Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Г. Джакели, Н. М. Плакида, Динамическая спиновая восприимчивость в t - J -модели, *ТМФ*, 1998, том 114, номер 3, 426–438

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf850>

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: 18.207.199.55

26 апреля 2023 г., 17:48:18

© 1998 г.

Г. Джакели*, Н. М. Плакида†

ДИНАМИЧЕСКАЯ СПИНОВАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ В t - J -МОДЕЛИ

Динамическая спиновая восприимчивость вычисляется для t - J -модели в парамагнитной фазе на основе формализма функции памяти в терминах операторов Хаббарда. Получена самосогласованная система уравнений для функции памяти в рамках приближения взаимодействующих мод. Показано, что функция памяти содержит вклад как от дырочных возбуждений, так и от магнитных флуктуаций локализованных спинов. Спиновая динамика имеет диффузионный характер в гидродинамическом пределе, в то время как в высокочастотном пределе появляются парамагноны – возбуждения типа спиновых волн.

ВВЕДЕНИЕ

Исходные, недопированные образцы высокотемпературных сверхпроводников являются антиферромагнитными изоляторами, спиновая динамика которых хорошо описывается двумерной моделью Гейзенберга. В то же время природа аномальной спиновой динамики допированных образцов требует дальнейшего изучения [1].

Одной из базисных моделей, описывающих высокотемпературные сверхпроводники и содержащих в себе основную физику CuO_2 -плоскостей сверхпроводящих купратов, является t - J -модель. Последняя (или ее расширенная версия $t - t' - J$ -модель) представляет собой низкоэнергетическую эффективную модель, которая выводится из модели Хаббарда в пределе сильного кулоновского взаимодействия при исключении дважды занятых электронных состояний. В результате t - J -модель можно записать с помощью операторов Хаббарда, которые подчиняются более сложным коммутационным соотношениям по сравнению с ферми- и бозе-операторами. Последнее обстоятельство затрудняет использование хорошо развитых методов теории поля при изучении данной модели.

Для изучения спиновой динамики в рамках t - J -модели были использованы разные подходы, такие как метод вспомогательных бозонов [2, 3] или фермионов [4–6], диаграммная техника для операторов Хаббарда [7]. В методе вспомогательных полей локальное ограничение на число допустимых квантовых состояний в отдельном узле обычно заменяется глобальным, не зависящим от номера узла. Такая замена вносит неконтролируе-

*Тбилисский государственный университет, Тбилиси, Грузия; Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

†Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

мое приближение в данном подходе. В то же время при использовании операторов Хаббарда такой проблемы не возникает, поскольку локальное ограничение автоматически выполняется. Вместе с тем нестандартные перестановочные соотношения для этих операторов приводят к возникновению в уравнениях движения членов с кинематическим взаимодействием.

Недавно в работе [8] с помощью диаграммной техники для операторов Хаббарда была рассчитана спиновая восприимчивость в t - J -модели в рамках уравнения Ларкина [9]. Однако надо отметить, что в случае $J = 0$, который соответствует модели Хаббарда в пределе бесконечного U , вклад от неприводимой части в знаменатель уравнения Ларкина (см. уравнение (9) в работе [8]) исчезает, что указывает на неадекватный учет кинематического взаимодействия.

В настоящей работе изучается спиновая динамика в t - J -модели с помощью метода функции памяти в терминах операторов Хаббарда. Этот подход был недавно использован в работе [10] для исследования оптической проводимости в данной модели.

В рамках приближения взаимодействующих мод получена замкнутая система самосогласованных уравнений для динамической спиновой восприимчивости. Показано, что в выражении для функции памяти имеются два различных по природе вклада. Первый вклад возникает за счет кинематического взаимодействия в подсистеме коллективизированных дырок, а второй вклад — вследствие гейзенберговского обмена в системе локализованных спинов. Существование этих двух вкладов в явном виде означает наличие конкуренции между локализованным и зонным магнетизмом, что было отмечено в работах [7, 8] и наблюдалось экспериментально [11].

Использованный в данной работе подход позволяет в едином приближении описать как низко-, так и высокочастотные спиновые возбуждения. При этом показано, что в гидродинамическом пределе ($q \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$) спиновая динамика имеет диффузионный характер, в то время как в высокочастотном пределе ($\omega \rightarrow \infty$) могут существовать возбуждения типа спиновых волн — парамагноны. Показано, что последний предел воспроизводит полученные ранее результаты [12] для спиновой восприимчивости в рамках теории Кондо и Ямаджи [13].

