Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Владимиров, Д. Иле, Н. М. Плакида, Статическая
спиновая восприимчивость в $(t-J)$ -модели, *ТМФ*, 2007,
том 152, номер 3, 538–550

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6109>

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: 35.173.219.12

26 апреля 2023 г., 16:10:41

© 2007 г. А. А. Владимиров*, Д. Иле[†], Н. М. Плакида*

СТАТИЧЕСКАЯ СПИНОВАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ В $(t-J)$ -МОДЕЛИ

Вычислена статическая спиновая восприимчивость и корреляционные функции в двумерной $(t-J)$ -модели на основе метода уравнений движения для функции релаксации, выраженной через операторы Хаббарда. Показано, что при нулевой температуре в решетке существует дальний антиферромагнитный порядок для концентрации дырок $\delta < \delta_c \simeq 0.018$. Вычисленные зависимости спиновой восприимчивости и корреляционной длины от температуры и концентрации дырок качественно согласуются с экспериментом.

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

1. ВВЕДЕНИЕ

Исходные, нелегированные, образцы медно-оксидных высокотемпературных сверхпроводников являются антиферромагнитными изоляторами, спиновая динамика которых хорошо описывается в рамках квазидвумерной модели Гейзенберга [1]. В то же время аномальные свойства легированных образцов, в частности, наличие максимума у функции, задающей зависимость однородной спиновой восприимчивости от температуры и легирования, требует дальнейшего изучения. Одной из базисных моделей, предложенных для описания высокотемпературных сверхпроводников, является $(t-J)$ -модель для плоскости CuO_2 сверхпроводящих купратов. Эта 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.

Изучению спиновой динамики в рамках $(t-J)$ -модели посвящено много работ (см., например, [2]–[4] и цитированную там литературу). В частности, для исследования

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл., Россия.
E-mail: plakida@theor.jinr.ru

[†]Institute for Theoretical Physics, Leipzig University, Leipzig, Germany

конечных кластеров используются численные методы [5]–[7]. В работе [4] нами был развит общий метод вычисления динамической спиновой восприимчивости, основанный на методе проектирования типа метода Мори для термодинамических функций Грина [8]. В настоящей работе приведены результаты численных расчетов статической спиновой восприимчивости для $(t-J)$ -модели в рамках этой теории. В отличие от работ [2], [3] нами получены более общие аналитические выражения, справедливые во всей области температур и для любой концентрации легированных дырок. Полученные нами результаты в отсутствие легирования совпадают с результатами для модели Гейзенберга [9], но приводят к более быстрому подавлению антиферромагнитных корреляций с легированием по сравнению с результатами работы [5].

В следующем разделе мы приводим основные определения и соотношения, которые используются при вычислении статической спиновой восприимчивости в $(t-J)$ -модели. Далее следуют результаты наших численных вычислений, обсуждение и сравнение с результатами других авторов.

2. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Рассмотрим $(t-J)$ -модель в терминах операторов Хаббарда:

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

Операторы Хаббарда [10] задаются матрицами $X_i^{\alpha\beta} = |i, \alpha\rangle\langle i, \beta|$ 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 $\sigma/2$ ($\sigma = \pm 1$, $\bar{\sigma} = -\sigma$). Индексы i и j соответствуют узлам двумерной квадратной решетки. Мы будем учитывать интегралы перескока $t_{ij} = t$ и обменное взаимодействие $J_{ij} = J$ только для ближайших соседей i, j . Параметры t и J можно считать независимыми параметрами модели. Мы также ввели химический потенциал μ , который определяется из уравнения для средней плотности электронов

$$n = \langle n_i \rangle = \sum_{\sigma} \langle X_i^{\sigma\sigma} \rangle = 1 - \delta, \quad (2)$$

где $\delta = \langle X_i^{00} \rangle$ – концентрация дырок. В работе [4] нами было получено общее выражение для динамической спиновой восприимчивости:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega} = -\frac{m(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - \omega \Sigma(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (3)$$

