

Динамическая магнитная восприимчивость в t - J -модели

Е.В. Кузьмин

Таврический национальный университет, пр. Вернадского, 4, г. Симферополь, 95007, АРК, Украина
E-mail: ekuz@crimea.edu

Статья поступила в редакцию 8 июня 2004 г.

В режиме сильных электронных корреляций рассмотрена t - J -модель с запретом на появление двоек (двукратно заполненных узлов) в нижней хаббардовской зоне и дырок — в верхней. Описана специфика электронных состояний. Получено выражение для поперечной динамической восприимчивости χ как функции волнового вектора q и частоты ω в приближении случайных фаз (ПСФ) в металлическом состоянии системы, проанализирована статическая восприимчивость ($\omega = 0$) в пределах $q = 0$ и $q = Q = (\pi, \pi)$ в квадратной решетке в зависимости от электронной концентрации n . Диэлектрический предел ($n \rightarrow 1$) описан как состояние спиновой жидкости (СЖ). Предложено выражение для магнитной восприимчивости, объединяющее ПСФ и концепцию СЖ при наличии протекания по узлам. Показано, что в определенной концентрационной области статическая восприимчивость отрицательна (диамагнитный эффект), что указывает на возможность сверхпроводящего состояния с обменным механизмом спаривания.

У режимі сильних електронних кореляцій розглянуто t - J -модель із заборону на виникнення двійок (двократно заповнених вузлів) у нижній хабардівській зоні і дірок — у верхній. Описано специфіку електронних станів. Отримано вираз для поперечної динамічної сприйнятливості χ як функції хвильового вектора q і частоти ω у наближенні випадкових фаз (НВФ) у металевому стані системи, проаналізовано статичну сприйнятливості ($\omega = 0$) у межах $q = 0$ та $q = Q = (\pi, \pi)$ у квадратній ґратці в залежності від електронної концентрації n . Діелектричний ліміт ($n \rightarrow 1$) описано як стан спінової рідини (СР). Запропоновано вираз для сприйнятливості, що поєднує НВФ і концепцію СР за наявності протікання по вузлах. Показано, що у визначеній концентраційній області статична сприйнятливості негативна (діамагнітний ефект), що вказує на імовірність надпровідного стану з обмінним механізмом спарювання.

PACS: 75.10.Jm, 75.10.-b

Введение

Физические свойства систем с сильными электронными корреляциями являются предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований уже более четверти века. Интерес к таким системам резко возрос после открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в купратах. Теоретические исследования в большинстве случаев проводятся с использованием модели Хаббарда и ее модификаций. Действительно, в сложной энергетической структуре многих веществ можно выделить ту область, в которой происходят «главные» электронные события, — узкие зоны,

внутри которых находится уровень Ферми. Именно эта ситуация характерна для модели Хаббарда в режиме сильных электронных корреляций, когда «защиточная» зона расщеплена на две (верхнюю и нижнюю), разделенных большой величиной одноузельного кулоновского отталкивания U . В зависимости от электронной концентрации n уровень Ферми находится либо в нижней хаббардовской зоне ($n = 1 - x$), либо в верхней ($n = 1 + x$).

Каждая из этих зон может быть описана в рамках t - J -модели, где t — параметр туннелирования (перескоков) электронов между ближайшими соседними узлами решетки, J — параметр антиферромагнитного обменного взаимодействия между бли-

жайшими соседями (сумма прямого и кинетического обменов). При $x \neq 0$ система находится в металлическом состоянии, при $x = 0$ система является диэлектриком с локализованными спинами и описывается моделью Гейзенберга.

Многие физические свойства системы (в зависимости от соотношения между параметрами t и J , концентрации допирования x и температуры) отражает динамическая магнитная восприимчивость $\chi(q, \omega)$, где q — волновой вектор, ω — частота. Расходимость χ свидетельствует о существовании дальнего магнитного порядка, а отрицательность χ (диамагнетизм) указывает на возможность сверхпроводимости. Следует обратить внимание, что при $x \ll 1$ обнаруживается антиферромагнетизм, а в интервале $0,1 \leq x \leq 0,4$ существует ВТСП (купраты).

В настоящей работе предложено выражение для поперечной динамической восприимчивости $\chi(q, \omega)$ во всем концентрационном интервале. Доказана симметрия χ (относительно величины x) в верхней и нижней зонах. Предел $x \rightarrow 0$ описан как спиновая жидкость (СЖ) с сильно развитыми корреляциями антиферромагнитного типа. В случае металла существенен вклад в восприимчивость, вычисляемый в приближении случайных фаз (ПСФ). Поскольку в t - J -модели одни и те же электроны принимают участие и в перескоках, и в обмене, этот дуализм приводит к своеобразному сочетанию металлических и СЖ свойств: в определенном интервале концентраций восприимчивость $\chi(Q, 0)$, где Q — граничная точка зоны Бриллюэна, становится отрицательной. Обнаруженный диамагнитный эффект подтверждает возможность возникновения сверхпроводимости за счет обменного механизма спаривания.

Теория базируется на методе функций Грина, результаты получены в рамках линейной теории 2-го порядка.

1. Гамильтониан t - J -модели

Гамильтониан хорошо известной t - J -модели [1]

$$H = H_t + H_J - \mu \hat{N}_e, \quad (1)$$

$$H_t = -t \sum_{f\Delta\sigma} X_f^{\sigma 0} X_{f+\Delta}^{0\sigma}, \quad H_J = \frac{J}{2} \sum_{f\Delta} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+\Delta}, \quad (2)$$

$$\hat{N}_e = \sum_{f\sigma} X_f^{\sigma\sigma}$$

задается на идеальной решетке размерности d с периодическими граничными условиями, где f — векторные координаты узлов, число которых равно N , Δ — векторы, соединяющие z ближайших соседей, μ — химический потенциал, \hat{N}_e — оператор числа

электронов, N_e — число электронов, при этом $N - N_e = N_0$ — число дырок, $N_e/N = n$ — электронная концентрация ($0 \leq n \leq 1$).

Модель определена в так называемой нижней хаббардовской зоне — в редуцированном гильбертовом пространстве, содержащем на каждом узле решетки f либо незаполненные электронные состояния $|f0\rangle$ — дырки, либо одноэлектронные состояния $|f\sigma\rangle$ с проекциями $\sigma = \uparrow$ и \downarrow . Условие запрета на появление двухэлектронных состояний на узле (двоек), имеющее вид

$$X_f^{00} + X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow} = 1, \quad (3)$$

является условием полноты в этой модели и с физической точки зрения означает, что величина кулоновского отталкивания электронов на узле $U = \infty$. Электронные состояния и переходы между ними описываются операторами Хаббарда

$$X_f^{pq} = |fp\rangle\langle fq|, \quad X_f^{pq} X_f^{q'p'} = \delta_{qq'} X_f^{pp'}, \quad p, q = 0, \sigma. \quad (4)$$

Из-за условия (3) алгебра хаббардовских X -операторов отличается от фермиевской и бозевской; в частности, антикоммутатор квазифермиевских операторов равен

$$\{X_f^{\sigma 0}, X_m^{0\sigma}\} = \delta_{fm} (X_f^{\sigma\sigma} + \delta_{\sigma\sigma'} X_f^{00}).$$

Гамильтониан H_t описывает перескоки (туннелирование) электронов из занятых узлов в ближайшие соседние пустые узлы, $t > 0$ является интегралом туннелирования. Гамильтониан H_J описывает антиферромагнитное обменное взаимодействие ($J > 0$) между ближайшими заполненными узлами, где оператор спина $\mathbf{S}_f = (S_f^+, S_f^-, S_f^z)$ на узле f имеет представление

$$S_f^+ = X_f^{\uparrow\downarrow}, \quad S_f^- = X_f^{\downarrow\uparrow}, \quad S_f^z = \frac{1}{2} (X_f^{\uparrow\uparrow} - X_f^{\downarrow\downarrow}). \quad (5)$$

В немагнитном состоянии

$$\langle X_f^{\uparrow\uparrow} \rangle = \langle X_f^{\downarrow\downarrow} \rangle = \frac{1}{2} (1 - x), \quad \langle X_f^{00} \rangle = x, \quad n = 1 - x, \quad (6)$$

x — концентрация дырок.