В первом разделе мы формулируем t - J -модель с помощью операторов Хаббарда и приводим основные соотношения для последних. Во втором разделе описан общий формализм предложенного подхода и получена система самосогласованных уравнений для спиновой восприимчивости в приближении взаимодействующих мод. В третьем разделе обсуждается возможность самосогласованных численных вычислений. Последний раздел посвящается обсуждению полученных результатов. В приложении получено как общее представление, так и приближенное выражение для статической восприимчивости.

1. t - J -МОДЕЛЬ

Гамильтониан t - J -модели имеет следующий вид:

$$H = H_t + H_J = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \sum_{i,j} J_{ij} \left\{ S_i S_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right\}. \quad (1)$$

Первый член в правой части уравнения (1) описывает перескоки электронов между ближайшими ($t_{ij} = t$) и следующими за ближайшими ($t_{ij} = t'$) соседями. Второй член отвечает гейзенберговскому взаимодействию между локализованными на соседних узлах спинами.

Операторы Хаббарда в уравнении (1) определены как

$$X_i^{\alpha\beta} = |i, \alpha\rangle\langle i, \beta| \quad (2)$$

для четырех возможных электронных состояний в узле i

$$|i, \alpha\rangle = |i, 0\rangle, \quad |i, \sigma\rangle \quad (3)$$

соответственно для свободного и для однократно занятого узла электроном со спином $\sigma/2$ ($\sigma = \pm 1$). В t - J -модели учитываются только однократно занятые узельные состояния, и в этом случае условие полноты имеет вид

$$X_i^{00} + \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} = 1. \quad (4)$$

Операторы спина и числа электронов в уравнении (1) выражаются через X -операторы с помощью соотношений

$$S_i^{\sigma} = X_i^{\sigma\bar{\sigma}}, \quad S_i^z = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma X_i^{\sigma\sigma}, \quad n_i = \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma}, \quad (5)$$

где $\bar{\sigma} = -\sigma$.

Операторы Хаббарда имеют следующие правила умножения:

$$X_i^{\alpha\beta} X_j^{\gamma\delta} = \delta_{ij} \delta_{\beta\gamma} X_i^{\alpha\delta}, \quad (6)$$

и коммутационные соотношения:

$$\left[X_i^{\alpha\beta}, X_j^{\gamma\delta} \right]_{\pm} = \delta_{ij} (\delta_{\beta\gamma} X_i^{\alpha\delta} \pm \delta_{\delta\alpha} X_i^{\gamma\beta}). \quad (7)$$

В уравнении (7) верхний знак соответствует случаю, когда оба оператора являются фермиподобными (например, $X_i^{0\sigma}$). Операторы спина и числа электронов (5) – бозе-подобные, и для них следует брать нижний знак. Непростые коммутационные соотношения между этими операторами требуют разработки весьма сложной диаграммной техники (см., например, [7]). Исходя из этого нами использован далее метод функции памяти, сформулированный в терминах операторов Хаббарда.

2. ДИНАМИЧЕСКАЯ СПИНОВАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ

2.1. Общий формализм. Динамическая спиновая восприимчивость определяется как

$$\chi_q(\omega) = -\langle\langle S_q^+ | S_q^- \rangle\rangle_\omega = -\sum_{R_{ij}} e^{-iqR_{ij}} \langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle_\omega, \quad (8)$$

где $R_{ij} = R_i - R_j$ и $\langle\langle A | B \rangle\rangle_\omega$ обозначает фурье-образ запаздывающей коммутаторной функции Грина [14], которая дается следующим выражением:

$$\langle\langle A | B \rangle\rangle_\omega = -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle[A(t), B]\rangle. \quad (9)$$

В уравнении (9) $\text{Im } \omega > 0$, $A(t) = \exp(iHt)A \exp(-iHt)$ и $\langle AB \rangle$ обозначает равновесное статистическое усреднение.

Поскольку входящее в уравнение движения для функции Грина (8) в качестве начального условия при $t = 0$ среднее от коммутатора в парамагнитной области равно нулю, $\langle[S_i^+, S_j^-]\rangle = \delta_{ij} \langle S_i^z \rangle = 0$, удобнее использовать уравнение движения для функции релаксации Кубо [15,16]

$$((A | B))_\omega = -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} (A(t), B). \quad (10)$$

Входящее в (10) скалярное произведение Кубо–Мори определяется формулой

$$(A(t), B) = \int_0^\beta d\lambda \langle A(t - i\lambda) B \rangle, \quad (11)$$

где $\beta = 1/T$ ($\hbar = k_B = 1$).

