbf{q}}^{\mp})} = \frac{\langle [S_{\mathbf{q}}^{\pm}, S_{-\mathbf{q}}^{\mp}] \rangle}{\chi_{\mathbf{q}}} = 0,$$

которая равна нулю, поскольку рассматривается в парамагнитной фазе. Следовательно, неприводимые части операторов (12) равны исходным операторам: $\{i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{\text{irr}} = i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}$.

В результате решение системы уравнений (10), (11) для функции релаксации может быть записано в виде

$$\Phi(\mathbf{q}, \omega) = \Phi^0(\mathbf{q}, \omega) + \Phi^0(\mathbf{q}, \omega) T(\mathbf{q}, \omega) \Phi^0(\mathbf{q}, \omega), \quad \Phi^0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_{\mathbf{q}}}{\omega}, \quad (13)$$

где мы определили матрицу рассеяния первого порядка как релаксационную функцию токов:

$$T(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\chi_{\mathbf{q}}^2} ((i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}. \quad (14)$$

Чтобы учесть только спроектированную временную зависимость корреляционных функций в матрице рассеяния (14), так же, как в методе Мори, мы определяем собственную часть матрицы, не содержащую частей, соединенных одной функцией релаксации нулевого порядка $\Phi^0(\mathbf{q}, \omega)$. Собственная часть определяет функцию памяти $M(\mathbf{q}, \omega)$ согласно уравнению

$$T(\mathbf{q}, \omega) = \frac{M(\mathbf{q}, \omega)}{\chi_{\mathbf{q}}^2} + \frac{M(\mathbf{q}, \omega)}{\chi_{\mathbf{q}}^2} \Phi^0(\mathbf{q}, \omega) T(\mathbf{q}, \omega). \quad (15)$$

В терминах функции памяти решение уравнения (13) записывается аналогично работе [10]:

$$\Phi(\mathbf{q}, \omega) = ((S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega} = \frac{\chi_{\mathbf{q}}}{\omega - M(\mathbf{q}, \omega)/\chi_{\mathbf{q}}}, \quad (16)$$

где функция памяти выражается через операторы спинного тока $i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}$:

$$M(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{\mathbf{q}}^2 T_{\mathbf{q}}^{\text{proper}}(\omega) = ((i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}^{\text{proper}}. \quad (17)$$

В отличие от работы [10], где функция памяти (17) была вычислена расцеплением соответствующих временных корреляционных функций, мы рассмотрим вклады более высокого порядка в функцию памяти. Для этого продифференцируем ее двухвременное представление $((i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+(t) | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-(t')))$ по временам t и t' . В результате получим следующие уравнения:

$$\omega ((i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega} = m(\mathbf{q}) + ((-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}, \quad (18)$$

$$\omega ((-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega} = ((-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -\ddot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}, \quad (19)$$

где мы ввели в уравнении (18) статическую корреляционную функцию

$$m(\mathbf{q}) = (i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-) = \langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle. \quad (20)$$

При этом статическая корреляционная функция в уравнении (19) равна нулю:

$$(-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-) = \langle [-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 d\omega \operatorname{Im} \chi_{\mathbf{q}}(\omega + i\delta) = 0, \quad (21)$$

поскольку все четные моменты мнимой части восприимчивости – нечетной функции частоты ω – равны нулю.

Далее мы повторим процедуру проектирования производных второго порядка по времени от спинных операторов $\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}$ – операторов силы – на операторы тока аналогично (12):

$$-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm} = [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}, H] = \omega_{\mathbf{q}}^{(1)} i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm} + \{-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{\text{irr}}, \quad (\{-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{\text{irr}}, i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^{\mp}) = 0. \quad (22)$$

Из определения неприводимой части в этом уравнении мы получим, что частота спиновых флуктуаций первого порядка в соответствии с выражением (21) также равна нулю:

$$\omega_{\mathbf{q}}^{(1)} = \frac{(-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}, -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^{\mp})}{(i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}, -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^{\mp})} = \frac{\langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-] \rangle}{m(\mathbf{q})} = 0.$$

Следовательно, неприводимые части операторов (22) (применительно к операторам $-i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\mp}$) равны исходным операторам: $\{-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{\text{irr}} = -\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}$. Отметим, что неприводимая часть операторов $\{-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{\text{irr}}$ ортогональна также операторам более низкого порядка $S_{\mathbf{q}}^{\pm}$, поскольку последние были исключены при проектировании операторов $-i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\mp}$ согласно уравнению (12).

По аналогии с выводом уравнений для функции релаксации (13), матрицы рассеяния (14) и функции памяти (15) мы можем записать решение системы уравнений (18), (19) для функции памяти в окончательном виде:

$$M(\mathbf{q}, \omega) = \frac{m(\mathbf{q})}{\omega - \Sigma(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (23)$$

где массовый оператор представляет собой собственную часть матрицы рассеяния второго порядка:

$$\Sigma(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{m(\mathbf{q})} ((-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -\ddot{S}_{-\mathbf{q}}^-)_{\omega}^{\text{proper}}). \quad (24)$$

Используя представления (16) для функции релаксации и (23) для функции памяти, получим окончательное выражение для функции релаксации через массовый оператор (24):

$$\Phi(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{\mathbf{q}} \frac{\omega - \Sigma(\mathbf{q}, \omega)}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - \omega \Sigma(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (25)$$

где мы ввели частоту спиновых флуктуаций в статическом пределе:

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = \frac{m(\mathbf{q})}{\chi_{\mathbf{q}}}. \quad (26)$$

Следовательно, динамическая спиновая восприимчивость согласно выражению (9) принимает вид

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{\mathbf{q}} - \omega \Phi(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{m(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - \omega \Sigma(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (27)$$