где $\langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega}$ – термодинамическая функция Грина [8] от фурье-компонент оператора спина $S_i^{\sigma} = X_i^{\sigma\bar{\sigma}}$. В (3) введены следующие обозначения: $m(\mathbf{q}) = \langle\langle i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^- \rangle\rangle$, $\omega_{\mathbf{q}}^2 = m(\mathbf{q})/\chi_{\mathbf{q}}$ – частота спиновых флуктуаций, $\chi_{\mathbf{q}} = \chi(\mathbf{q}, 0)$ – статическая спиновая восприимчивость. Массовый оператор $\Sigma(\mathbf{q}, \omega)$ был вычислен в работе [4] в виде многочастичной функции Грина. Определение статической спиновой восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}}$ или частоты $\omega_{\mathbf{q}}$ является необходимым шагом при расчете динамической восприимчивости.

В дальнейшем мы будем использовать скалярное произведение Кубо–Мори [11]

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

а также некоторые соотношения для него:

$$(i\dot{A}, B) = (A, -i\dot{B}) = \langle [A, B] \rangle, \quad (5)$$

$$(A, B) = -\langle \langle A | B \rangle \rangle_{\omega=0}, \quad (6)$$

где $i\dot{A} = i dA/dt = [A, H]$. Используя эти определения, запишем статическую восприимчивость в виде

$$\chi_{\mathbf{q}} \equiv -\langle \langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle \rangle_{\omega=0} = (S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-). \quad (7)$$

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

3. СТАТИЧЕСКАЯ СПИНОВАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ

Получим приближенное выражение для статической спиновой восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}} = (S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-)$, для чего воспользуемся формализмом функции релаксации и, в частности, следующим тождеством:

$$\langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle = (-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-). \quad (8)$$

Оператор тока $J_j = i\dot{S}_j^+$ в координатном представлении может быть записан как сумма двух членов:

$$J_j = J_j^t + J_j^J = [S_j^+, H_t] + [S_j^+, H_J]. \quad (9)$$

В этом выражении первый член содержит вклад от кинетической энергии дырок, пропорциональный интегралу перескока,

$$J_j^t = -\sum_m t_{jm} (X_j^{+0} X_m^{0-} - X_m^{+0} X_j^{0-}); \quad (10)$$

второй член обусловлен обменным взаимодействием локализованных спинов,

$$J_j^J = \sum_m J_{jm} (S_j^z S_m^+ - S_m^z S_j^+). \quad (11)$$

В результате для оператора силы получаем представление

$$F_j = -\ddot{S}_j^+ = i\dot{J}_j = [(J_j^t + J_j^J), (H_t + H_J)] = F_j^{tt} + F_j^{tJ} + F_j^{Jt} + F_j^{JJ}. \quad (12)$$

Рассчитаем левую часть (8), используя коммутационные соотношения для операторов Хаббарда:

$$m(\mathbf{q}) = \langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle = 8t(1 - \gamma_{\mathbf{q}})F_{10} - 8J(1 - \gamma_{\mathbf{q}})C_{10}, \quad (13)$$

где $\gamma_{\mathbf{q}} = (\cos q_x + \cos q_y)/2$ и введены корреляционные функции

$$F_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{q}} \cos \mathbf{q} \mathbf{R}_{ij}, \quad F_{\mathbf{q}} = \langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma 0} X_{-\mathbf{q}}^{0\sigma} \rangle, \quad (14)$$

$$C_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} \cos \mathbf{q} \mathbf{R}_{ij}, \quad C_{\mathbf{q}} = \langle S_{\mathbf{q}}^+ S_{-\mathbf{q}}^- \rangle. \quad (15)$$

Для расчета корреляционной функции в правой части (8) мы воспользуемся схемой расщепления, которая эквивалентна приближению взаимодействующих мод для од-
новременной корреляционной функции. Поскольку расщепления удобнее делать в
узельном представлении, мы перепишем правую часть (8) в виде

$$(-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-) = \sum_{\mathbf{R}_{il}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{il}} (-\ddot{S}_i^+, S_l^-), \quad (16)$$