Функции Грина (9) и (10) связаны известным соотношением

$$\omega((A | B))_\omega = \langle\langle A | B \rangle\rangle_\omega - \langle\langle A | B \rangle\rangle_{\omega=0}. \quad (12)$$

В дальнейшем мы воспользуемся также следующими соотношениями, которые можно легко получить с помощью определений (9)–(11):

$$(i\dot{A} | B)_\omega = (A | -i\dot{B})_\omega = \langle\langle A | B \rangle\rangle_\omega, \quad (13)$$

$$(i\dot{A}, B) = (A, -i\dot{B}) = \langle[A, B]\rangle, \quad (14)$$

$$(A, B) = -\langle\langle A | B \rangle\rangle_{\omega=0}, \quad (15)$$

где $i\dot{A} = idA/dt = [A, H]$.

С использованием уравнений (12)–(15) динамическая спиновая восприимчивость может быть записана как

$$\chi_q(\omega) = \chi_q - \omega \Phi_q(\omega), \quad (16)$$

где $\chi_q \equiv \chi_q(0)$ – статическая восприимчивость и $\Phi_q(\omega) \equiv ((S_q^+ | S_q^-))_\omega$. Релаксационная функция $\Phi_q(\omega)$ может быть определена через функцию памяти $M(q, \omega)$ [16] с помощью соотношения

$$\Phi_q(\omega) = \frac{\chi_q}{\omega - M(q, \omega)/\chi_q}. \quad (17)$$

Для расчета функции памяти воспользуемся уравнением движения для функции релаксации (10)

$$\omega((S_q^+ | S_q^-))_\omega = \chi_q + ((i\dot{S}_q^+ | S_q^-))_\omega. \quad (18)$$

Аналогично для $((i\dot{S}_q^+ | S_q^-))_\omega$ уравнение движения имеет следующий вид:

$$\omega((i\dot{S}_q^+ | S_q^-))_\omega = (i\dot{S}_q^+, S_q^-) + ((i\dot{S}_q^+ | -i\dot{S}_q^-))_\omega. \quad (19)$$

Используя тождество (14), мы имеем $(i\dot{S}_q^+, S_q^-) = \langle [S_q^+, S_q^-] \rangle = 2/\sqrt{N} \langle S_0^z \rangle = 0$, что приводит к уравнению

$$\omega \Phi_q(\omega) = \chi_q + \frac{1}{\omega} ((i\dot{S}_q^+ | -i\dot{S}_q^-))_\omega. \quad (20)$$

Определив нулевую функцию Грина как $\Phi_q^0(\omega) = \chi_q/\omega$, перепишем (20) следующим образом:

$$\Phi_q(\omega) = \Phi_q^0(\omega) + \Phi_q^0(\omega) T_q(\omega) \Phi_q^0(\omega), \quad (21)$$

где мы также ввели матрицу рассеяния $T_q(\omega)$, определенную как

$$T_q(\omega) = \frac{1}{\chi_q} ((i\dot{S}_q^+ | -i\dot{S}_q^-))_\omega \frac{1}{\chi_q}. \quad (22)$$

Сравнивая определения (22) и (17), мы приходим к следующему соотношению между матрицей рассеяния и функцией памяти:

$$T_q(\omega) = \frac{M(q, \omega)}{\chi_q^2} + \frac{M(q, \omega)}{\chi_q^2} \Phi_q^0(\omega) T_q(\omega). \quad (23)$$

Формальное итерационное решение уравнения (23) показывает, что $M(q, \omega)/\chi_q^2(\omega)$ представляет собой неприводимую часть функции памяти, т. е. не содержит в себе частей, связанных одной нулевой функцией Грина:

$$M(q, \omega) = \chi_q^2 T_q^{\text{irr}}(\omega) = ((i\dot{S}_q^+ | -i\dot{S}_q^-))_\omega^{\text{irr}}. \quad (24)$$

Окончательно имеем, что спиновая восприимчивость выражается через функцию памяти следующим образом:

$$\chi_q(\omega) = -\frac{M(q, \omega)}{\omega - M(q, \omega)/\chi_q}. \quad (25)$$

2.2. Приближение взаимодействующих мод. Используя спектральное представление для функции Грина (10), выразим функцию памяти через неприводимую часть временной корреляционной функции токов

$$M(q, \omega) = \sum_{R_{ij}} e^{-qR_{ij}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{e^{\beta\omega'} - 1}{\omega'(\omega - \omega' + i\eta)} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega't} \langle J_i^\dagger(t) | J_j \rangle^{\text{irr}}, \quad (26)$$