Полученное выражение для динамической спиновой восприимчивости (27) с массовым оператором в виде (24) совпадает по форме с результатами работ [9], [16]. В работе [14], где был использован метод проектирования для запаздывающих коммутаторных функций для двухкомпонентной матрицы от операторов спина $(S_{\mathbf{q}}^{\pm}, i\dot{S}_{\pm\mathbf{q}}^{\pm})$, спиновая восприимчивость была записана в виде (27), но с массовым оператором, определенным через запаздывающую многочастичную функцию Грина:

$$\omega \Sigma(\mathbf{q}, \omega) \rightarrow \tilde{\Sigma}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{m(\mathbf{q})} \langle \langle (-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+)^{\text{irr}} | (-\ddot{S}_{-\mathbf{q}}^-)^{\text{irr}} \rangle \rangle_{\omega}^{\text{proper}}. \quad (28)$$

Учитывая, однако, связь (5) коммутаторной функции Грина с функцией релаксации, получаем соотношение

$$\omega((- \ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | - \ddot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}^{\text{proper}} = \langle \langle (- \ddot{S}_{\mathbf{q}}^+)^{\text{irr}} | (- \ddot{S}_{-\mathbf{q}}^-)^{\text{irr}} \rangle \rangle_{\omega}^{\text{proper}}, \quad (29)$$

которое показывает, что массовые операторы в выражении (28) эквивалентны.

Спектр спиновых флуктуаций определяется мнимой частью спиновой восприимчивости (27):

$$\text{Im } \chi(\mathbf{q}, \omega + i\eta) = \chi''(\mathbf{q}, \omega) = m(\mathbf{q}) \frac{\omega \Sigma''(\mathbf{q}, \omega)}{[\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - \omega \Sigma'(\mathbf{q}, \omega)]^2 + [\omega \Sigma''(\mathbf{q}, \omega)]^2}, \quad (30)$$

где $\Sigma(\mathbf{q}, \omega + i\eta) = \Sigma'(\mathbf{q}, \omega) - i\Sigma''(\mathbf{q}, \omega)$. Здесь $\Sigma'(\mathbf{q}, \omega) = -\Sigma'(\mathbf{q}, -\omega)$ – реальная и $\Sigma''(\mathbf{q}, \omega) = \Sigma''(\mathbf{q}, -\omega)$ – мнимая части массового оператора. Когерентное распространение спиновых флуктуаций описывается частотой $\omega_{\mathbf{q}}$, в то время как массовый оператор $\Sigma(\mathbf{q}, \omega)$ определяет некогерентную часть спектра, обусловленную неупругими процессами рассеяния.

3. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ t - J -МОДЕЛИ

3.1. t - J -модель. Рассмотрим t - J -модель в стандартных обозначениях [21]:

$$H_{t-J} = -t \sum_{i \neq j, \sigma} \tilde{a}_{i\sigma}^+ \tilde{a}_{j\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right), \quad (31)$$

где $\tilde{a}_{i\sigma}^+ = a_{i\sigma}^+ (1 - n_{i-\sigma})$ – спроектированные электронные операторы и $S_i^{\alpha} = (1/2) \sum_{s,s'} \tilde{a}_{is}^+ \sigma_{s,s'}^{\alpha} \tilde{a}_{is'}$ – операторы спина $1/2$. Здесь t представляет собой эффективный интеграл перескока на ближайших узлах и J – антиферромагнитное обменное взаимодействие для пары ближайших узлов $\langle ij \rangle$, $i > j$.

Чтобы строго учесть спроектированный характер электронных операторов, мы перейдем к операторам Хаббарда [22], которые определяются в виде матрицы $X_i^{\alpha\beta} = |i, \alpha\rangle \langle i, \beta|$ для трех возможных состояний на узле решетки i : $|i, \alpha\rangle = |i, 0\rangle$ для пустого узла и $|i, \sigma\rangle$ для однократно заполненного узла со спином $\sigma/2$ ($\sigma = \pm 1$, $\bar{\sigma} = -\sigma$). Операторы Хаббарда удовлетворяют соотношению полноты

$$X_i^{00} + \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} = 1, \quad (32)$$

которое обеспечивает строгое выполнение условия отсутствия двукратно заполненных узлов. Операторы спина и плотности в формуле (31) выражаются через операторы Хаббарда как

$$S_i^{\sigma} = X_i^{\sigma\bar{\sigma}}, \quad S_i^z = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma X_i^{\sigma\sigma}, \quad n_i = \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma}. \quad (33)$$

Операторы Хаббарда подчиняются правилам умножения: $X_i^{\alpha\beta} X_i^{\gamma\delta} = \delta_{\beta\gamma} X_i^{\alpha\delta}$, и коммутационным соотношениям

$$[X_i^{\alpha\beta}, X_j^{\gamma\delta}]_{\pm} = \delta_{ij} (\delta_{\beta\gamma} X_i^{\alpha\delta} \pm \delta_{\delta\alpha} X_i^{\gamma\beta}). \quad (34)$$

В выражении (34) верхний знак определяет антикоммутатор для ферми-подобных операторов (как, например, $X_i^{0\sigma}$). Нижний знак определяет коммутатор для бозе-подобных операторов, таких как операторы спина (33).

Используя представление операторов Хаббарда для $\tilde{a}_{i\sigma}^+ = X_i^{\sigma 0}$ и $\tilde{a}_{j\sigma} = X_j^{0\sigma}$ и выражения (33) для операторов спина и плотности, запишем гамильтониан t - J -модели (31) в более общей форме:

$$H_{t-J} = - \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + \frac{1}{4} \sum_{i \neq j, \sigma} J_{ij} (X_i^{\sigma\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma}\sigma} - X_i^{\sigma\sigma} X_j^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}). \quad (35)$$

Здесь введены интегралы перескока для ближайших соседей ($t_{ij} = t$) и для следующих соседей ($t_{ij} = t'$) на двумерной квадратной решетке, а также обменное взаимодействие $J_{ij} = J$ для ближайших соседей. Эти параметры можно считать независимыми. Они могут быть вычислены исходя из более реалистичной для купратов трехзонной p - d -модели (см., например, [23]). Мы также ввели химический потенциал μ , который определяется из уравнения для средней плотности заполнения

$$n = \langle n_i \rangle = \sum_{\sigma} \langle X_i^{\sigma\sigma} \rangle. \quad (36)$$

Далее мы вычислим динамическую спиновую восприимчивость для t - J -модели (35), используя уравнения движения для спиновых операторов, выраженных через операторы Хаббарда.