где вторая производная динамической переменной S_i^+ записывается как (ср. с [12])

$$\begin{aligned} -\ddot{S}_i^+ = & \sum_{j,n} t_{ij} \{t_{jn} [H_{ijn}^- + H_{nji}^+] - t_{in} [H_{jin}^- + H_{njl}^+]\} + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{j,n} J_{ij} \{J_{jn} [2P_{ijn} + \Pi_{ijn}] - J_{in} [2P_{jin} + \Pi_{jin}]\} \end{aligned} \quad (17)$$

и введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} H_{ijn}^{\sigma} &= X_i^{\sigma 0} X_j^{+ -} X_n^{0\sigma} + X_i^{+ 0} (X_j^{00} + X_j^{\sigma\sigma}) X_n^{0-}, \\ P_{ijn} &= S_i^z S_j^z S_n^+ + S_n^+ S_i^z S_j^z - S_i^z S_j^+ S_n^z - S_n^z S_i^z S_j^+, \\ \Pi_{ijn} &= S_j^- S_i^+ S_n^+ + S_n^+ S_j^- S_i^+ - S_j^+ S_i^+ S_n^- - S_n^- S_j^+ S_i^+. \end{aligned} \quad (18)$$

В (17) мы учли только диагональные вклады, соответствующие членам F_i^{tt} и F_i^{JJ} в операторе силы (12), и опустили смешанные вклады, соответствующие F_j^{tJ} и F_j^{Jt} . В приближении среднего поля, основанного на расщеплении (19), приведенном ниже, смешанный вклад типа (F_i^{tJ}, S_l^-) в корреляционной функции (16) 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 (16) 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 (17) не рассматриваются.

Заметим, что в произведениях (17) только два узельных индекса могут совпадать: $n = i$ в первых членах в фигурных скобках в (17) или $n = j$ во вторых членах в фигурных скобках в (17). 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 (17), 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 (16), вычислим соответствующие многоузельные корреляционные функции в приближении среднего поля, которое соответствует расщеплению статических корреляционных функций следующего типа:

$$\begin{aligned} (X_i^{+0} X_j^{+0} S_n^+, S_l^-) &\simeq \lambda \langle X_i^{+0} X_j^{+0} \rangle (S_n^+, S_l^-), \\ (S_i^+ S_j^- S_n^+, S_l^-) &\simeq \alpha_1 \langle S_n^+ S_j^- \rangle (S_i^+, S_l^-) + \alpha_2 \langle S_i^+ S_j^- \rangle (S_n^+, S_l^-). \end{aligned} \quad (19)$$

В данной схеме никогда не расщепляются операторы с совпадающими узлами, следовательно, локальные корреляции сохраняются при расщеплении. Здесь аналогично работе [2] 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. Определение этих множителей должно проводиться при численном расчете статической восприимчивости на основании правил сумм, как это описано в [2].

В результате приближенного вычисления многочастичных корреляционных функций мы можем записать исходное уравнение (16) в виде

$$(-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-) = \omega_{\mathbf{q}}^2 (S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-) = \omega_{\mathbf{q}}^2 \chi_{\mathbf{q}}, \quad (20)$$

где энергия спиновых флуктуаций в приближении среднего поля определяется выражением

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = A_t(\mathbf{q}) + A_J(\mathbf{q}). \quad (21)$$

Вклад, обусловленный кинетической энергией дырок, имеет вид

$$A_t(\mathbf{q}) = 8t^2 \lambda (1 - \gamma_{\mathbf{q}})(1 - n - F_{02} - 2F_{11}). \quad (22)$$

Для вклада от обменного взаимодействия спинов J получим выражение

$$A_J(\mathbf{q}) = 4J^2 (1 - \gamma_{\mathbf{q}}) \left[\lambda \frac{n}{2} + \alpha_2 (2C_{11} + C_{02}) - \alpha_1 C_{01} (4\gamma_{\mathbf{q}} + 1) \right]. \quad (23)$$