где оператор тока в узельном представлении определяется как $J_j = i\dot{S}_j^+$ и содержит два вклада

$$J_j = J_j^t + J_j^J = [S_j^+, H_t] + [S_j^+, H_J]. \quad (27)$$

Первый вклад в уравнении (27) обусловлен кинематическим взаимодействием. Этот член пропорционален интегралу перескока и имеет следующий вид:

$$J_j^t = - \sum_m t_{jm} (X_j^{+0} X_m^{0-} - X_m^{+0} X_j^{0-}). \quad (28)$$

Второй вклад в (27) определяется обменным взаимодействием между локализованными спинами

$$J_j^J = 2 \sum_m J_{jm} (S_j^z S_m^+ - S_m^z S_j^+). \quad (29)$$

Для вычисления неприводимой части временной корреляционной функции в правой части уравнения (26) воспользуемся приближением взаимодействующих мод в терминах независимого распространения “одетых” электрон-дырочных и спиновых флуктуаций [17]. Данное приближение, в сущности, эквивалентно самосогласованному борновскому приближению, в котором пренебрегается перенормировкой вершин. Оно соответствует следующей схеме расщепления временных корреляционных функций:

$$\langle X_m^{-0}(t) X_i^{0+}(t) X_j^{+0} X_l^{0-} \rangle \simeq \langle X_m^{-0}(t) X_l^{0-} \rangle \langle X_i^{0+}(t) X_j^{+0} \rangle, \quad (30)$$

$$\langle S_i^z(t) S_m^-(t) S_j^z S_l^+ \rangle \simeq \langle S_i^z(t) S_j^z \rangle \langle S_m^-(t) S_l^+ \rangle. \quad (31)$$

Перекрестные корреляции типа $\langle (J^t)_i^\dagger | (J^J)_j \rangle$ не дают вклада в рамках данного приближения и в дальнейшем не учитываются.

Основываясь на расщеплении (30), (31) и используя спектральное представление для функции Грина (26), функцию памяти можно представить в виде

$$M(q, \omega) = M_t(q, \omega) + M_J(q, \omega). \quad (32)$$

В (32) первый член $M_t(q, \omega)$ описывает вклад от подсистемы делокализованных дырок и имеет следующую аналитическую форму:

$$M_t(q, \omega) = \frac{1}{N} \sum_k t_{kq}^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega' [n(\omega_1 - \omega') - n(\omega_1)] \times \\ \times \frac{A_k(\omega_1) A_{k-q}(\omega_1 - \omega')}{\omega'(\omega - \omega' + i\eta)}. \quad (33)$$

Здесь $t_{kq} = t_k - t_{k-q}$, $t_k = 4(t\gamma_q + t'\gamma'_q)$, $\gamma_q = (1/2)[\cos q_x + \cos q_y]$ и $\gamma'_q = \cos q_x \cos q_y$ для двумерной квадратной решетки (постоянная решетки $a = 1$), $n(\omega) = (e^{\beta\omega} + 1)^{-1}$; $A_k(\omega) = (-1/\pi) \text{Im} \langle \langle X_q^{\sigma 0} X_q^{0\sigma} \rangle \rangle_\omega$ – функция спектральной плотности дырочных возбуждений, которая в парамагнитной фазе не зависит от направления спина.

Второй вклад в $M_J(q, \omega)$ в уравнении (32) определяется подсистемой локализованных спинов и имеет вид

$$M_J(q, \omega) = \frac{2}{\pi^2 N} \sum_k J_{kq}^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega' [N(\omega_1 - \omega') - N(\omega_1)] \times \\ \times \frac{\text{Im} \chi_k(\omega_1) \text{Im} \chi_{k-q}(\omega_1 - \omega')}{\omega'(\omega - \omega' + i\eta)}, \quad (34)$$

где $N(\omega) = (e^{\beta\omega} - 1)^{-1}$, $J_{kq} = J_k - J_{k-q}$ и $J_q = 4J\gamma_q$. При получении (34) мы воспользовались соотношением $\langle \langle S_q^z | S_q^z \rangle \rangle_\omega = (1/2) \langle \langle S_q^+ | S_q^- \rangle \rangle_\omega$, справедливым в парамагнитной фазе.

Функции $\text{Re} M(q, \omega)$ и $\text{Im} M(q, \omega)$ по отношению к переменной ω являются нечетной и четной, соответственно, они связаны дисперсионным соотношением

$$\text{Re} M(q, \omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Im} M(q, \omega')}{\omega' - \omega}. \quad (35)$$

Учитывая это соотношение, достаточно вычислить только мнимую часть функции памяти.