Физические свойства модели будем исследовать в зависимости от концентрации электронов n и отношения $g = J/t$, которое, по оценкам [2], не превышает 0,25. Гамильтониан (1) действует на волновую функцию системы, которая может быть представлена как линейная комбинация всех возможных пространственных конфигураций при заданном числе электронов N_e . Очевидно, что число таких конфигураций (даже без учета спиновых состояний) факториально велико. Будем считать, что система в

среднем пространственно однородная и процессами кластеризации можно пренебречь. Действительно, минимум H_t достигается при максимальном числе пар частица – дырка, и поэтому электроны (дырки) распределены по узлам решетки в среднем однородно. С другой стороны, минимум H_J возможен при максимальном числе пар частица – частица. Тем самым в этой модели имеет место конкуренция между перескоками электронов и их обменным взаимодействием; существенную роль при этом играет электронная концентрация.

В области малых концентраций ($n \ll 1$) электроны можно считать «почти свободными». Обменные взаимодействия начинают играть существенную роль, когда $n > n_c$, где n_c – концентрация протекания по узлам, выше которой существует бесконечный кластер мощностью $P(n)$, обеспечивающий связность системы по обменным взаимодействиям [3]. При $n \rightarrow 1$ (диэлектризация системы) преобладающими становятся обменные взаимодействия, а при $n = 1$ перескоки электронов отсутствуют и t - J -модель превращается в гейзенберговскую модель локализованных спинов ($S = 1/2$).

Поскольку перескоки электронов и их обменные взаимодействия осуществляются между z ближайшими соседями, целесообразно перейти к безразмерному гамильтониану

$$h = \frac{H}{zt} = h_{\text{kin}} + gh_{\text{ex}}, \quad g = J/t, \quad \mu' = \mu/zt. \quad (7)$$

Далее все энергетические параметры будут обезразмерены на zt .

Для описания металлических и коллективных спиновых свойств системы естественно использовать импульсное представление и фурье-преобразование для квазифермиевских и квазибозевских операторов

$$X_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{ikf} X_f^{0\sigma}, \quad X_f^{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikf} X_{k\sigma}, \quad (8)$$

$$X_q^{\sigma\sigma'} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{iqf} X_f^{\sigma\sigma'}, \quad X_f^{\sigma\sigma'} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{-iqf} X_q^{\sigma\sigma'}, \quad (9)$$

где векторы k, q принадлежат первой зоне Бриллюэна, суммирование проводится по всем узлам f решетки и по всем состояниям в зоне Бриллюэна. Используя (7), оператор кинетической энергии представляем в виде

$$h_{\text{kin}} = \sum_{k\sigma} (\omega_k - \mu') X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma}, \quad (10)$$

$$\omega_k = -\gamma_k, \quad \gamma_k = \frac{1}{z} \sum_{\Delta} e^{ik\Delta}.$$

Гамильтониан t - J -модели в верхней хаббардовской зоне запишем в виде

$$H_{(\text{Up})} = H_t^* + H_J - \mu N_e^*, \quad (11)$$

$$H_t^* = -t^* \sum_{f\Delta\sigma} X_f^{2\sigma} X_{f+\Delta}^{\sigma 2}, \quad H_J = \frac{J}{2} \sum_{f\Delta} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+\Delta}, \quad (12)$$

$$N_e^* = \sum_f X_f^{22}.$$

Отсчет энергий ведется от большой величины U , разделяющей хаббардовские зоны. Здесь t^* – интеграл перескока электрона между однократно заполненными узлами, $N_e^* = \hat{N}_2$ – оператор числа добавленных электронов (свыше числа узлов N), т.е. оператор числа двоек, $\langle \hat{N}_2 \rangle / N = x$ – концентрация добавленных электронов (или концентрация электронного допирования), $0 \leq x \leq 1$, μ – химпотенциал в верхней зоне, обменные взаимодействия точно такие же, как и в нижней зоне. В режиме сильных корреляций считаем выполненным условие запрета на появление дырок

$$X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow} + X_f^{22} = 1. \quad (13)$$

В немагнитном состоянии

$$\langle X_f^{\uparrow\uparrow} \rangle = \langle X_f^{\downarrow\downarrow} \rangle = \frac{1}{2}(1-x), \quad \langle X_f^{22} \rangle = x. \quad (14)$$

Безразмерный гамильтониан (в единицах zt^*) выглядит аналогично (6). Используя фурье-преобразование

$$X_k^{\sigma 2} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{ikf} X_f^{\sigma 2}, \quad X_f^{\sigma 2} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikf} X_k^{\sigma 2}, \quad (15)$$

получаем

$$h_{\text{kin}}^* = \sum_{k\sigma} (\omega_k - \mu^*) X_k^{2\sigma} X_k^{\sigma 2}, \quad \mu^* = \mu/zt^*. \quad (16)$$

Выражение для обменного гамильтониана остается без изменений, за исключением возможной перенормировки параметра взаимодействия $g = J/t^*$.

Гамильтониан системы коммутирует со всеми компонентами оператора полного спина и с его квадратом. Операторы H , S^z и \mathbf{S}^2 имеют общие собственные функции и классифицируются по величине полного спина системы S . Основным является синглетное состояние системы с полным спином $S = 0$. Соотношения (6) и (14) свидетельствуют о наличии симметрии относительно концентрации допирования x : дырочного (в нижней зоне) и электронного (в верхней).

2. Уравнения для квазифермиевских операторов, специфика электронных состояний

На основе гамильтониана \hat{h} из (7), используя алгебру X -операторов, записываем уравнение движения для квазифермиевского оператора (здесь и далее $\hbar = 1$)

$$\begin{aligned} i\dot{X}_f^{0\sigma} &= [X_f^{0\sigma}, \hat{h}] = \\ &= -\frac{1}{z} \sum_{\Delta} X_{f+\Delta}^{0\sigma} - \frac{1}{z} \sum_{\Delta} [X_f^{\bar{\sigma}\sigma} X_{f+\Delta}^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_{f+\Delta}^{0\sigma}] + \\ &+ g \frac{1}{2z} \sum_{\Delta} [X_{f+\Delta}^{\bar{\sigma}\sigma} X_f^{0\bar{\sigma}} + \eta(\sigma) S_{f+\Delta}^z X_f^{0\sigma}] - \mu' X_f^{0\sigma}. \end{aligned} \quad (17)$$

Нелинейность уравнения движения обусловлена алгеброй хаббардовских операторов (в том числе условием запрета) и наличием обменного взаимодействия. Как правило, в уравнении выделяется линейный член путем замены диагональных хаббардовских операторов их средними значениями, т.е. $X_f^{\bar{\sigma}\sigma} \approx \langle X_f^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle \equiv n_{\bar{\sigma}}$ и $\langle S_f^z \rangle \equiv m$. В немагнитном состоянии системы ($n_{\bar{\sigma}} = n/2$, $\langle S_f^z \rangle = 0$) уравнение движения после фурье-преобразования принимает вид

$$i\dot{X}_{k\sigma} = \xi_k X_{k\sigma} + Y_{k\sigma}, \quad Y_{k\sigma} = R_{k\sigma} - L_{k\sigma}, \quad (18)$$

$$\begin{aligned} R_{k\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p \left(\omega_p - \frac{g}{2} \omega_{k-p} \right) X_{k-p}^{\bar{\sigma}\sigma} X_{p\bar{\sigma}}, \\ L_{k\sigma} &= \frac{g}{2} \eta(\sigma) \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p \omega_{k-p} S_{k-p}^z X_{p\sigma}, \\ \xi_k &= \varepsilon_k - \mu', \quad \varepsilon_k = c\omega_k, \quad c = 1 - n/2, \\ \bar{\sigma} &= -\sigma, \quad \eta(\uparrow) = 1, \quad \eta(\downarrow) = -1. \end{aligned} \quad (19)$$

Линейная часть уравнения (18) со спектром ξ_k соответствует хорошо известному приближению «Хаббард I». В этом случае одночастичная антикоммутаторная функция Грина имеет вид

$$\langle\langle X_{k\sigma} | X_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \frac{\langle\{X_{k\sigma}, X_{k\sigma}^+\}\rangle}{\omega - \xi_k} = \frac{c}{\omega - \xi_k}. \quad (20)$$

Из (20) и спектральной теоремы получаем функцию распределения хаббардовских электронов в немагнитном состоянии

$$\begin{aligned} \langle X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma} \rangle &\equiv n_{k\sigma} = n_k = cf(\xi_k), \\ f(\xi_k) &= f_k = [\exp(\xi_k/\tau) + 1]^{-1}, \end{aligned} \quad (21)$$

где $f(\xi_k)$ — фермиевская функция, $\tau = k_B T / zt$ — безразмерная температура.