3.2. Вычисление массового оператора. Сначала выразим массовый оператор (24) через неприводимую часть временной корреляционной функции сил, используя для него спектральное представление [15]

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{q}, \omega) &= m(\mathbf{q}) \Sigma(\mathbf{q}, \omega) = ((-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -\ddot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}^{\text{proper}} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{e^{\beta\omega'} - 1}{\omega'(\omega - \omega' + i\eta)} \times \\ &\quad \times \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega't} \langle F_i^{\dagger}(t) | F_j \rangle^{\text{proper}}, \end{aligned} \quad (37)$$

где оператор силы в координатном представлении определяется как $F_j = -\ddot{S}_j^+ = i\dot{J}_j$. Оператор тока $J_j = i\dot{S}_j^+$ может быть записан как сумма двух членов:

$$J_j = J_j^t + J_j^J = [S_j^+, H_t] + [S_j^+, H_J]. \quad (38)$$

В уравнении (38) первый член содержит вклад от кинетической энергии дырок, пропорциональный интегралу перескока:

$$J_j^t = - \sum_m t_{jm} (X_j^{+0} X_m^{0-} - X_m^{+0} X_j^{0-}). \quad (39)$$

Второй член в (38) обусловлен обменным взаимодействием:

$$J_j^J = \sum_m J_{jm} (S_j^z S_m^+ - S_m^z S_j^+). \quad (40)$$

В результате для оператора силы получаем представление

$$F_j = i\dot{J}_j = [(J_j^t + J_j^J), (H_t + H_J)] = F_j^{tt} + F_j^{tJ} + F_j^{Jt} + F_j^{JJ}. \quad (41)$$

Подробные выражения для отдельных вкладов в оператор силы F_j приведены в приложении А, (А.2)–(А.5).

Для вычисления неприводимой части временной корреляционной функции в правой части (37) воспользуемся приближением взаимодействующих мод, предполагая, что распространение “одетых” электрон-дырочных и спиновых флуктуаций происходит независимо. Данное приближение в сущности эквивалентно самосогласованному борновскому приближению, в котором пренебрегается перенормировкой вершин. Оно соответствует следующей схеме расщепления временных корреляционных функций:

$$\begin{aligned} \langle S_{\mathbf{k}_1}^z(t) S_{\mathbf{k}_2}^z(t) S_{\mathbf{k}_3}^-(t) | S_{-\mathbf{k}_1}^z S_{-\mathbf{k}_2}^z S_{-\mathbf{k}_3}^+ \rangle &\simeq \\ &\simeq \langle S_{\mathbf{k}_1}^z(t) | S_{-\mathbf{k}_1}^z \rangle \langle S_{\mathbf{k}_2}^z(t) | S_{-\mathbf{k}_2}^z \rangle \langle S_{\mathbf{k}_3}^-(t) | S_{-\mathbf{k}_3}^+ \rangle, \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \langle X_{\mathbf{k}_1}^{0+}(t) X_{\mathbf{k}_2}^{\sigma\sigma}(t) X_{\mathbf{k}_3}^{-0}(t) | X_{-\mathbf{k}_1}^{+0} X_{-\mathbf{k}_2}^{\sigma\sigma} X_{-\mathbf{k}_3}^{0-} \rangle &\simeq \\ &\simeq \langle X_{\mathbf{k}_1}^{0+}(t) | X_{-\mathbf{k}_1}^{+0} \rangle \langle X_{\mathbf{k}_2}^{\sigma\sigma}(t) | X_{-\mathbf{k}_2}^{\sigma\sigma} \rangle \langle X_{\mathbf{k}_3}^{-0}(t) | X_{-\mathbf{k}_3}^{0-} \rangle. \end{aligned} \quad (43)$$

Подставляя оператор силы (41) во временную корреляционную функцию (37), мы получим 16 вкладов вида $\langle (F_i^{\alpha\beta})^\dagger(t) | F_j^{\gamma\delta} \rangle$, где верхние индексы соответствуют различным комбинациям индексов t, J в (41). В соответствии с принятым самосогласованным борновским приближением мы сохранили далее только те члены, которые дают вклад при расщеплении (42) и (43) во втором порядке по взаимодействию. При этом мы можем пренебречь “недиагональными” членами типа $\langle (F_i^{\alpha\alpha})^+(t) | F_j^{\beta\beta} \rangle$ и $\langle (F_i^{\alpha\alpha})^+(t) | F_j^{\alpha\beta} \rangle$ при $\alpha \neq \beta$, которые отличны от нуля в высшем порядке по взаимодействию t^2 или J^2 в формуле (37). Поэтому далее рассмотрим только следующие вклады:

$$\begin{aligned} \Psi_{tt} &\propto \langle (F_i^{tt})^\dagger(t) | F_j^{tt} \rangle, \quad \Psi_{JJ} \propto \langle (F_i^{JJ})^\dagger(t) | F_j^{JJ} \rangle, \\ \Psi_{tJ} &\propto \langle (F_i^{tJ})^\dagger(t) | F_j^{tJ} \rangle, \quad \Psi_{Jt} \propto \langle (F_i^{Jt})^\dagger(t) | F_j^{Jt} \rangle, \quad \Psi_{tJ,Jt} \propto \langle (F_i^{tJ})^\dagger(t) | F_j^{Jt} \rangle. \end{aligned}$$