2.3. Асимптотическое поведение $\chi_q(\omega)$. Рассмотрим предельные свойства динамической спиновой восприимчивости. Сначала исследуем гидродинамический предел, $q \rightarrow 0$ и $\omega \rightarrow 0$. Действительная часть функции памяти $\text{Re} M(q, \omega)$ в этом пределе равна нулю, т. к. является нечетной функцией частоты ω . Мнимая часть $\text{Im} M(q, \omega)$ имеет конечный предел, который с помощью соотношений (33) и (34) можно записать как $\text{Im} M(q, \omega) \simeq -Dq^2$, где $D = D_t + D_J$ и

$$D_t = \frac{\pi}{N} \sum_k (\hat{q} \nabla_k t_k)^2 \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 |n'(\omega_1)| A_k(\omega_1) A_{k-q}(\omega_1 - \omega), \\ D_J = \frac{2}{\pi N} \sum_k (\hat{q} \nabla_k J_k)^2 \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 |N'(\omega_1)| \text{Im} \chi_k(\omega_1) \text{Im} \chi_{k-q}(\omega_1 - \omega). \quad (36)$$

В (36) мы ввели следующие обозначения: $\hat{q} = q/q$, $\nabla_k = dt_k/dk$, $n'(\omega) = dn(\omega)/d\omega$ и $N'(\omega) = dN(\omega)/d\omega$. Таким образом, в гидродинамическом пределе спиновая восприимчивость записывается в известной форме [16], характерной для диффузионной спиновой динамики

$$\chi_q(\omega) = \chi_0 \frac{i\tilde{D}q^2}{\omega + i\tilde{D}q^2}, \quad (37)$$

где $\tilde{D} = D/\chi_0$ – коэффициент спиновой диффузии и χ_0 – статическая спиновая восприимчивость.

В пределе высоких частот, $\omega \rightarrow \infty$, главный вклад в функцию памяти дает действительная часть $M(q, \omega) \simeq m_q/\omega$, где m_q – первый неисчезающий момент функции памяти:

$$m_q = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Im} M(q, \omega) = \langle [i\dot{S}_q^+, S_q^-] \rangle. \quad (38)$$

Следовательно, спиновая восприимчивость в высокочастотном пределе может быть представлена в виде

$$\chi_q(\omega) = -\chi_q \frac{\omega_q^2}{\omega^2 - \omega_q^2}, \quad (39)$$

где $\omega_q^2 = m_q/\chi_q$ – дисперсия высокочастотных квазиспиновых волн, так называемых пара(антиферро)магнонов. Заметим, что уравнение (39) вместе с выражениями для χ_q и m_q , приведенными в приложении (см. (62) и (63)), воспроизводит результат работы [12], полученный в приближении среднего поля.

3. САМОСОГЛАСОВАННЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

Уравнения (25), (33) и (34) представляют собой замкнутую систему интегральных уравнений, полученную в рамках приближения взаимодействующих мод. Эти уравнения можно решить только численно, с помощью итерационной процедуры. Для каждой итерации статическую восприимчивость следует рассчитать на основе соотношений (50)–(52) (см. приложение), подставляя для значений $M(q, \omega)$ и $\chi_q(\omega)$ результат предыдущей итерации. Однако необходимо использовать некоторое нулевое приближение для $\chi_q(\omega)$ в качестве начальной точки итерационной процедуры.

Кроме этого, в уравнение для функции памяти (33) входит спектральная функция дырочных возбуждений $A_k(\omega)$. На основании известных результатов для спектральной функции дырок в t - J -модели [18] $A_k(\omega)$ можно представить как

$$A_k(\omega) = Z_k \delta(\omega + \mu - \varepsilon_k) + A_k^{\text{inc}}(\omega), \quad (40)$$

где Z_k – квазичастичный вес для когерентных возбуждений с дисперсией ε_k в узкой зоне порядка J . Второй вклад в (40) $A_k^{\text{inc}}(\omega)$ соответствует диффузионному движению дырок в широкой некогерентной зоне порядка $2W$ ($8t$ для двумерной квадратной решетки). Этот вклад может быть аппроксимирован следующим образом:

$$A_k^{\text{inc}} = N_{\text{inc}} \theta(W - |\omega + \mu|), \quad (41)$$

где N_{inc} – плотность состояний в некогерентном континууме. Она связана с Z_k правилом сумм

$$\frac{1}{N} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega A_k(\omega) = \langle X_i^{00} + X_i^{\sigma\sigma} \rangle = 1 - \frac{n}{2}. \quad (42)$$

С помощью (40) вклад от когерентного движения дырок в мнимую часть функции памяти записывается как

$$\text{Im } M_t^{c-c}(q, \omega) = \frac{\pi}{N} \sum_k t_{kq}^2 Z_k Z_{k-q} \frac{n(\varepsilon_k) - n(\varepsilon_{k-q})}{\omega} \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} - \omega). \quad (43)$$

Для вычисления второго вклада (34) в функцию памяти воспользуемся выражением для $\chi_q(\omega)$ в приближении среднего поля (см. (39))

$$\text{Im } M_J(q, \omega) = \frac{\pi}{2N} \sum_k B_{kq} \{P_{kq}(\omega) + P_{kq}(-\omega)\}, \quad (44)$$