Концентрация электронов, по определению, равна

$$\begin{aligned} n &= \langle \hat{N}_e \rangle / N = \frac{1}{N} \sum_{f\sigma} \langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma} \rangle, \\ 0 &\leq n \leq 1. \end{aligned} \quad (22)$$

Для хаббардовских электронов из (21) и (22) следует уравнение, определяющее взаимосвязь концентрации n с химпотенциалом μ' :

$$\frac{n}{2-n} = \frac{1}{N} \sum_k f(\xi_k). \quad (23)$$

Специфика хаббардовских электронных состояний такова: при температуре $\tau = 0$ при заданной концентрации n в каждом «заполненном» k -состоянии с энергией $\varepsilon_k = c\omega_k \leq \mu' = \varepsilon_F$ находится $(1 - n/2)$ электронов со спином «вверх» и столько же электронов со спином «вниз», т.е. k -состояние содержит $(2 - n)$ электронов. При $n \ll 1$ хаббардовские электроны являются почти свободными, однако при $n \rightarrow 1$ в заполненном k -состоянии находится менее 0,5 электрона с каждой спиновой проекцией. Очевидно, что при $n = 1$ все k -состояния заняты, т.е. $[f(\xi_k)]_{n=1} = 1$ для всех k . Это означает, что фермиевские степени свободы исчезают.

В верхней хаббардовской зоне уравнение для квазифермиевского оператора имеет вид

$$\begin{aligned} [X_k^{\bar{\sigma}2}, h_{(Up)}] &= \xi_k X_k^{\bar{\sigma}2} + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p (\omega_p + \frac{g}{2} \omega_{k-p}) X_{k-p}^{\bar{\sigma}\sigma} X_p^{\sigma 2} + \\ &+ \frac{g}{2} \eta(\sigma) \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p \omega_{k-p} S_{k-p}^z X_p^{\bar{\sigma}2}, \end{aligned} \quad (24)$$

где $\xi_k = C\omega_k - \mu^*$, $C(x) = (1+x)/2$. Выделенный линейный член этого уравнения соответствует приближению «Хаббард I». Гриновская функция для хаббардовских электронов в верхней зоне равна

$$\langle\langle X_k^{\sigma 2} | X_k^{2\sigma} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{\langle\{X_k^{\sigma 2}, X_k^{2\sigma}\}\rangle}{\omega - \xi_k} = \frac{C(x)}{\omega - \xi_k}. \quad (25)$$

По спектральной теореме находим

$$\langle X_k^{2\sigma} X_k^{\sigma 2} \rangle = C(x) f(\xi_k),$$

где $f(\xi_k)$ — фермиевская функция распределения двоек. Поскольку

$$\frac{1}{N} \sum_k \langle X_k^{2\sigma} X_k^{\sigma 2} \rangle = \frac{1}{N} \sum_f \langle X_f^{22} \rangle = x,$$

из этих соотношений находим уравнение для химпотенциала μ

$$\frac{x}{C(x)} = \frac{1}{N} \sum_k f(\varepsilon_k - \mu), \quad (26)$$

$$\varepsilon_k = C(x)\omega_k, \quad C(x) = \frac{1}{2}(1+x).$$

Далее индексы у химпотенциала будем опускать.

3. Динамическая магнитная восприимчивость и функции Грина

Если на систему действует периодическое неоднородное магнитное поле $\propto \exp(-i\omega t)$, то фурье-компоненты этого поля $\mathbf{H}(q, \omega)$ и вызванные ими фурье-компоненты магнитного момента $\mathbf{M}(q, \omega)$ в линейном приближении связаны соотношением

$$M^\alpha(q, \omega) = \sum_\beta \chi^{\alpha\beta}(q, \omega) H^\beta(q, \omega),$$

где $\chi^{\alpha\beta}(q, \omega)$ — динамическая магнитная восприимчивость, $\alpha, \beta = x, y, z$ или $+, -, z$. Восприимчивость — функция параметров системы и температуры и выражается через коммутаторную функцию Грина, построенную на фурье-компонентах оператора магнитного момента [4]:

$$\chi^{\alpha\beta}(q, \omega) = -\langle\langle M^\alpha(q) | M^\beta(-q) \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \quad (27)$$

Далее будем рассматривать безразмерные восприимчивости, поперечную и продольную:

$$\chi^{+-}(q, \omega) = -\langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon},$$

$$\chi^{zz}(q, \omega) = -\langle\langle S_q^z | S_{-q}^z \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon}, \quad (28)$$

построенные на фурье-компонентах спиновых операторов.

В t - J -модели (нижняя зона) система при электронной концентрации $n < 1$ является металлом, а при $n = 1$ — диэлектриком с локализованными спинами. В металлическом состоянии электронная составляющая спиновой плотности

$$(S_q^+)^{\text{el}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow} \quad (29)$$

формируется из квазифермиевских операторов рождения и уничтожения, действующих на волновую функцию системы в k -представлении. Суммирование в (29) проводится по всем k -состояниям в 1-й зоне Бриллюэна. Поскольку существует ферми-поверхность, ненулевой результат действия оператора (29) на волновую функцию имеет место, когда (при нулевой температуре) состояния $|k+q, \downarrow\rangle$ заняты, а

состояния $|k, \uparrow\rangle$ свободны. В пределе $n = 1$ все k -состояния заняты и с физической точки зрения действие оператора (29) на волновую функцию полностью заполненной зоны Бриллюэна дает нуль.

В представлении локализованных спинов имеем фурье-образ спинового оператора

$$(S_q^+)^{\text{loc}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{iqf} S_f^+, \quad (30)$$

где суммирование проводится по всем узлам f решетки, хотя в общем случае при $n < 1$ имеются дырки — пустые узлы. Этот оператор действует на волновую функцию в конфигурационном представлении. Очевидно, что в пределе $n = 1$ вклад (30) максимален и восприимчивость системы — это восприимчивость локализованных спинов.

Представления (29) и (30) формально различны по своему «генетическому происхождению», однако следует принять во внимание тот факт, что эти операторы описывают *одни и те же электроны*, которые принимают участие в двух процессах — перескоках (t) и обмене (J). Легко показать, что оба эти представления эквивалентны. Действительно, поскольку

$$X_{k\uparrow}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{-ikm} X_m^{\uparrow 0},$$

$$X_{k+q\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{i(k+q)f} X_f^{0\downarrow},$$

после подстановки этих выражений в (29) и использования правила сумм получаем

$$(S_q^+)^{\text{el}} = (S_q^+)^{\text{loc}} = S_q^+.$$

В верхней хаббардовской зоне электронное представление спинового оператора имеет вид

$$(S_q^+)^{\text{el}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k X_{k+q}^{\uparrow 2} X_k^{2\downarrow} \quad (31)$$

и по-прежнему эквивалентно локализованному представлению.