Используя предложенную выше схему расщепления (42), (43) и спектральное представление для корреляционных функций, массовый оператор (24) согласно (37) запишем в виде

$$\Sigma(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{m(\mathbf{q})} (\Psi_{tt}(\mathbf{q}, \omega) + \Psi_{JJ}(\mathbf{q}, \omega) + \Psi_{tJ}(\mathbf{q}, \omega) + \Psi_{Jt}(\mathbf{q}, \omega) + 2\Psi_{tJ,Jt}(\mathbf{q}, \omega)). \quad (44)$$

Вклад от подсистемы делокализованных дырок $\Psi_{tt}(\mathbf{q}, \omega)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi_{tt}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{2}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t^4 \Gamma^2(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega' d\omega_1 d\omega_2}{\omega'(\omega - \omega' + i\eta)} \times \\ &\times B_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_1}(\omega_1) \left(A_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}(\omega_2) + \frac{1}{4} C_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}(\omega_2) \right) B_{\mathbf{k}_2}(\omega' - \omega_1 - \omega_2) \times \\ &\times ((1 - n(\omega_1))(1 + N(\omega_2))(1 - n(\omega' - \omega_1 - \omega_2)) - n(\omega_1)N(\omega_2)n(\omega' - \omega_1 - \omega_2)), \end{aligned} \quad (45)$$

где

$$\begin{aligned}
 \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) &= 4(4\gamma_{\mathbf{k}_1}\gamma_{\mathbf{k}_2} - \gamma_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2} - 4\gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_1}\gamma_{\mathbf{k}_2} + \gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}), \\
 A_{\mathbf{q}}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle S_{\mathbf{q}}^- | S_{-\mathbf{q}}^+ \rangle \rangle_{\omega+i\varepsilon}, \\
 B_{\mathbf{q}}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle X_{\mathbf{q}}^{0+} | X_{-\mathbf{q}}^{+0} \rangle \rangle_{\omega+i\varepsilon}, \\
 C_{\mathbf{q}}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle n_{\mathbf{q}} | n_{-\mathbf{q}} \rangle \rangle_{\omega+i\varepsilon}.
 \end{aligned} \tag{46}$$

Здесь введены функции распределения Ферми $n(\omega) = (e^{\beta\omega} + 1)^{-1}$ и Бозе $N(\omega) = (e^{\beta\omega} - 1)^{-1}$, оператор числа частиц $n_{\mathbf{q}} = \sum_{\sigma} X_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma}$, $\gamma_{\mathbf{q}} = 1/2[\cos q_x + \cos q_y]$ для 2D-квадратной решетки (постоянная решетки принята равной единице).

Вклад $\Psi_{JJ}(\mathbf{q}, \omega)$ в (44) определяется подсистемой локализованных спинов и имеет вид

$$\begin{aligned}
 \Psi_{JJ}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} J^4 \Gamma^2(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega' d\omega_1 d\omega_2}{\omega'(\omega - \omega' + i\eta)} \times \\
 &\quad \times A_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_1}(\omega_1) A_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}(\omega_2) A_{\mathbf{k}_2}(\omega' - \omega_1 - \omega_2) \times \\
 &\quad \times ((1 + N(\omega_1))(1 + N(\omega_2))(1 + N(\omega' - \omega_1 - \omega_2)) - \\
 &\quad - N(\omega_1)N(\omega_2)N(\omega' - \omega_1 - \omega_2)).
 \end{aligned} \tag{47}$$

При выводе (47) использовано соотношение $\langle \langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle \rangle_{\omega} = 1/2 \langle \langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle \rangle_{\omega}$, справедливое в парамагнитной фазе.

Смешанный вклад $\Psi_{tJ}(\mathbf{q}, \omega)$ имеет вид

$$\begin{aligned}
 \Psi_{tJ}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{2N^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t^2 J^2 \Gamma^2(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega' d\omega_1 d\omega_2}{\omega'(\omega - \omega' + i\eta)} \times \\
 &\quad \times B_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_1}(\omega_1) B_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}(\omega_2) (2A_{\mathbf{k}_2}(\omega' - \omega_1 - \omega_2) + C_{\mathbf{k}_2}(\omega' - \omega_1 - \omega_2)) \times \\
 &\quad \times ((1 - n(\omega_1))(1 - n(\omega_2))(1 + N(\omega' - \omega_1 - \omega_2)) - \\
 &\quad - n(\omega_1)n(\omega_2)N(\omega' - \omega_1 - \omega_2)).
 \end{aligned} \tag{48}$$

Аналогично для вклада $\Psi_{Jt}(\mathbf{q}, \omega)$ получим

$$\begin{aligned}
 \Psi_{Jt}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{4}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t^2 J^2 \Gamma^2(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega' d\omega_1 d\omega_2}{\omega'(\omega - \omega' + i\eta)} \times \\
 &\quad \times A_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_1}(\omega_1) B_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}(\omega_2) B_{\mathbf{k}_2}(\omega' - \omega_1 - \omega_2) \times \\
 &\quad \times ((1 + N(\omega_1))(1 - n(\omega_2))(1 - n(\omega' - \omega_1 - \omega_2)) - \\
 &\quad - N(\omega_1)n(\omega_2)n(\omega' - \omega_1 - \omega_2)).
 \end{aligned} \tag{49}$$