где

$$B_{kq} = J_{kq}^2 \frac{m_k m_{k-q}}{\omega_k \omega_{k-q}} \quad (45)$$

есть эффективная вершинная функция и

$$P_{kq}(\omega) = \left\{ \frac{N(\omega_k) - N(\omega_{k-q})}{\omega} \delta(\omega_k - \omega_{k-q} - \omega) - \frac{1 + N(\omega_k) + N(\omega_{k-q})}{\omega} \delta(\omega_k + \omega_{k-q} - \omega) \right\}. \quad (46)$$

На основе уравнений (43) и (44) можно рассчитать спиновую восприимчивость в рамках первой итерации. Параметры, зависящие от спектральной плотности дырочных состояний в выражениях (54) и (62) для m_q и ω_q (см. приложение), соответственно, определяются спектральной функцией (40). В то же время спиновые корреляционные функции χ_1 и χ_2 (см. (56) и (64)) следует вычислять самосогласованно вместе со спиновой восприимчивостью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе на основе t - J -модели получено общее представление для динамической спиновой восприимчивости (25) в рамках метода функции памяти (26). Предложенный подход сформулирован в терминах операторов Хаббарда, что позволяет последовательно исключить двукратно занятые электронные состояния на узлах решетки. На основе уравнений движения для двухвременных функций Грина [14] получено выражение для функции памяти в рамках приближения взаимодействующих мод (32)–(34). Показано, что функция памяти содержит два разных по природе вклада. Первым из них (см. (33)) является вклад от подсистемы зонных дырок, обусловленный кинематическим взаимодействием. Второй вклад (см. (34)) происходит от подсистемы локализованных спинов. В пределе малой концентрации дырок доминирует второй вклад, который описывает спиновую динамику, характерную для модели Гейзенберга. В противоположном пределе в случае большой концентрации дырок основной вклад дают электрон-дырочные возбуждения, характерные для зонного магнетизма.

Данный подход позволяет описать спиновую динамику как при больших, так и при малых частотах. Показано, что в гидродинамическом пределе ($q \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$) восприимчивость описывает диффузионную спиновую динамику (37) с коэффициентом диффузии, содержащим два вклада (36). В то же время в высокочастотном пределе ($\omega \rightarrow \infty$) могут существовать возбуждения типа спиновых волн (39). Дисперсия последних (62), рассчитанная в приближении взаимодействующих мод для одновременной корреляционной функции (60), воспроизводит результат теории [12] в приближении среднего поля.

Для сравнения нашего результата с результатами диаграммного подхода следует заметить, что общее представление спиновой восприимчивости (25) соответствует суммированию бесконечного ряда диаграмм, “генерированных” функцией памяти (26). Последняя, будучи рассчитанной в приближении взаимодействующих мод (см. (30) и (31)), может быть схематично представлена двумя петлевыми диаграммами: первая, порядка t^2 , является электрон-дырочной петлей, а вторая, порядка J^2 , – петель спиновых флуктуаций. Заметим, что в работе [8] все вклады в знаменатель уравнения Ларкина пропорциональны J и, следовательно, исчезают в пределе $J = 0$ ($U \rightarrow \infty$), в то время как в нашем случае первый вклад (обусловленный кинематическим взаимодействием) остается. В работе [7] спин-флуктуационный вклад, соответствующий нашей второй петле, не учитывается, поскольку ведется суммирование разных типов диаграмм, обусловленных только кинематическим взаимодействием.

В настоящее время трудно обосновать применимость обсужденных выше приближений, включая предложенные в данной работе. Для проверки справедливости нашего подхода следует выполнить численное решение системы интегральных уравнений и провести сравнение с известными экспериментальными данными, что планируется сделать в последующей работе.

Авторы выражают свою благодарность за финансовую поддержку РФФИ (грант № 96-02-17527), программе ИНТАС-РФФИ (грант № 95-591), NREL (грант № ААХ-6-16763-01), а также Российской государственной программе “Высокотемпературная сверхпроводимость” (грант № 95056) и программе Гейзенберга–Ландау, БЛТФ, ОИЯИ.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Здесь приводится вычисление статической спиновой восприимчивости χ_q в рамках метода Церковникова [19]. Используя (17), (19) и (20), перепишем неприводимую часть корреляционной функции токов следующим образом [15]:

$$((i\dot{S}_q^+ | -i\dot{S}_q^-))_{\omega}^{\text{irr}} = ((i\dot{S}_q^+ | -i\dot{S}_q^-))_{\omega} - ((i\dot{S}_q^+ | S_q^-))_{\omega} ((S_q^+ | S_q^-))_{\omega}^{-1} ((S_q^+ | -i\dot{S}_q^-))_{\omega}. \quad (47)$$