Окончательно статическую восприимчивость представим в виде

$$\chi_{\mathbf{q}} = \frac{\langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{\mathbf{q}}^-] \rangle}{\omega_{\mathbf{q}}^2} = \frac{m(\mathbf{q})}{\omega_{\mathbf{q}}^2}. \quad (24)$$

Антиферромагнитная корреляционная длина ξ может быть вычислена путем разложения спиновой восприимчивости в окрестности антиферромагнитного волнового вектора $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ [9]:

$$\chi_{\mathbf{Q}+\mathbf{k}} = \frac{\chi_{\mathbf{Q}}}{1 + \xi^2 k^2}, \quad (25)$$

где для ξ^2 получим выражение

$$\xi^2 = \frac{8J^2\alpha_1|C_{01}|}{\omega_{\mathbf{Q}}^2}. \quad (26)$$

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Вычислим спектр спиновых флуктуаций в приближении среднего поля (21)–(23). При выводе системы уравнений для определения $\omega_{\mathbf{q}}$ необходимы выражения для электронных и спиновых корреляционных функций. Электронные корреляционные функции в (22) вычисляются в квазичастичном приближении для функции Грина:

$$G(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle X_{\mathbf{q}}^{0\sigma} | X_{\mathbf{q}}^{\sigma 0} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{Q}{\omega - (E_{\mathbf{q}} - \mu)}, \quad F_{\mathbf{q}} = \frac{Q}{e^{(E_{\mathbf{q}} - \mu)/T} + 1}, \quad (27)$$

где $Q = 1 - n/2$. Химический потенциал μ определяется уравнением для концентрации электронов:

$$n = 1 - \delta = \sum_{\sigma} \langle X_i^{\sigma\sigma} \rangle = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{q}}. \quad (28)$$

Мы используем электронную дисперсию в приближении Хаббард I:

$$E_{\mathbf{q}} = -4\tilde{t}\gamma(\mathbf{q}), \quad \tilde{t} = Qt. \quad (29)$$

Спиновые корреляционные функции в (15) вычислены с использованием выражения $\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) = -m(\mathbf{q})/(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2)$ для динамической спиновой восприимчивости (3) с равным нулю массовым оператором, мы имеем

$$C_{\mathbf{q}} = \frac{m(\mathbf{q})}{2\omega_{\mathbf{q}}} \operatorname{cth} \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2T}. \quad (30)$$

Спиновые корреляционные функции в (23) даются выражением

$$C_{\mathbf{R}} = C \cos \mathbf{Q}\mathbf{R} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} C_{\mathbf{q}} \cos \mathbf{q}\mathbf{R}. \quad (31)$$

Параметр $C = C_{\mathbf{Q}}/N$, где $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ – антиферромагнитный волновой вектор, появляется в случае наличия дальнего порядка, когда антиферромагнитная намагниченность не равна нулю при нулевой температуре, и при малой концентрации дырок $\delta < \delta_c$. Этот параметр определяет намагниченность подрешеток $|m|$ следующим образом:

$$m^2 = \frac{1}{N} \langle \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \mathbf{S}_{-\mathbf{Q}} \rangle = \frac{3}{2} C. \quad (32)$$

Система уравнений (21)–(23), (30), (31) должна быть решена самосогласованно путем подбора подгоночных параметров α_1 , α_2 и λ в (21)–(23). Для определения этих параметров требуются три дополнительных уравнения. В качестве одного из них мы будем использовать правило сумм

$$C_{0,0} = C + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} C_{\mathbf{q}} = 2 \langle S_i^z S_i^z \rangle = \frac{1}{2} \langle (1 - X_i^{00}) \rangle = \frac{1 - \delta}{2}. \quad (33)$$