4. Приближение случайных фаз

Магнитную восприимчивость металла обычно рассчитывают в ПСФ (RPA). Здесь мы используем представление (29) для фурье-образа спинового оператора в нижней зоне. ПСФ стандартно: уравнение для оператора индивидуального возбуждения с переворотом спина

$$i \frac{d}{dt} (X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow}) = (\xi_{k+q} - \xi_k) X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow} + X_{k\uparrow}^+ Y_{k+q\downarrow} - Y_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow} \quad (32)$$

линеаризуется путем спариваний «внешних» операторов $X_{k\uparrow}^+$ и $X_{k+q\downarrow}$. В этом приближении при вычислении поперечной гриновской функции дают вклад только R -операторы (учет L -операторов выходит за рамки ПСФ). Тогда уравнение для функции Грина

$$\omega \langle\langle X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow} | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega = \langle [X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow}, S_{-q}^-] \rangle + \langle\langle i \frac{d}{dt} (X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow}) | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega$$

имеет приближенное решение

$$\langle\langle X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow} | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega^{RPA} = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{(n_k - n_{k+q}) + E_{kq} \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)}, \quad (33)$$

где

$$\langle X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma} \rangle = n_k = c f_k, \quad \varepsilon_k = c \omega_k, \quad (34)$$

$$E_{kq} = \omega_k n_k - \omega_{k+q} n_{k+q} + \frac{g}{2} (n_{k+q} - n_k) \omega_q.$$

После суммирования в соответствии с (29) получаем

$$\langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega^{RPA} = \frac{G_0(q, \omega)}{1 - G_1(q, \omega)} \equiv G_{RPA}(q, \omega), \quad (35)$$

$$G_0(q, \omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{n_k - n_{k+q}}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)},$$

$$G_1(q, \omega) = P(q, \omega) - \frac{g}{2} \omega_q G_0(q, \omega), \quad (36)$$

$$P(q, \omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\varepsilon_k f_k - \varepsilon_{k+q} f_{k+q}}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)}.$$

Следует отметить, что в результате использования ПСФ получается замкнутое выражение (35) для поперечной функции Грина с представлением спиновой плотности в виде (29). В ПСФ частично учтены обменные эффекты — они входят в выражение для G_1 . Функция $P(q, \omega)$ отражает наличие в системе кинематического взаимодействия.

При вычислении продольной функции Грина с z -составляющей спиновой плотности

$$(S_q^z)^{el} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k S_{k, k+q}^z,$$

$$S_{k, k+q}^z = \frac{1}{2} (X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\uparrow} - X_{k\downarrow}^+ X_{k+q\downarrow})$$

составляется уравнение движения для оператора $S_{k, k+q}^z$, которое далее линеаризуется путем спариваний. В этом случае в ПСФ дают вклад только «продольные» нелинейные L -операторы. Можно показать, что в немагнитном состоянии

$$\langle\langle S_q^z | S_{-q}^z \rangle\rangle_\omega^{RPA} = \frac{1}{2} \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega^{RPA}. \quad (37)$$

Это соотношение для средних означает спиновую изотропность системы.

Вычисление восприимчивости в верхней хаббардовской зоне проводится аналогично: составляется уравнение для оператора $X_{k+q}^{\uparrow 2} X_k^{\downarrow 2}$, которое далее линеаризуется по вышеуказанной схеме. В результате получаем

$$\langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega^{RPA} = \frac{G_0(q, \omega)}{1 - \tilde{P}(q, \omega) + \frac{g}{2} \omega_q G_0(q, \omega)} \equiv G_{RPA}^{(Up)}(q, \omega), \quad (38)$$

$$G_0(q, \omega) = C \frac{1}{N} \sum_k \frac{f_k - f_{k+q}}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)}, \quad (39)$$

$$\tilde{P}(q, \omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\varepsilon_k (1 - f_k) - \varepsilon_{k+q} (1 - f_{k+q})}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)},$$

где $C = C(x) = (1 + x)/2$, $\varepsilon_k = C \omega_k$, $f_k = f(\varepsilon_k - \mu)$.

Анализ восприимчивости в приближении случайных фаз. В нижней хаббардовской зоне поперечную динамическую восприимчивость, вычисленную в ПСФ, в соответствии с (35) и (36) представим в виде ($\chi_0 = -G_0$):

$$\chi_{RPA}(q, \omega + i\alpha) = \frac{\chi_0(q, \omega + i\alpha)}{1 - P(q, \omega + i\alpha) - \frac{g}{2} \omega_q \chi_0(q, \omega + i\alpha)}, \quad (40)$$

$$\alpha \rightarrow +0.$$

Статическую восприимчивость ($\omega = 0$) проанализируем в двух пределах: 1) $q \rightarrow 0$ и 2) $q = Q$ при наличии условия $\varepsilon_{k+Q} = -\varepsilon_k$ (например, в квадратной решетке $Q = (\pi, \pi)$). Температуру полагаем равной нулю, параметр α будем опускать, имея в виду, что некоторые возникающие суммы (интегралы) понимаются в смысле главного значения.

1. В пределе $q \rightarrow 0$, разлагая в ряд по малому значению q функции ε_{k+q} и $f(\varepsilon_{k+q} - \mu)$, получаем

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi_0(q, 0) \equiv \chi_0 = c \frac{1}{N} \sum_k \left(-\frac{\partial f(\xi_k)}{\partial \varepsilon_k} \right) = c \frac{1}{N} \sum_k \delta(\varepsilon_k - \mu) = c D(\mu) = D(\mu_{eff}), \quad (41)$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi_{RPA}(q,0) \equiv \chi_{RPA}(0,0) = \frac{D(\mu_{\text{eff}})}{\frac{1-n}{1-n/2} + (\mu_{\text{eff}} + \frac{g}{2})D(\mu_{\text{eff}})}; c = \frac{1-x}{2}. \quad (42)$$

Здесь $D(\omega)$ — плотность состояний, соответствующая закону дисперсии ω_k , $\mu_{\text{eff}} = \mu/c$ — эффективный химпотенциал, который изменяется в пределах $-1 \leq \mu_{\text{eff}} \leq 1$, как и заграочный спектр ω_k . Поскольку $\varepsilon_k = c\omega_k$, то $\mu D(\mu) = \mu_{\text{eff}} D(\mu_{\text{eff}})$. Концентрационная зависимость восприимчивости устанавливается в силу соотношения (23), которое представимо в виде

$$\frac{n}{2-n} = J(\mu_{\text{eff}}) = \int_{-1}^{\mu_{\text{eff}}} D(\omega) d\omega, \quad n = n(\mu_{\text{eff}}) = \frac{2J(\mu_{\text{eff}})}{1+J(\mu_{\text{eff}})}. \quad (43)$$

2. В пределе $q = Q$ получаем

$$\chi_{RPA}(Q,0) \equiv \tilde{\chi}_{RPA} = \frac{\tilde{\chi}_0(\mu_{\text{eff}})}{\frac{1-n}{1-n/2} - \frac{g}{2}\tilde{\chi}_0(\mu_{\text{eff}})}, \quad (44)$$

$$\tilde{\chi}_0(\mu_{\text{eff}}) = P \int_{|\mu_{\text{eff}}|}^1 \frac{D(\omega)}{\omega} d\omega.$$

В верхней хаббардовской зоне ПСФ-восприимчивость имеет вид

$$\chi_{RPA}^{(Up)}(q,\omega) = \frac{\chi_0(q,\omega)}{1 - \tilde{P}(q,\omega) - \frac{g}{2}\omega q \chi_0(q,\omega)}. \quad (45)$$

Статическая восприимчивость и ее пределы при $q \rightarrow 0$, $q = Q$ и концентрационная зависимость вычисляются аналогично.

На рис. 1 приведены результаты вычисления концентрационной зависимости восприимчивости $\chi_{RPA}(0,0) \equiv \chi_{RPA}$ и $\chi_{RPA}(Q,0) \equiv \tilde{\chi}_{RPA}$ в нижней хаббардовской зоне в квадратной решетке (плотность состояний $D(\omega)$ имеет логарифмическую расходимость при $\mu_{\text{eff}} = 0$). Отметим, что имеется симметрия частица — дырка: выражения для восприимчивости в верхней зоне являются зеркальными относительно вертикали, соответствующей концентрации электронов $n = 1$, т.е. $\chi_{(L)}(1-x) = \chi_{(Up)}(1+x)$. В обоих случаях концентрации $x = 1/3$ соответствуют нулевому значению химпотенциала $\mu = \mu_{\text{eff}} = 0$.

5. Восприимчивость локализованных спинов

При электронной концентрации $n = 1$ имеем систему локализованных спинов ($s = 1/2$), которая описывается гамильтонианом Гейзенберга h_{ex} с антиферромагнитными обменными взаимодействиями между ближайшими соседями. В трехмерной альтернантной решетке реализуется антиферромагнитное (АФ) основное состояние. В работах автора [5–7] такая система описана как спиновая жидкость с основным синглетным состоянием. Этот подход достаточно общий, ибо применим и к квадратной решетке (в которой дальний магнитный порядок отсутствует при $T \neq 0$), и к ГЦК решетке (где фрустрации и квантовые флуктуации разрушают АФ), и даже к альтернантным трехмерным ПК и ОЦК решеткам (для которых СЖ состояние оказывается энергетически выгоднее АФ). В СЖ состоянии спиновые корреляционные функции знакопеременны, как и в антиферромагнетике, но убывают с расстоянием, так что в СЖ существует ближний АФ порядок.