Аналогично определим неприводимую часть корреляционной функции “сил”:

$$((i^2\ddot{S}_q^+ | i^2\ddot{S}_q^-))_{\omega}^{\text{irr}} = ((i^2\ddot{S}_q^+ | i^2\ddot{S}_q^-))_{\omega} - ((i^2\ddot{S}_q^+ | S_q^-))_{\omega} ((S_q^+ | S_q^-))_{\omega}^{-1} ((S_q^+ | i^2\ddot{S}_q^-))_{\omega}. \quad (48)$$

При совпадающих временах имеем

$$(i^2 \ddot{S}_q^+, i^2 \ddot{S}_q^-)^{\text{irr}} = (i^2 \ddot{S}_q^+, i^2 \ddot{S}_q^-) - (i^2 \ddot{S}_q^+, S_q^-)(S_q^+, S_q^-)^{-1}(S_q^+, i^2 \ddot{S}_q^-). \quad (49)$$

Используя (49) и тождества (13)–(15), статическую спиновую восприимчивость запишем в виде

$$\chi_q = \frac{\langle [i\dot{S}_q^+, S_q^-] \rangle^2}{(i^2 \ddot{S}_q^+, i^2 \ddot{S}_q^-) - (i^2 \ddot{S}_q^+, i^2 \ddot{S}_q^-)^{\text{irr}}}. \quad (50)$$

Первый член в знаменателе правой части (50) является третьим моментом динамической восприимчивости

$$(i^2 \ddot{S}_q^+, i^2 \ddot{S}_q^-) = \langle [i^2 \ddot{S}_q^+, -i\dot{S}_q^-] \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^3 \text{Im } \chi_q(\omega), \quad (51)$$

а второй – вторым моментом функции памяти

$$(i^2 \ddot{S}_q^+, i^2 \ddot{S}_q^-)^{\text{irr}} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^2 \text{Im } M(q, \omega). \quad (52)$$

Выражение (50) является точным представлением статической восприимчивости.

Далее, получим приближенное выражение для χ_q , для чего воспользуемся тождеством

$$\langle [i\dot{S}_q^+, S_q^-] \rangle = (i^2 \ddot{S}_q^+, S_q^-). \quad (53)$$

Рассчитаем левую часть (53), используя коммутационные соотношения для операторов Хаббарда

$$m_q = \langle [i\dot{S}_q^+ | S_q^-] \rangle = 4zJ(1 - \gamma_q) \left\{ \frac{t}{2J} n_1 + \frac{t'}{2J} n'_1 \lambda_q - \chi_1 \right\}, \quad (54)$$

где $z = 4$ и введены следующие обозначения:

$$n_1 = \frac{1}{N} \sum_q \gamma_q n_q, \quad n' = \frac{1}{N} \sum_q \gamma'_q n_q, \quad n_q = \langle X_q^{\sigma 0} X_q^{0 \sigma} \rangle \quad (55)$$

и

$$\chi_1 = \frac{1}{N} \sum_q \gamma_q \langle S_q^+ S_q^- \rangle, \quad \lambda_q = \frac{1 - \gamma'_q}{1 - \gamma_q}. \quad (56)$$

Для расчета корреляционной функции в правой части (53) 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 (53) в виде

$$(i^2 \ddot{S}_q^+, S_q^-) = \sum_{R_{il}} e^{-iqR_{il}} (i^2 \ddot{S}_i^+, S_l^-), \quad (57)$$

где вторая производная динамической переменной S_i^+ записывается как

$$\begin{aligned} i^2 \ddot{S}_i^+ = & \sum_{j,n} t_{ij} \{ t_{jn} [H_{ijn} + H_{nji}] - t_{in} [H_{jin} + H_{nij}] \} + \\ & + \sum_{j,n} J_{ij} \{ J_{jn} [2P_{ijn} + \Pi_{nji}] - J_{in} [2P_{jin} + \Pi_{nij}] \} \end{aligned} \quad (58)$$

со следующими обозначениями:

$$\begin{aligned} H_{ijn} &= X_i^{+0} X_j^{+-} X_n^{0+} + X_i^{+0} (X_j^{00} + X_j^{--}) X_n^{0-}, \\ P_{ijn} &= S_i^z S_j^z S_n^+ - S_i^z S_n^z S_j^+, \\ \Pi_{ijn} &= S_i^+ S_j^- S_n^+ - S_j^+ S_i^- S_n^+. \end{aligned} \quad (59)$$

В (58) мы опустили члены, пропорциональные tJ , поскольку они не дают вклада в дальнейшую схему расщепления.