В случае наличия дальнего порядка для определения параметра C используется условие обращения в нуль частоты спиновых флуктуаций для антиферромагнитного волнового вектора $\mathbf{Q}$:

$$\omega_{\mathbf{Q}} = 0. \quad (34)$$

Максимальное значение легирования, при котором это уравнение имеет решение, является критическим значением δ_c . Оставшиеся два уравнения могут быть выбраны из различных физических соображений. Мы рассмотрим несколько возможных случаев. Все численные результаты получены для параметров модели $J = 0.4t$, где далее все энергии вычисляются в единицах t . Спиновая восприимчивость взята в виде безразмерной величины $\chi_{\mathbf{Q}}J/2 = (S_{\mathbf{Q}}^z, S_{-\mathbf{Q}}^z)J$.

1. Случай нулевой температуры при $\delta = 0$, когда имеется ненулевая намагниченность $m = m_0 \neq 0$. Вклад (22), обусловленный движением дырок, отсутствует, и поэтому параметр λ не требует определения. Используя правило сумм (33) и значение намагниченности (32) $m_0 = 0.3$ [9] в качестве дополнительного уравнения для определения параметров, получаем следующие значения α_1, α_2 :

$$\alpha_1 = 2.285, \quad \alpha_2 = 2.548, \quad \frac{\alpha_1 - 1}{\alpha_2 - 1} = 0.830. \quad (35)$$

При этом $C_{10} = -0.232$. Если вместо значения намагниченности в качестве дополнительного уравнения для определения параметров использовать значение корреляционной функции $C_{10} = -0.223$ (рассчитанное методом Монте-Карло), то получим значение намагниченности $m_0 = 0.254$, как и в работе [9]. Зависимость статической спиновой восприимчивости от волнового вектора для нулевой температуры и нулевой концентрации дырок приведена на рис. 1.

2. Случай нулевой температуры и малого легирования, $\delta < \delta_c$, когда наблюдается дальний порядок, $C \neq 0$, и намагниченность $m = m(\delta) \neq 0$. В этом случае необходимо ввести четыре уравнения для определения трех параметров $\alpha_1, \alpha_2, \lambda$ и расчета намагниченности $m(\delta)$. Если мы возьмем параметры α_1, α_2 равными значениям, полученным в случае нулевой концентрации дырок (35), то правила сумм (33) и условие (34) будут достаточны для определения двух параметров λ и $m(\delta)$. Самосогласованное решение может быть получено только при легировании ниже критического значения $\delta_c = 0.0175$, как показано на рис. 2 для параметра дальнего порядка – намагниченности $m(\delta)$. Отметим, что полученное значение δ_c сравнимо с экспериментальной величиной $\delta_c \simeq 0.02$ для $\text{La}_{2-\delta}\text{Sr}_\delta\text{CuO}_4$ [13].

3. Случай нулевой температуры и легирования выше критического, $\delta > \delta_c$, когда дальний порядок и намагниченность исчезают: $C = 0, m = 0$. В этом случае уравнение (34) можно не принимать во внимание. Правило сумм (33) остается единственным уравнением для определения параметра $\lambda(\delta)$. Результаты самосогласованных вычислений корреляционных функций C_{01}, C_{11}, C_{02} с помощью уравнений (30) с частотой (21) (сплошные линии) при тех же значениях параметров α_1, α_2 , что и в (35) при $\delta = 0$, вместе с результатами точной диагонализации [5] (точки) показаны на рис. 3. Зависимость статической спиновой восприимчивости от волнового вектора для нулевой температуры и $\delta = 0.125$ приведена на рис. 4.

Рис. 1. Зависимость статической спиновой восприимчивости от импульса для $\delta = 0$ при $T = 0$.

Рис. 2. Зависимость намагниченности $m(\delta)$ от легирования при $T = 0$.