Смешанный вклад $\Psi_{tJ,Jt}(\mathbf{q}, \omega)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi_{tJ,Jt}(\mathbf{q}, \omega) = & \frac{2}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t^2 J^2 \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \times \\ & \times (4\gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_2} \gamma_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2} - \gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_1} - 4\gamma_{\mathbf{k}_2} \gamma_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2} + \gamma_{\mathbf{k}_1} - \\ & - 4\gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_2} \gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_1} + \gamma_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2} + 4\gamma_{\mathbf{k}_2} \gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_1} - \gamma_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}) \times \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega' d\omega_1 d\omega_2}{\omega'(\omega - \omega' + i\eta)} B_{\mathbf{q}-\mathbf{k}_1}(\omega_1) \times \\ & \times B_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}(\omega_2) \left(\frac{1}{4} C_{\mathbf{k}_2}(\omega' - \omega_1 - \omega_2) + A_{\mathbf{k}_2}(\omega' - \omega_1 - \omega_2) \right) \times \\ & \times ((1 + n(\omega_1))(1 - n(\omega_2))(1 - N(\omega' - \omega_1 - \omega_2)) - \\ & - n(\omega_1)n(\omega_2)N(\omega' - \omega_1 - \omega_2)). \end{aligned} \quad (50)$$

Таким образом, мы получили выражение для массового оператора (44), где функция $\Psi(\mathbf{q}, \omega)$ определяется суммой вкладов (45), (47)–(50), а выражение для функции $m(\mathbf{q})$ приведено в приложении Б, формулы (Б.2). Действительная ($\text{Re } \Sigma(\mathbf{q}, \omega)$) и мнимая ($\text{Im } \Sigma(\mathbf{q}, \omega)$) части массового оператора связаны дисперсионным соотношением

$$\text{Re } \Sigma(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Im } \Sigma(\mathbf{q}, \omega')}{\omega' - \omega}. \quad (51)$$

Следовательно, достаточно вычислить только мнимую часть массового оператора. Подставляя массовый оператор в общее выражение для спиновой восприимчивости (27) и учитывая выражение (Б.9) для статической частоты $\omega_{\mathbf{q}}$ спиновых флуктуаций (26), мы сможем определить спектр спиновых флуктуаций (30) с учетом неупругих процессов их рассеяния на делокализованных дырках и локализованных спиновых возбуждениях.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Частотная зависимость спиновой восприимчивости может иметь весьма сложный характер, который определяется частотной зависимостью массового оператора $\Sigma(\mathbf{q}, \omega)$ в общей формуле (27). Рассмотрим выражение для спиновой восприимчивости в пределе низких частот, $\omega \rightarrow 0$. Действительная часть массового оператора является нечетной функцией частоты, и поэтому ее вкладом $\text{Re } \Sigma(\mathbf{q}, \omega) \propto \omega$ можно пренебречь, а мнимая часть является четной функцией и имеет конечный предел. В этом случае асимптотическое выражение для $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ может быть записано в виде

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{m(\mathbf{q})}{\omega_{\mathbf{q}}^2 - i\omega\Gamma(\mathbf{q})} = \chi_{\mathbf{q}} \frac{i\gamma(\mathbf{q})}{\omega + i\gamma(\mathbf{q})}, \quad (52)$$

где $\chi_{\mathbf{q}} = m(\mathbf{q})/\omega_{\mathbf{q}}^2$ и затухание

$$\Gamma(\mathbf{q}) = - \lim_{\omega \rightarrow 0} \text{Im } \Sigma(\mathbf{q}, \omega + i\eta), \quad \gamma(\mathbf{q}) = \frac{\omega_{\mathbf{q}}^2}{\Gamma(\mathbf{q})}. \quad (53)$$

Следовательно, в низкочастотном пределе следует ожидать релаксационного поведения спиновых флуктуаций с характерным затуханием $\gamma(\mathbf{q})$. В гидродинамическом пределе $\mathbf{q} \rightarrow 0$ функции $\omega_{\mathbf{q}}^2$ и $m(\mathbf{q})$ пропорциональны q^2 (см. (Б.9), (Б.2)), а затухание $\Gamma(\mathbf{q})$ имеет конечный предел. В этом пределе для спиновой восприимчивости получаем зависимость, характерную для диффузионной спиновой динамики:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \chi_0 \frac{iDq^2}{\omega + iDq^2}, \quad (54)$$

где $\chi_0 = \lim_{q \rightarrow 0} (m(\mathbf{q})/\omega_{\mathbf{q}}^2)$ и коэффициент спиновой диффузии определяется выражением $Dq^2 = \lim_{q \rightarrow 0} [\omega_{\mathbf{q}}^2/\Gamma(\mathbf{q})]$.

В области высоких частот, где определяемое мнимой частью массового оператора затухание может быть мало по сравнению с частотой спиновых флуктуаций, асимптотическое выражение для спиновой восприимчивости можно представить в виде

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{m(\mathbf{q})}{\omega_{\mathbf{q}}^2 + \Omega_{\mathbf{q}}^2 - \omega^2}, \quad (55)$$

где высокочастотная перенормировка частоты определяется выражением

$$\Omega_{\mathbf{q}}^2 = \lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega \operatorname{Re} \Sigma(\mathbf{q}, \omega).$$

В этом случае спиновые возбуждения могут носить характер распространяющихся квазичастиц. В частности, этот режим должен наблюдаться при отсутствии дырок в области низких температур, когда затухание спиновых волн в рамках модели Гейзенберга описывается взаимодействием локализованных спинов. Общий анализ спектра возбуждений в рамках анизотропной модели Гейзенберга был проведен в работе [9].

Зависимость спиновой восприимчивости от волнового вектора в основном определяется статической восприимчивостью (Б.12): $\chi_{\mathbf{q}} = m(\mathbf{q})/\omega_{\mathbf{q}}^2$. При малых q однородная статическая восприимчивость $\chi_{\mathbf{q}=0}$ конечна, поскольку в этом пределе, как отмечено выше, $m(\mathbf{q}) \propto q^2$ и $\omega^2(q \rightarrow 0) \propto q^2$. Если система находится вблизи антиферромагнитного состояния, то статическая восприимчивость $\chi(\mathbf{q} \sim \mathbf{Q}_{\text{AF}}) \rightarrow \infty$ вблизи антиферромагнитного волнового вектора $\mathbf{Q}_{\text{AF}} = (\pi, \pi)$, поскольку в этом пределе парамагнитная щель в спектре обращается в нуль и частота $\omega(\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}_{\text{AF}}) \rightarrow 0$. При конечной концентрации дырок (больше некоторой критической, см. [12]) спектр возбуждений (Б.9) имеет щель (в (Б.10) $A_t \propto (1-n)$), которая приводит к конечной величине статической восприимчивости, хотя максимум вблизи антиферромагнитного волнового вектора $\mathbf{q} \sim \mathbf{Q}_{\text{AF}}$ сохраняется.