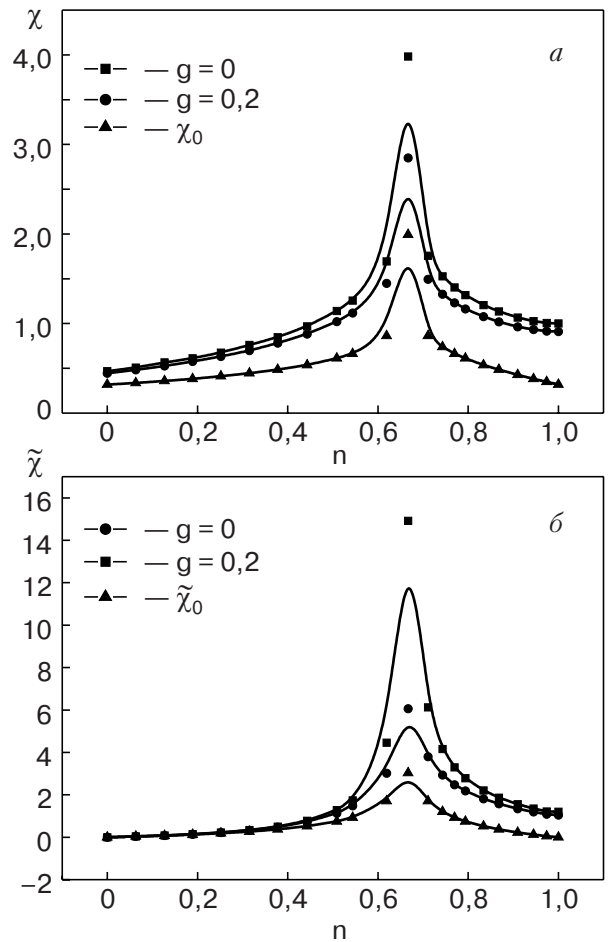


Рис. 1. Статическая восприимчивость (в ПСФ) при $q = 0$ (а) и $q = Q = (\pi, \pi)$ (б) в нижней хаббардовской зоне в квадратной решетке в зависимости от концентрации электронов n .

Если в системе имеются дырки с концентрацией x (нижняя хаббардовская зона) или дополнительные электроны с концентрацией x , т.е. двойки в верхней хаббардовской зоне, то, вообще говоря, имеем магнитоупорядоченную систему с символической формулой $M_{1-x}O_x$, где M — символ магнитоактивного (однократно заполненного) узла со спином $s = 1/2$, O — дырка или двойка. Электронные перескоки эквивалентны движению дырок (двоек). В рассматриваемой модели из-за условия запрета новые дырки и двойки не образуются, так что x — заданный макропараметр системы.

При построении теории неупорядоченных систем проводится конфигурационное усреднение по всем возможным состояниям. Вследствие движения дырок (двоек), которое описывается гамильтонианом h_{kin} , эти магнитные «дефекты» распределены в среднем пространственно однородно. По этой причине можно считать, что вычисляемые физические величины самоусредняются.

Ниже приведено описание модели в нижней зоне с концентрацией магнитоактивных узлов n в приближении «виртуального кристалла», когда процессами рассеяния коллективных спиновых возбуждений на дефектах (дырках) пренебрегаем.

Глобальная связность системы по обменным взаимодействиям существует при $n_c < n \leq 1$ и характеризуется мощностью бесконечного кластера $P(n)$ [3]. Характеристики n и $P(n)$ будут использованы при самосогласованном расчете свойств спиновой системы.

Чтобы избежать ссылок на работы [5–7], приведем основные уравнения и результаты теории спиновой жидкости. Уравнения 1-го порядка для спиновых операторов стандартны:

$$i\dot{S}_f^+ = [S_f^+, gh_{\text{ex}}] = gA_f, \quad (46)$$

$$A_f = \frac{1}{z} \sum_{\Delta} (S_f^z S_{f+\Delta}^+ - S_{f+\Delta}^z S_f^+),$$

$$i\dot{S}_f^z = [S_f^z, gh_{\text{ex}}] = g \frac{1}{2z} \sum_{\Delta} (S_f^+ S_{f+\Delta}^- - S_{f+\Delta}^+ S_f^-).$$

Поскольку в СЖ состоянии $\langle S_f^\alpha \rangle = 0$, $\alpha = \pm, z$, то для построения теории необходимо уравнение 2-го порядка

$$[[S_f^+, gh_{\text{ex}}], gh_{\text{ex}}] = g[A_f, gh_{\text{ex}}] = g^2 B_f, \quad (47)$$

$$B_f = \frac{1}{z^2} \sum_{\Delta\Delta'} \left\{ \frac{1}{2} (S_f^+ S_{f+\Delta'}^- - S_{f+\Delta'}^+ S_f^-) S_{f+\Delta}^+ - S_{f+\Delta}^z (S_f^z S_{f+\Delta'}^+ - S_{f+\Delta'}^z S_f^+) + \right. \\ \left. + S_f^z (S_{f+\Delta}^z S_{f+\Delta-\Delta'}^+ - S_{f+\Delta-\Delta'}^z S_{f+\Delta}^+) - \frac{1}{2} (S_{f+\Delta}^+ S_{f+\Delta-\Delta'}^- - S_{f+\Delta-\Delta'}^+ S_{f+\Delta}^-) S_f^+ \right\}. \quad (48)$$

Осуществляя фурье-преобразование операторов, получаем уравнения для функций Грина

$$\omega \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega = g \langle\langle A_q | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega, \\ \omega \langle\langle A_q | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega = \langle[A_q, S_{-q}^-]\rangle + g \langle\langle B_q | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega$$

или

$$\omega^2 \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega = g \langle[A_q, S_{-q}^-]\rangle + g^2 \langle\langle B_q | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega, \quad (49)$$

где

$$\langle[A_q, S_{-q}^-]\rangle = K_1(1 - \gamma_q), \\ \frac{1}{2} K_1 = - \langle S_f^+ S_{f+\Delta}^- \rangle = - \frac{1}{z} \sum_{\Delta} \langle S_f^+ S_{f+\Delta}^- \rangle > 0. \quad (50)$$

Линеаризация оператора B_q (см. Приложение 1)

$$B_q \approx (B_q)_{\text{lin}} = \Omega_q^2 S_q^+, \quad (51) \\ \Omega_q^2 = \lambda^2 (1 - \gamma_q)(1 + \gamma_q + d)$$

приводит к замыканию цепочки уравнений, и в результате получаем функцию Грина в виде

$$\langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_\omega^{SL} \equiv G_{SL}(q, \omega) = \frac{gK_1(1 - \gamma_q)}{\omega^2 - g^2\Omega_q^2}. \quad (52)$$

Эта функция зависит от трех априори неизвестных параметров K_1 , λ и d , являющихся функциями концентрации и температуры. Они должны вычисляться самосогласованно.

На основании спектральной теоремы находим фурье-образ корреляционной функции

$$\langle S_q^+ S_{-q}^- \rangle \equiv \frac{1}{2} K(q), \quad (53)$$

$$K(q) = \frac{K_1}{\lambda} \frac{1 - \gamma_q}{E_q(d)} \coth \left(\frac{g\lambda E_q(d)}{2\tau} \right),$$

где спектр представлен в виде $\Omega_q = \lambda E_q(d)$, $\tau = \Theta/zt$ — температура в безразмерных единицах.

Самосогласованное вычисление параметров основано, в первую очередь, на правиле сумм

$$K_0 = n = \frac{1}{N} \sum_q K(q), \quad R = 0, \quad (54)$$

где n — концентрация магнитоактивных узлов. Далее мы постулируем, что пространственные корреляционные функции должны отражать связность системы по обменным взаимодействиям через мощность бесконечного кластера $P(n)$, т.е.

$$\begin{cases} n = \frac{K_1}{\lambda} I_0(d), & I_0(d) = \int_{-1}^1 D(\gamma) \frac{1-\gamma}{E(\gamma,d)} d\gamma, & E(\gamma,d) = \sqrt{(1-\gamma)(1+\gamma+d)}, \\ K_1 = P(n) \frac{K_1}{\lambda} I_1(d), & I_1(d) = \int_{-1}^1 D(\gamma)(-\gamma) \frac{1-\gamma}{E(\gamma,d)} d\gamma. \end{cases} \quad (56)$$

В этих формулах мы перешли от суммирования по зоне Бриллюэна к интегрированию с плотностью состояний $D(\gamma)$, соответствующей закону дисперсии γ_q .