Как видно, полученная нами зависимость корреляционных функций от концентрации дырок на рис. 3 обнаруживает более быстрое уменьшение корреляций, чем в работе [5]. Чтобы получить самосогласованное решение для корреляционных функций (30), совпадающих со значениями, приведенными в [5], необходимо значительно усилить вклад антиферромагнитных спиновых корреляций (или ослабить разрушающий их вклад от движения дырок) за счет физически неоправданного увеличения параметров α_1, α_2 ($\alpha_1 \sim 8$). Возможно, что приближение среднего поля (19) недостаточно аккуратно описывает вклад, обусловленный кинетической энергией дырок,

Рис. 3. Статические спиновые корреляционные функции при $T = 0$: сплошные линии – результат вычислений (случай 1–3), точки – результат точной диагонализации [5] для C_{10} и C_{11} .

Рис. 4. Зависимость статической спиновой восприимчивости от импульса при $T = 0$ и концентрации дырок $\delta = 0.125$.

для которого обычно используют представление спиновых операторов в виде произведения фермионов и приближение типа случайных фаз (см., например, [14]). Следует также отметить, что в кластерных расчетах может происходить усиление корреляционных эффектов за счет конечных размеров кластеров. Для учета этих эффектов необходимо провести расчеты в рамках развитой теории для конечной системы с периодическими граничными условиями, как это сделано в работе [15].

4. Случай конечных температур, $T > 0$. При ненулевой температуре дальний порядок отсутствует и, соответственно, $C = 0$ и $\omega_Q \neq 0$ при любом легировании. Для определения параметров мы считаем отношение $(\alpha_1 - 1)/(\alpha_2 - 1)$ (35) не зависящим от температуры, как и в работе [9]. При нулевой концентрации дырок параметр λ в уравнениях не появляется, и поэтому параметр α_1 можно определить из правила сумм (33). Далее мы считаем, что параметры α_1 , α_2 не зависят от легирования, и выбираем их равными значениям, полученным при $\delta = 0$. Тогда правило сумм (33) можно использовать для определения параметра λ , который зависит от температуры и концентрации дырок.

Рис. 5. Зависимость однородной статической спиновой восприимчивости от легирования.

На рис. 5 показана зависимость от легирования однородной спиновой восприимчивости $\chi(\delta, T) = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} m(\mathbf{q})/\omega_{\mathbf{q}}^2$ для различных значений температур. Восприимчивость имеет максимум при характерных значениях легирования $\delta_{\max}(T)$, которые приведены на рис. 6. Отметим, что подобный максимум не был получен в работе [3], где рассматривалась $(t-J)$ -модель при $t \ll J$. Зависимость положения максимума от температуры качественно согласуется с результатом точной диагонализации [6]. Однако значения $\delta_{\max}(T)$ (вычисленные нами при $J = 0.3t$, как в работе [6]) меньше, чем в [6], что указывает на более быстрое уменьшение корреляций с легированием, как на рис. 3. Температурная зависимость однородной статической спиновой восприимчивости приведена на рис. 7. Эта зависимость также имеет максимум, положение которого смещается в область низких температур с увеличением концентрации дырок, что качественно согласуется с результатом точной диагонализации [6]. Такое поведение восприимчивости объясняется уменьшением роли ближнего порядка с увеличением легирования.

На рис. 8 приведена зависимость обратной корреляционной длины ξ^{-1} (26) от температуры при различной концентрации дырок. Зависимость $\xi^{-1}(T)$ при $\delta = 0$

Рис. 6. Зависимость положения максимума на рис. 5 от температуры.

Рис. 7. Зависимость однородной спиновой восприимчивости от температуры для различных значений легирования.

согласуется с результатом, полученным для двумерной модели Гейзенберга [16]. Отметим, что при $T = 0$ и $\delta > \delta_c$ наша теория дает конечные значения корреляционной длины, в отличие от работы [14], где была получена расходимость $\xi(\delta, T)$ при $T = 0$ для всех δ . В целом зависимость $\xi(\delta, T)$ качественно соответствует экспериментальным данным, приведенным в [17], хотя полученные нами значения корреляционной длины в несколько раз меньше экспериментальных, и это коррелирует с результатами расчетов корреляционных функций, показанных на рис. 3.