Исследование спектра спиновых флуктуаций (30), определяемого мнимой частью спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$, при произвольных значениях волнового вектора $\mathbf{q}$ и частоты ω требует проведения численных расчетов массового оператора (44). Можно ожидать, что при малой концентрации дырок, $\delta = 1 - n \ll 1$, оба вклада в массовый оператор за счет локализованных спинов ($\propto \Psi_{JJ}(\mathbf{q}, \omega)$) и делокализованных дырок ($\propto \Psi_{tt}(\mathbf{q}, \omega)$) будут одного порядка. При большей концентрации дырок спиновые

флуктуации в основном определяются подсистемой дырок, и поведение спиновой восприимчивости носит релаксационный характер (52). Анализ спектра спиновых флуктуаций при учете только вклада делокализованных дырок ($\propto \Psi_{tt}(\mathbf{q}, \omega)$) был проведен в работе [16]. В общем случае при увеличении концентрации дырок должен наблюдаться переход от спиновой динамики локализованных спинов к динамике, характерной для зонных электронов. Изучение температурной и концентрационной зависимости спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ при различных значениях волнового вектора $\mathbf{q}$ и частоты ω будет проведено в следующей работе на основе численных расчетов.

ПРИЛОЖЕНИЕ А ВЫЧИСЛЕНИЕ ОПЕРАТОРА СИЛЫ

Используя перестановочные соотношения (34), вычислим коммутатор оператора тока (38)–(40) с гамильтонианом (35) и получим следующее выражение для оператора силы:

$$F_j = i\dot{J}_j = [(J_j^t + J_j^J), (H_t + H_J)] = F_j^{tt} + F_j^{tJ} + F_j^{Jt} + F_j^{JJ}, \quad (\text{A.1})$$

где отдельные вклады определяются соотношениями

$$F_i^{tt} = [J_i^t, H_t] = \sum_{abc} t_{ia} t_{bc} (f_{iabc}^{tt} - f_{aibc}^{tt}), \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} f_{iabc}^{tt} &= \delta_{ab} (X_i^{+0} (X_a^{00} + X_a^{--}) X_c^{0-} + X_i^{+0} X_a^{+-} X_c^{0+}) - \\ &\quad - \delta_{ic} (X_b^{+0} (X_i^{00} + X_i^{++}) X_a^{0-} + X_b^{-0} X_i^{+-} X_a^{0-}); \\ F_i^{Jt} &= [J_i^J, H_t] = -\frac{1}{2} \sum_{abc} J_{ia} t_{bc} (f_{iabc}^{Jt} - f_{aibc}^{Jt}), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} f_{iabc}^{Jt} &= \delta_{ab} (X_i^{++} - X_i^{--}) X_a^{+0} X_c^{0-} + \delta_{ib} (X_i^{+0} X_a^{+-} X_c^{0+} - X_i^{-0} X_a^{+-} X_c^{0-}) - \\ &\quad - \delta_{ac} X_b^{+0} (X_i^{++} - X_i^{--}) X_a^{0-} - \delta_{ic} (X_b^{+0} X_i^{0+} - X_b^{-0} X_i^{0-}) X_a^{+-}; \\ F_i^{tJ} &= [J_i^t, H_J] = -\frac{1}{4} \sum_{abc} t_{ia} J_{bc} (f_{iabc}^{tJ} - f_{aibc}^{tJ}), \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} f_{iabc}^{tJ} &= \delta_{ab} (X_i^{+0} X_a^{0+} X_c^{+-} - X_i^{+0} X_a^{0-} X_c^{++}) + \delta_{ib} (X_b^{+0} X_a^{0-} X_c^{--} - X_b^{-0} X_a^{0-} X_c^{+-}) + \\ &\quad + \delta_{ac} (X_b^{+-} X_i^{+0} X_a^{0+} - X_b^{++} X_i^{+0} X_a^{0-}) + \delta_{ic} (X_b^{--} X_c^{+0} X_a^{0-} - X_b^{+-} X_c^{-0} X_a^{0-}); \\ F_i^{JJ} &= [J_i^J, H_J] = \frac{1}{8} \sum_{abc} J_{ia} J_{bc} (f_{iabc}^{JJ} - f_{aibc}^{JJ}), \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} f_{iabc}^{JJ} &= \delta_{ab} (X_i^{++} - X_i^{--}) (X_a^{++} - X_a^{--}) X_c^{+-} + \\ &\quad + 2\delta_{ib} (X_b^{+-} X_a^{+-} X_c^{--} - X_b^{--} X_a^{+-} X_c^{+-}) + \\ &\quad + \delta_{ac} X_b^{+-} (X_i^{++} - X_i^{--}) (X_a^{++} - X_a^{--}) + \\ &\quad + 2\delta_{ic} (X_b^{--} X_c^{+-} X_a^{+-} - X_b^{+-} X_c^{--} X_a^{+-}) - \\ &\quad - \delta_{ab} (X_i^{++} - X_i^{--}) X_a^{+-} (X_c^{++} - X_c^{--}) - \\ &\quad - \delta_{ac} (X_b^{++} - X_b^{--}) (X_i^{++} - X_i^{--}) X_c^{+-}. \end{aligned}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ Б ВЫЧИСЛЕНИЕ СТАТИЧЕСКОЙ СПИНОВОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