Решением системы является

$$K_1 = nP(n) \frac{I_1(d)}{I_0(d)}, \quad \lambda = P(n)I_1(d). \quad (57)$$

Для самосогласованного нахождения параметра d в работах [5–7] предложен метод моментов. При $n = 1$ было показано, что в альтернативных решетках существует решение $d = 0$. Тогда спектр возбуждений Ω_q относительно основного синглетного состояния аналогичен спектру АФ магнонов и отличается лишь параметром «жесткости» λ . При $n \neq 1$ (вместо самосогласованного вычисления параметра $d(n)$, что выходит за рамки задач данной статьи) ограничимся феноменологическим моделированием, считая $d(n) \propto (1-n)^\beta$.

Статическая восприимчивость спиновой жидкости (SL) равна

$$\begin{aligned} \chi_{SL}(q,0) &= -G_{SL}(q,0) = \frac{gK_1(1-\gamma_q)}{g^2\Omega_q^2} = \\ &= \frac{1}{gI_0I_1} \frac{n}{P(n)} \frac{1}{1+\gamma_q+d(n)}. \end{aligned} \quad (58)$$

Расходимость восприимчивости спиновой жидкости при $n = 1$ ($d = 0$) для значения $q = Q$ свидетельствует о существовании бесконечной корреляционной длины антиферромагнитного типа. В окрестности порога протекания требуется более тщательное рассмот-

$$K_R = P(n) \frac{1}{N} \sum_q e^{iqR} K(q), \quad R \neq 0 \quad (55)$$

(напомним, что f, R — векторы, $K_R = K_{-R}$). Проведем вычисления при нулевой температуре (гиперболический котангенс равен единице). В соотношении (55) положим $R = \Delta$ и в соответствии с определением (50) сформируем коррелятор K_1 . Тогда из (54) и (55) получаем систему уравнений

рение, ибо существенными становятся процессы рассеяния. Тем не менее расходимость в (58) при $n \rightarrow n_c$, $P(n) \rightarrow 0$ с физической точки зрения вполне разумна: на пороге протекания спиновая система представляет собой совокупность независимых кластеров и отдельных спинов, восприимчивость такой системы при $T = 0$ стремится к бесконечности.

6. Восприимчивость системы в теории 2-го порядка

В этом разделе вычислена поперечная восприимчивость системы в области концентраций $n_c < n \leq 1$. Наличие перескоков электронов с занятых узлов на пустые не меняет глобальных свойств бесконечного кластера, обеспечивающего связность системы по узлам. По-прежнему считаем, что система находится в немагнитном (синглетном) состоянии, когда $\langle S_f^\alpha \rangle = 0$, $\alpha = \pm, z$.

Уравнение 1-го порядка. Уравнение для локализованного спинового оператора S_f^+ имеет вид

$$\begin{aligned} i\dot{S}_f^+ &= [S_f^+, h_{\text{kin}} + gh_{\text{ex}}] = \\ &= \frac{1}{z} \sum_{\Delta} \left(X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} X_f^{0\downarrow} - X_f^{\uparrow 0} X_{f+\Delta}^{0\downarrow} \right) + gA_f. \end{aligned} \quad (59)$$

Из (59) следует, что оператор h_{kin} «разваливает» локализованный спиновый оператор на произведение квазифермиевских операторов. На основе уравнения (59) (после его фурье-преобразования) получаем точное уравнение для функции Грина:

$$\omega \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega = \frac{1}{\sqrt{N}} \times \\ \times \sum_k (\omega_{k+q} - \omega_k) \langle \langle X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow} | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega + g \langle \langle A_q | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega, \quad (60)$$

где A_q — фурье-образ оператора A_f . Гриновская функция под знаком суммы в уравнении (60) найдена ранее в ПСФ. Согласованность вычислений достигается (в этом можно убедиться с помощью предельного перехода к случаю $g = 0$), когда

$$(\omega_{k+q} - \omega_k) \langle \langle X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow} | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega \approx \\ \approx (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \langle \langle X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow} | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega^{RPA}, \quad (61)$$

где $\varepsilon_k = c\omega_k$ и функция Грина в ПСФ определена формулой (33). После подстановки (61) и (33) в (60) и несложных преобразований получаем

$$\omega \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega \approx \\ \approx \omega [G_0(q, \omega) + G_1(q, \omega) \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega] + g \langle \langle A_q | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega. \quad (62)$$

Уравнение 2-го порядка. Поскольку в постулированном немагнитном состоянии оператор A_f не линеаризуется, для него необходимо записать уравнение движения:

$$i\dot{A}_f = [A_f, h_{\text{kin}}] + g[A_f, h_{\text{ex}}] \equiv M_f + gB_f. \quad (63)$$

Здесь

$$M_f = \frac{1}{z^2} \sum_{\Delta\Delta'} \{ F_{f+\Delta, f}^z F_{f+\Delta}^+ - S_{f+\Delta}^z F_{f+\Delta, f}^+ + \\ + S_f^z F_{f+\Delta-\Delta', f+\Delta}^+ - F_{f+\Delta-\Delta', f+\Delta}^z S_f^+ \}, \quad (64)$$

где

$$F_{fm}^+ = X_f^{\uparrow 0} X_m^{0\downarrow} - X_m^{\uparrow 0} X_f^{0\downarrow}, \\ F_{fm}^z = \frac{1}{2} [(X_f^{\uparrow 0} X_m^{0\uparrow} - X_m^{\uparrow 0} X_f^{0\uparrow}) - \\ - (X_f^{0\downarrow} X_m^{0\downarrow} - X_m^{0\downarrow} X_f^{0\downarrow})], \quad (65)$$

а оператор B_f определен формулой (48). Как видно из (64) и (65), оператор M_f является оператором смешанного вида и содержит произведения локализованных спиновых операторов и квазифермионских операторов, тогда как оператор B_f — произведения только локализованных спиновых операторов. Проведем фурье-преобразование уравнения (63) и на его основе получим уравнение для функции Грина:

$$\omega \langle \langle A_q | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega = K_1(1 - \gamma_q) + \langle \langle M_q | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega + \\ + g \langle \langle B_q | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega. \quad (66)$$

Уравнение (66) — второе в цепочке зацепляющихся уравнений. Для обрыва и замыкания цепочки необходима линеаризация этого уравнения. Процедура линеаризации операторов B_f и M_f изложена в Приложениях 1 и 2. После фурье-преобразования этих операторов получаем функции Грина в виде

$$\langle \langle M_q | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega \approx \langle \langle (M_q)_{\text{lin}} | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega \approx \\ \approx \frac{|\varepsilon|}{z} (1 - \gamma_q) [G_0 - (1 - G_1) \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega], \quad (67)$$

$$\langle \langle B_q | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega \approx \langle \langle (B_q)_{\text{lin}} | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega = \Omega_q^2 \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega, \quad (68)$$

где $|\varepsilon| = |\varepsilon(n)|$ — модуль кинетической энергии электронов (на узел решетки), причем $\varepsilon(0) = \varepsilon(1) = 0$, Ω_q — спектр коллективных спиновых возбуждений относительно основного синглетного состояния (см. разд. 5). Функция Грина $\langle \langle (M_q)_{\text{lin}} | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega$ — «связующее звено» между результатами в ПСФ и для спиновой жидкости.