Рис. 8. Зависимость обратной корреляционной длины от температуры для различных значений легирования.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы исследовали поведение статической спиновой восприимчивости в сильно коррелированных системах в рамках $(t-J)$ -модели. В предельном случае отсутствия легирования, соответствующем модели Гейзенберга, наши результаты совпадают с вычислениями, проведенными в работе [9], и согласуются с теорией [15]. В то же время зависимости спиновых корреляционных функций, спиновой восприимчивости и корреляционной длины от легирования при $T = 0$ обнаруживают более быстрое подавление антиферромагнитных корреляций с ростом концентрации дырок по сравнению с результатами точной диагонализации [5] и экспериментальными данными [17]. В работе [2] было получено более хорошее согласие с этими данными, что может быть связано с другой схемой вычислений, содержащей дополнительный подгоночный параметр для определения вклада дырок в статическую восприимчивость. Зависимости однородной спиновой восприимчивости от температуры и концентрации дырок имеют характерные максимумы, согласующиеся с экспериментами по измерению восприимчивости во внешнем магнитном поле [18]. Максимум зависимости $\chi(T)$ при увеличении концентрации дырок δ смещается в сторону меньших температур, что согласуется с результатами точной диагонализации [6].

Таким образом, нам удалось в рамках развитой теории описать основные свойства статической спиновой восприимчивости. Эти результаты будут использованы для изучения спиновой динамики в рамках теории [4].

Список литературы

- [1] E. Manousakis, *Rev. Modern Phys.*, **63** (1991), 1.
- [2] S. Winterfeldt, D. Ihle, *Phys. Rev. B*, **58** (1998), 9402.

- [3] H. Shimahara, *Phys. C*, **185–189** (1991), 1517; H. Shimahara, S. Takada, *J. Phys. Soc. Japan*, **61** (1992), 989.
- [4] А. А. Владимиров, Д. Иле, Н. М. Плакида, *ТМФ*, **145** (2005), 240.
- [5] J. Bonča, P. Prelovšek, I. Sega, *Europhys. Lett.*, **10** (1989), 87.
- [6] J. Jaklič, P. Prelovšek, *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996), 892.
- [7] E. Dagotto, *Rev. Modern Phys.*, **66** (1994), 763; J. Jaklič, P. Prelovšek, *Adv. Phys.*, **49** (2000), 1; R. Eder, Y. Ohta, S. Maekawa, *Phys. Rev. Lett.*, **74** (1995), 5124.
- [8] Д. Н. Зубарев, *УФН*, **71** (1960), 71.
- [9] H. Shimahara, S. Takada, *J. Phys. Soc. Japan*, **60** (1991), 2394.
- [10] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A*, **285** (1965), 542.
- [11] Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **49** (1981), 219; Д. Форстер, *Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции*, Атомиздат, М., 1980.
- [12] Г. Джакелли, Н. М. Плакида, *ТМФ*, **114** (1998), 426.
- [13] G. Shirane, R. J. Birgeneau, Y. Endoh, M. A. Kastner, *Phys. B*, **197** (1994), 158.
- [14] A. Yu. Zavidonov, D. Brinkmann, *Phys. Rev. B*, **58** (1998), 12486.
- [15] I. Juhasz Junger, D. Ihle, J. Richter, *Phys. Rev. B*, **72** (2005), 064454.
- [16] P. Hasenfratz, F. Niedermayer, *Phys. Lett. B*, **268** (1991), 231.
- [17] B. Keimer, N. Belk, R. J. Birgeneau, et al., *Phys. Rev. B*, **46** (1992), 14034.
- [18] D. C. Johnston, “Normal-state magnetic properties of single-layer cuprate high-temperature superconductors and related materials”, *Handbook of Magnetic Materials*, vol. 10, ed. K. H. J. Buschow, Elsevier, Amsterdam, 1997, 1.

Поступила в редакцию 27.11.2006