Получим приближенное выражение для статической спиновой восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}}$, для чего воспользуемся следующим тождеством:

$$\langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle = (-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-). \quad (\text{Б.1})$$

Рассчитаем левую часть (Б.1), используя коммутационные соотношения для операторов Хаббарда:

$$m(\mathbf{q}) = \langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle = 8t(1 - \gamma_{\mathbf{q}})F_{10} + 8t'(1 - \gamma'_{\mathbf{q}})F_{11} - 8J(1 - \gamma_{\mathbf{q}})C_{10}, \quad (\text{Б.2})$$

где введены обозначения

$$F_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \cos \mathbf{qR}_{ij} F_{\mathbf{q}}, \quad F_{\mathbf{q}} = \langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma 0} X_{-\mathbf{q}}^{0\sigma} \rangle, \quad (\text{Б.3a})$$

$$C_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \cos \mathbf{qR}_{ij} C_{\mathbf{q}}, \quad C_{\mathbf{q}} = \langle S_{\mathbf{q}}^+ S_{-\mathbf{q}}^- \rangle. \quad (\text{Б.3б})$$

Для расчета корреляционной функции в правой части (Б.1) воспользуемся схемой расщепления, которая в сущности эквивалентна приближению взаимодействующих мод для одновременной корреляционной функции. Поскольку расщепления удобнее делать в узельном представлении, мы перепишем правую часть (Б.1) в виде

$$(-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-) = \sum_{\mathbf{R}_{il}} e^{-i\mathbf{qR}_{il}} (-\ddot{S}_i^+, S_l^-), \quad (\text{Б.4})$$

где вторая производная динамической переменной S_i^+ записывается как (ср. с [17])

$$\begin{aligned} -\ddot{S}_i^+ &= \sum_{j,n} t_{ij} \{ t_{jn} [H_{ijn}^- + H_{nji}^+] - t_{in} [H_{jin}^- + H_{nij}^+] \} + \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{j,n} J_{ij} \{ J_{jn} [2P_{ijn} + \Pi_{ijn}] - J_{in} [2P_{jin} + \Pi_{jin}] \} \end{aligned} \quad (\text{Б.5})$$

со следующими обозначениями:

$$\begin{aligned} H_{ijn}^{\sigma} &= X_i^{\sigma 0} X_j^{+ -} X_n^{0\sigma} + X_i^{+ 0} (X_j^{00} + X_j^{\sigma\sigma}) X_n^{0-}, \\ P_{ijn} &= S_i^z S_j^z S_n^+ + S_n^+ S_i^z S_j^z - S_i^z S_j^+ S_n^z - S_n^z S_i^z S_j^+, \\ \Pi_{ijn} &= S_j^- S_i^+ S_n^+ + S_n^+ S_j^- S_i^+ - S_j^+ S_i^+ S_n^- - S_n^- S_j^+ S_i^+. \end{aligned} \quad (\text{Б.6})$$

В (Б.5) мы учли только диагональные вклады, соответствующие членам F_i^{tt} и F_i^{JJ} в операторе силы (А.1), и опустили смешанные вклады, соответствующие F_j^{tJ} и F_j^{Jt} . В приближении среднего поля, основанном на расщеплении (Б.7), приведенном ниже, смешанный вклад типа (F_i^{tJ}, S_l^-) в корреляционной функции (Б.4)

оказывается пропорциональным корреляционным функциям более высокого порядка типа $(X_i^{+0} X_j^{0-}, S_l^-)$ и может быть опущен. Смешанный вклад типа (F_i^{Jt}, S_l^-) в корреляционной функции (Б.4) в этом же приближении пропорционален разностям корреляционных функций вида $\langle X_i^{++} - X_i^{--} \rangle$ или $\langle X_i^{0-} X_j^{0-} - X_i^{0+} X_j^{0+} \rangle$, которые в парамагнитной фазе равны нулю. Поэтому смешанные члены в (Б.5) не рассматриваются.

Заметим, что в произведениях (Б.5) только два узельных индекса могут совпадать: $n = i$ в первых членах в фигурных скобках в (Б.5) или $n = j$ во вторых членах в фигурных скобках в (Б.5). На первом шаге выделим из суммы все такие произведения операторов Хаббарда с совпадающими узлами и, используя правило умножения, редуцируем число операторов в таких произведениях. Например, оператор $H_{ij,n=i}^\sigma$ при этом примет вид

$$H_{iji}^\sigma = X_j^{+-} X_i^{\sigma\sigma} + (X_j^{00} + X_j^{\sigma\sigma}) X_i^{+-}.$$

В оставшихся произведениях с несовпадающими узлами операторы можно переставлять, что приведет к упрощению операторов P_{ijn} и Π_{ijn} в (Б.5), например,

$$P_{ij,n \neq i} = 2(S_i^z S_j^z S_n^+ - S_i^z S_j^+ S_n^z), \quad \Pi_{ij,n \neq i} = 2(S_j^- S_i^+ S_n^+ - S_j^+ S_i^+ S_n^-).$$

Далее, подставив полученные выражения в правую часть (Б.4), вычислим соответствующие многоузельные корреляционные функции в приближении среднего поля, которое соответствует расщеплению статических корреляционных функций следующего типа:

$$\begin{aligned} (X_i^{+0} X_j^{0+} S_n^+, S_l^-) &\simeq \lambda \langle X_i^{+0} X_j^{0+} \rangle (S_n^+, S_l^-), \\ (S_i^+ S_j^- S_n^+, S_l^-) &\simeq \alpha_1 \langle S_n^+ S_j^- \rangle (S_i^+, S_l^-) + \alpha_2 \langle S_i^+ S_j^- \rangle (S_n^+, S_l^-). \end{aligned} \quad (\text{Б.7})$$

Здесь, как это описано в работе [12], введены множители, учитывающие приближенный характер расщепления с помощью перенормировки соответствующих вершин: λ учитывает перенормировку спин-дырочного взаимодействия, а α_1 и α_2 – перенормировку вершин для спиновых корреляционных функций ближайших соседей и следующих за ближайшими соседями, соответственно. В данной схеме никогда не расщепляются операторы с совпадающими узлами и, следовательно, локальные корреляции сохраняются при расщеплении. Определение этих множителей должно проводиться при численном расчете статической восприимчивости, исходя из правил сумм, как это описано в работе [14].