Используя результаты (67), (68), перепишем уравнение (66) в виде

$$\omega \langle \langle A_q | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega \approx K_1(1 - \gamma_q) + \frac{|\varepsilon|}{z} (1 - \gamma_q) G_0 + \\ + \left[g\Omega_q^2 - \frac{|\varepsilon|}{z} (1 - \gamma_q)(1 - G_1) \right] \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega. \quad (69)$$

Объединяя (62) и (69), получаем решение

$$\langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle_\omega \equiv G(q, \omega) = \\ = \frac{[\omega^2 + g \frac{|\varepsilon|}{z} (1 - \gamma_q)] G_0(q, \omega) + gK_1(1 - \gamma_q)}{[\omega^2 + g \frac{|\varepsilon|}{z} (1 - \gamma_q)](1 - G_1(q, \omega)) - g^2 \Omega_q^2}. \quad (70)$$

Статическая ($\omega = 0$) восприимчивость имеет вид

$$\chi(q, 0) = -G(q, 0) = \frac{\beta\chi_0(q, 0) - K_1}{\beta(1 - G_1(q, 0)) - g\lambda^2(1 + \gamma_q + d)}, \\ \beta = \frac{|\varepsilon|}{z}, \quad g \neq 0. \quad (71)$$

Обратную статическую восприимчивость можно представить как комбинацию обратных статических восприимчивостей $\chi_{RPA}^{-1} = (1 - G_1)/\chi_0$ и $\chi_{SL}^{-1} = g\lambda^2(1 + \gamma_q + d)/K_1$:

$$\begin{aligned} \chi^{-1} &= \frac{\beta\chi_0\chi_{RPA}^{-1} - K_1\chi_{SL}^{-1}}{\beta\chi_0 - K_1} = \\ &= \frac{\chi_{RPA}^{-1}}{1 - (K_1/\beta\chi_0)} + \frac{\chi_{SL}^{-1}}{1 - (\beta\chi_0/K_1)}. \end{aligned} \quad (72)$$

Из (71), (72) следуют предельные случаи: пренебрегая спиновыми корреляциями ($K_1 = 0$), получаем

$\chi^{-1} = \chi_{RPA}^{-1}$, а при $n = 1$ кинетическая энергия обращается в нуль ($\beta = 0$) и тогда $\chi^{-1} = \chi_{SL}^{-1}$. Напомним, что в данной теории $K_1 = \lambda \equiv 0$ ниже порога протекания ($n < n_c \approx 0,5$), так что в этой области $\chi = \chi_{RPA}$.

Статическую восприимчивость в двух предельных случаях $q = 0$ и $q = Q$ представим в явном виде:

$$\chi(0,0) = \frac{\beta(n)D(\mu_{\text{eff}}) - nP(n)I_1(n)/I_0(n)}{\beta(n)\left[\frac{1-n}{1-n/2} + (\mu_{\text{eff}} + \frac{g}{2})D(\mu_{\text{eff}})\right] - gP^2(n)I_1^2(n)(2+d(n))}, \quad (73)$$

$$\chi(Q,0) = \frac{\chi_0(Q,0) - [nP(n)I_1(n)/I_0(n)]/\beta(n)}{\left[\frac{1-n}{1-n/2} - \frac{g}{2}\chi_0(Q,0)\right] - gP^2(n)I_1^2(n)\frac{d(n)}{\beta(n)}}, \quad (74)$$

где все функции зависят от концентрации n , в том числе и эффективный химпотенциал μ_{eff} .

Числитель (73) изменяет знак при концентрации n_1 и остается отрицательным при $n > n_1$; знаменатель обращается в нуль при концентрации n_2 и остается отрицательным при $n \rightarrow 1$; в области $n_1 < n < n_2$ восприимчивость $\chi(0,0) < 0$ (диамагнитный эффект). Аналогично поведение восприимчивости (74), однако область диамагнетизма, где $\chi(Q,0) < 0$, другая: $\tilde{n}_1 \leq n \leq \tilde{n}_2$.

Для расчета восприимчивостей использованы следующие модельные представления:

$$P(n) = 1 - \left(\frac{1-n}{1-n_c}\right)^4, \quad n_c = 0,5, \quad d(n) = 1 - n.$$

На рис. 2 представлены графики статической восприимчивости $\chi(0,0)$ и $\chi(Q,0)$ в квадратной решетке (плотность состояний $D(\mu_{\text{eff}})$ имеет логарифмическую расходимость при химпотенциале $\mu_{\text{eff}} = 0$ и соответствующей концентрации $n = 2/3$); особенности плотности состояний проявляются в поведении восприимчивости. При $n \rightarrow 1$ восприимчивость $\chi(Q,0) \propto 1/(1-n)$ и ее расходимость свидетельствует о дальних спиновых корреляциях антиферромагнитного типа [5,7]. Следует обратить внимание, что обнаруженный диамагнитный эффект является реакцией системы с основным синглетным состоянием на пространственно неоднородное «скачущее» магнитное поле с амплитудой $\propto \exp(iQf)$, где f — узел решетки.

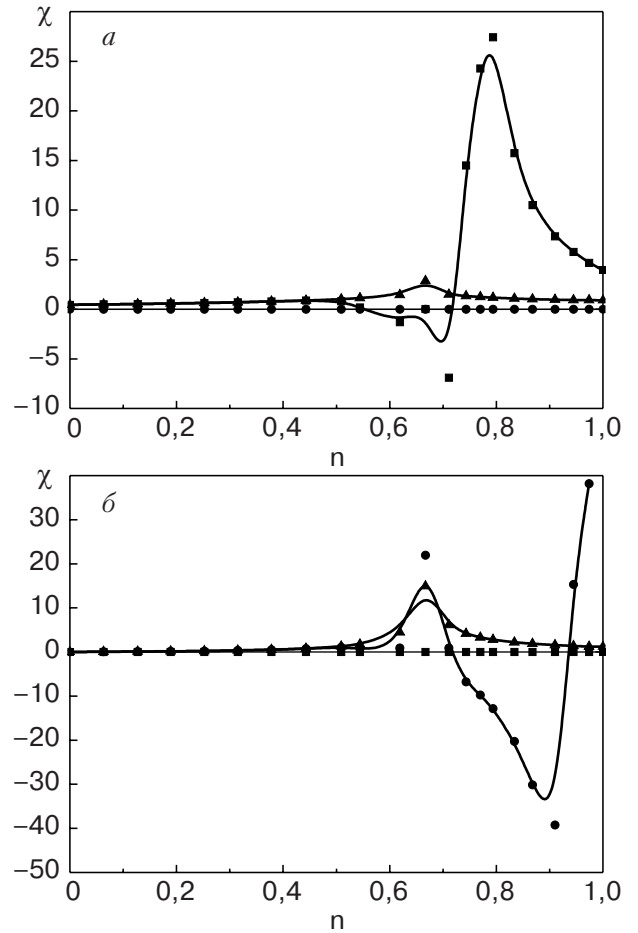


Рис. 2. Общая статическая восприимчивость $\chi(q,0)$ при $q = 0$ (а) и $q = Q = (\pi, \pi)$ (б) в квадратной решетке в нижней хаббардовской зоне в зависимости от электронной концентрации при $g = 0,2$; для сравнения приведена восприимчивость $\chi_{RPA}(q,0)$ (\blacktriangle).

Заключение

Сильные электронные корреляции проявляются в t - J -модели прежде всего в условиях запрета на появление двоек в нижней зоне и дырок в верхней, что приводит к специфике электронных состояний (характер заполнения зон, наличие кинематического взаимодействия). Полагается, что система находится в немагнитном (синглетном) основном состоянии при всех электронных концентрациях. Наличие антиферромагнитного обмена J и кинематических t -взаимодействий приводит к тому, что поперечная динамическая восприимчивость существенно отличается как от паулиевской восприимчивости свободных электронов, так и от восприимчивости независимых локализованных спинов.

В системе имеются две ветви возбуждений: индивидуальные возбуждения с образованием электронно-дырочных пар относительно ферми-поверхности (как с переворотом спина, так и без) и коллективные спиновые возбуждения относительно основного синглетного состояния. В этих процессах принимают участие одни и те же электроны, и разделение их на две группы (коллективизированных и локализованных) в общем случае невозможно. Их свойства в определенном смысле «перепутываются», приводя к своеобразному поведению восприимчивости. Именно в той промежуточной области, где максимально проявляется дуализм коллективизация — локализация, возникает диамагнитный эффект.

Если расчеты в ПСФ достаточно стандартные, то теория СЖ с подвижными дырками находится в начальной стадии разработки. В работе постулирована версия о том, что коллективные спиновые возбуждения существуют в случае протекания по узлам. На данном этапе описания принято приближение «виртуального кристалла» с пренебрежением процессами рассеяния. Отсюда следует необходимость построения более строгой теории СЖ и ее органи-

ческого включения в описание восприимчивости t - J -модели.