Заметим, что в произведениях (59) только два узельных индекса могут совпадать. На первом шаге выделим из суммы все произведения операторов Хаббарда с совпадающими узлами и, используя правило умножения (6), редуцируем число операторов в таких произведениях. Очевидно, что в оставшихся произведениях операторы можно переставлять (при этом в случае двух ферми-подобных операторов меняется знак произведения). Далее, подставив перегруппированную сумму в правую часть (58), проведем расщепления следующего типа:

$$\begin{aligned} (X_i^{\sigma\sigma} S_j^+, S_l^-) &\simeq \langle X_i^{\sigma\sigma} \rangle (S_j^+, S_l^-), \quad i \neq j, \\ (S_i^+ S_j^- S_n^+, S_l^-) &\simeq \langle S_i^+ S_j^- \rangle (S_n^+, S_l^-) + \langle S_n^+ S_j^- \rangle (S_i^+, S_l^-), \quad i \neq j \neq n. \end{aligned} \quad (60)$$

В данной схеме никогда не расщепляются операторы с совпадающими узлами и, следовательно, локальные корреляции сохраняются.

В импульсном представлении результат осуществленной процедуры записывается в следующем виде:

$$(i^2 \ddot{S}_q^+, S_q^-) \simeq \omega_q^2 (S_q^+, S_q^-) = \omega_q^2 \chi_q, \quad (61)$$

где

$$\omega_q^2 = 4J^2 z^2 |\chi_1| (1 - \gamma_q) [1 + \Delta + C\lambda_q + \gamma_q]. \quad (62)$$

Выше введены обозначения

$$\Delta = \frac{1}{|\chi_1|} \left\{ \chi_2 + \frac{1-z}{z} |\chi_1| + \alpha - \eta \right\}, \quad C = \frac{\alpha' - \eta}{|\chi_1|}, \quad (63)$$

$$\chi_2 = \frac{1}{N} \sum_q \gamma_q^2 \langle S_q^+ S_q^- \rangle, \quad (64)$$

$$\alpha = \frac{t^2}{2NJ^2} \sum_q \gamma_q^2 \tilde{n}_q, \quad \alpha' = \frac{(t')^2}{2NJ^2} \sum_q (\gamma'_q)^2 \tilde{n}_q, \quad \eta = \frac{tt'}{2NJ^2} \sum_q \gamma_q \gamma'_q n_q, \quad (65)$$

$$\tilde{n}_q = \left(1 - \frac{n}{2} - n_q\right), \quad n = \langle X_i^{\sigma\sigma} \rangle. \quad (66)$$

Окончательно, используя (53), (54) и (61), статическую восприимчивость представим в виде

$$\chi_q = \frac{\langle [i\dot{S}_q^+, S_q^-] \rangle}{\omega_q^2} = \frac{m_q}{\omega_q^2}. \quad (67)$$

Следует заметить, что выражение (67) с m_q (54) и ω_q (62) точно воспроизводит результат работы [12], полученный в приближении среднего поля.

Список литературы

- [1] *A. D. Kampf.* Phys. Rep. 1994. V. 249. P. 219.
- [2] *T. Tanamoto, H. Konho, H. Fukuyama.* J. Phys. Soc. Jpn. 1994. V. 63. P. 2379.
- [3] *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. 504.
- [5] *C. L. Kane, P. A. Lee, T. K. Ng, B. Chakraborty, N. Read.* Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 2653.
- [6] *A. Auerbach, B. E. Larson.* Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 7800.
- [7] *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.
- [8] *F. Onufrieva, J. Rossat-Mignod.* Phys. Rev. B. 1995. V. 52. P. 7572.
- [9] *В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, С. А. Пикун.* ЖЭТФ. 1967. Т. 53. С. 1089.
- [10] *N. M. Plakida.* Z. Phys. 1997. B. 103. S. 383.
- [11] *S. M. Hayden et al.* Phys. Rev. Lett. 1996. V. 76. P. 1344.
- [12] *H. Shimahara, S. Takada.* J. Phys. Soc. Jpn. 1992. V. 61. P. 989.
- [13] *J. Kondo, K. Yamaji.* Progr. Theor. Phys. 1972. V. 47. P. 807.
- [14] *Д. Н. Зубарев.* УФН. 1960. Т. 71. С. 71.
- [15] *Ю. А. Церковников.* ТМФ. 1981. Т. 49. С. 219.
- [16] *D. Forster.* Hydrodynamic fluctuations, Broken Symmetry and Correlation Functions. New York: Benjamin, 1975.
- [17] *W. Götze, G. M. Vujčić.* Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 9398.
- [18] *E. Dagotto.* Rev. Mod. Phys. 1994. V. 66. P. 763.
- [19] *Ю. А. Церковников.* ТМФ. 1982. Т. 52. С. 147.

Поступила в редакцию 2.IX.1997 г.