В результате приближенного вычисления многочастичных корреляционных функций мы можем записать исходное уравнение (Б.4) в виде

$$(-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-) \simeq \omega_{\mathbf{q}}^2 (S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-) = \omega_{\mathbf{q}}^2 \chi_{\mathbf{q}}, \quad (\text{Б.8})$$

где частота спиновых флуктуаций в приближении среднего поля определяется уравнением

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = A_t + A_J. \quad (\text{Б.9})$$

Вклад, обусловленный кинетической энергией дырок при учете перескоков только для ближайших соседей $\propto t$, имеет вид

$$A_t = 8t^2 \lambda (1 - \gamma_{\mathbf{q}}) (1 - n - F_{02} - 2F_{11}). \quad (\text{Б.10})$$

Для вклада от обменного взаимодействия спинов J получим выражение

$$A_J = 4J^2(1 - \gamma_{\mathbf{q}}) \left(\lambda \frac{n}{2} + \alpha_2(2C_{11} + C_{02}) - \alpha_1 C_{01}(4\gamma_{\mathbf{q}} + 1) \right). \quad (\text{Б.11})$$

Окончательно статическую восприимчивость представим в виде

$$\chi_{\mathbf{q}} = \frac{\langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{\mathbf{q}}^-] \rangle}{\omega_{\mathbf{q}}^2} = \frac{m(\mathbf{q})}{\omega_{\mathbf{q}}^2}. \quad (\text{Б.12})$$

Это выражение согласуется с результатами работы [12]. При учете перескоков для вторых соседей $\propto t'$ получим выражение, приведенное в работе [10], где, однако, при расцеплении (Б.7) не были введены параметры, учитывающие перенормировку вершин.

Список литературы

- [1] *E. Manousakis.* Rev. Mod. Phys. 1991. V. 63. P. 1.
- [2] *A. P. Kampf.* Phys. Rep. 1994. V. 249. P. 219; *M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, G. Shirane, Y. Endoh.* Rev. Mod. Phys. 1998. V. 70. P. 897.
- [3] *T. Tanamoto, H. Kohno, H. Fukuyama.* J. Phys. Soc. Japan. 1994. V. 63. P. 2379; *G. Stemman, C. Pepin, M. Lavagna.* Phys. Rev. B. 1994. V. 50. P. 4075.
- [4] *P. Hedegard, M. B. Pedersen.* Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 11504; *C. L. Kane, P. A. Lee, T. K. Ng, B. Chakraborty, N. Read.* Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 2653; *A. Auerbach, B. E. Larson.* Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 7800.
- [5] *Yu. A. Izumov, B. M. Letfulov.* J. Phys.: Condens. Matter. 1990. V. 2. P. 8905; *Yu. A. Izumov, J. A. Hedersen.* Int. J. Mod. Phys. B. 1994. V. 8. P. 1877; *F. Onufrieva, J. Rossat-Mignod.* Phys. Rev. B. 1995. V. 52. P. 7572.
- [6] *E. Dagotto.* Rev. Mod. Phys. 1994. V. 66. P. 763; *J. Jaklić, P. Prelovšek.* Adv. Phys. 2000. V. 49. P. 1; *R. Eder, Y. Ohta, S. Maekawa.* Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. P. 5124.
- [7] *N. M. Plakida.* Phys. Lett. A. 1973. V. 43. P. 481.
- [8] *Ю. А. Церковников.* ТМФ. 1981. Т. 49. С. 219.
- [9] *Ю. А. Церковников.* ТМФ. 1982. Т. 52. С. 147.
- [10] *Г. Джакелли, Н. М. Плакида.* ТМФ. 1998. Т. 114. С. 335.
- [11] *A. Sherman, M. Schreiber.* Incommensurate spin dynamics in underdoped cuprate perovskites. cond-mat/0501418.
- [12] *S. Winterfeldt, D. Ihle.* Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 9402.
- [13] *J. Kondo, K. Yamaji.* Progr. Theor. Phys. 1972. V. 47. P. 807; *H. Shimahara, S. Takada.* J. Phys. Soc. Japan. 1992. V. 61. P. 989.
- [14] *S. Winterfeldt, D. Ihle.* Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 6010.
- [15] *Д. Н. Зубарев.* УФН. 1960. Т. 71. С. 71.
- [16] *I. Sega, P. Prelovšek, J. Bonča.* Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 054524.
- [17] *Д. Форстер.* Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции. М.: Атомиздат, 1980.
- [18] *H. Mori.* Progr. Theor. Phys. 1965. V. 33. P. 423; 1965. V. 343. P. 399.
- [19] *В. П. Калашиников.* ТМФ. 1978. Т. 34. С. 412.
- [20] *В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, С. А. Пикин.* ЖЭТФ. 1967. Т. 53. С. 281; С. 1089.
- [21] *P. W. Anderson.* Science. 1987. V. 235. P. 1196.
- [22] *J. Hubbard.* Proc. Roy. Soc. A. 1965. V. 285. P. 542.
- [23] *F. C. Zhang, T. M. Rice.* Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 3759; *L. F. Feiner, J. H. Jefferson, R. Raimondi.* Phys. Rev. B. 1996. V. 53. P. 8751; *V. Yu. Yushankhai, V. S. Oudovenko, R. Hayn.* Phys. Rev. B. 1997. V. 55. P. 15562.

Поступила в редакцию 24.III.2005 г.