Приложение 1

Линеаризация оператора B_f

В операторе B_f под знаком суммы выделяются члены с $\Delta = \Delta'$, что приводит к двухцентровым слагаемым, и тогда при $\Delta \neq \Delta'$ в сумме остаются 3-центровые операторы, т.е.

$$B_f = B_f^{(2)} + B_f^{(3)}. \quad (\text{П1.1})$$

При вычислении $B_f^{(2)}$ положим $X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow} \approx n$, где n — концентрация электронов, что дает

$$B_f^{(2)} \approx \frac{1}{2} \frac{n}{z} \frac{1}{z} \sum_{\Delta} (S_f^+ - S_{f+\Delta}^+). \quad (\text{П1.2})$$

Произведение 3-центровых операторов линеаризуется по схеме

$$\begin{aligned} S_f^+ S_{f+\Delta}^- S_{f+\Delta}^+ &\rightarrow \\ \rightarrow \alpha_{|\Delta-\Delta'|} \langle S_{f+\Delta}^- S_{f+\Delta}^+ \rangle S_f^+ &= \frac{1}{2} \alpha_{\Delta-\Delta'} K_{\Delta-\Delta'} S_f^+, \\ S_f^z S_{f+\Delta}^z S_{f+\Delta-\Delta'}^+ &\rightarrow \\ \rightarrow \alpha_{\Delta} \langle S_f^z S_{f+\Delta}^z \rangle S_{f+\Delta-\Delta'}^+ &= \frac{1}{4} \alpha_{\Delta} K_{\Delta} S_{f+\Delta-\Delta'}^+. \end{aligned} \quad (\text{П1.3})$$

Корреляторы, а также параметры α_j , корректирующие расщепление (линеаризацию), зависят от модуля разности координат соответствующих операторов. Предполагается спиновая изотропность корреляторов, т.е.

$$\langle S_f^z S_{f+R}^z \rangle = \frac{1}{2} \langle S_f^+ S_{f+R}^- \rangle = \frac{1}{4} K_R. \quad (\text{П1.4})$$

После процедур типа (П1.3) получаем

$$\begin{aligned} B_f^{(3)} &\approx \frac{1}{2} \frac{1}{z^2} \sum_{\Delta \neq \Delta'} \{ \alpha_{\Delta-\Delta'} K_{\Delta-\Delta'} (S_f^+ - S_{f+\Delta}^+) - \alpha_{\Delta} K_{\Delta} (S_{f+\Delta}^+ - S_{f+\Delta-\Delta'}^+) \} = \\ &= \frac{1}{2} \left[\left(\tilde{K} + \frac{1 + \alpha_1 K_1 - n}{z} \right) \frac{1}{z} \sum_{\Delta} (S_f^+ - S_{f+\Delta}^+) + \alpha_1 K_1 \frac{1}{z^2} \sum_{\Delta, \Delta'} (S_{f+\Delta}^+ - S_{f+\Delta-\Delta'}^+) \right]. \end{aligned} \quad (\text{П1.5})$$

Здесь введены обозначения

$$\frac{1}{z} \sum_{\Delta' \neq \Delta} \alpha_{\Delta-\Delta'} K_{\Delta-\Delta'} = \tilde{K} > 0, \quad \alpha_{\Delta} = \alpha_1, \quad K_{\Delta} = -K_1, \quad K_1 > 0. \quad (\text{П1.6})$$

Объединяя (П1.2), (П1.5) и проводя фурье-преобразование, получаем

$$(B_q)_{\text{lin}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{iqf} (B_f^{(2)} + B_f^{(3)}) = \frac{1}{2} (1 - \gamma_q) \left[\left(\tilde{K} + \frac{1 + \alpha_1 K_1}{z} \right) + \alpha_1 K_1 \gamma_q \right] S_q^+ \equiv \Omega_q^2 S_q^+. \quad (\text{П1.7})$$

Далее полагаем

$$\frac{\alpha_1 K_1}{2} = \lambda^2, \quad \frac{\tilde{K} + 1/z}{\alpha_1 K_1} + \frac{1}{z} = 1 + d, \quad d \geq 0 \quad (\text{П1.8})$$

и тогда $\Omega_q^2 = \lambda^2(1 - \gamma_q)(1 + \gamma_q + d)$. Параметры K_1 , λ и d находятся самосогласованно из соответствующей системы уравнений для средних (см. [5–7]).

Приложение 2

Линеаризация оператора M_f

Оператор M_f определен соотношениями (66) и (67). Сумма (66) обращается в нуль при $\Delta = \Delta'$, так что в M_f фигурируют произведения операторов на трех разных узлах. Линеаризацию проведем по следующей схеме. Первое слагаемое в (66) под знаком суммы перепишем в виде

$$\begin{aligned} F_{f+\Delta, f}^z S_{f+\Delta}^+ &= \frac{1}{2} \left(X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} X_f^{0\uparrow} - X_f^{\uparrow 0} X_{f+\Delta}^{0\uparrow} \right) X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} X_{f+\Delta}^{0\downarrow} - X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} X_{f+\Delta}^{0\downarrow} \frac{1}{2} \left(X_{f+\Delta}^{\downarrow 0} X_f^{0\downarrow} - X_f^{\downarrow 0} X_{f+\Delta}^{0\downarrow} \right) \approx \\ &\approx \frac{1}{2} \{ X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} \langle X_f^{0\uparrow} X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} \rangle X_{f+\Delta}^{0\downarrow} - X_f^{\uparrow 0} \langle X_{f+\Delta}^{0\uparrow} X_f^{\uparrow 0} \rangle X_{f+\Delta}^{0\downarrow} - X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} \langle X_{f+\Delta}^{0\downarrow} X_{f+\Delta}^{\downarrow 0} \rangle X_f^{0\downarrow} + X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} \langle X_{f+\Delta}^{0\downarrow} X_f^{\downarrow 0} \rangle X_{f+\Delta}^{0\downarrow} \} = \\ &= C_{\Delta-\Delta'} \frac{1}{2} (X_f^{\uparrow 0} X_{f+\Delta}^{0\downarrow} + X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} X_f^{0\downarrow}) - C_{\Delta} \frac{1}{2} (X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} X_{f+\Delta}^{0\downarrow} + X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} X_{f+\Delta}^{0\downarrow}), \end{aligned} \quad (\text{П2.1})$$

$$C_{\Delta-\Delta'} = \langle X_{f+\Delta}^{\sigma 0} X_{f+\Delta}^{0\sigma} \rangle, \quad C_{\Delta} = \langle X_{f+\Delta}^{\sigma 0} X_f^{0\sigma} \rangle, \quad \Delta \neq \Delta'.$$

Здесь спиновый оператор представлен в виде произведения квазифермиевских операторов на одном узле и далее проведены спаривания. Поскольку рассматривается немагнитное состояние, то квазифермиевские корреляторы C_R не зависят от спиновой проекции и являются функциями разности координат. Аналогично линеаризуются все остальные члены. В результате происходит взаимное сокращение слагаемых, содержащих $C_{\Delta-\Delta'}$, и линеаризованный оператор имеет вид

$$\begin{aligned} (M_f)_{\text{lin}} &= \frac{1}{z^2} \sum_{\Delta \neq \Delta'} C_{\Delta} \{ (X_f^{\uparrow 0} X_{f+\Delta-\Delta'}^{0\downarrow} + X_{f+\Delta-\Delta'}^{\uparrow 0} X_f^{0\downarrow}) - \\ &- (X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} X_{f+\Delta}^{0\downarrow} + X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} X_{f+\Delta}^{0\downarrow}) \}. \end{aligned} \quad (\text{П2.2})$$

В пространственно однородной системе $C_{\Delta} \equiv C_1$ (не зависит от направления вектора Δ). Преобразуем сумму (П2.2):

$$\begin{aligned} (M_f)_{\text{lin}} &= \frac{C_1}{z^2} \sum_{\Delta, \Delta'} \{ \dots \} - \frac{C_1}{z^2} \sum_{\Delta} \{ \dots \}_{\Delta=\Delta'} = \\ &= C_1 \left[\frac{1}{z^2} \sum_{\Delta, \Delta'} \{ \dots \} - \frac{2}{z^2} \sum_{\Delta} (S_f^+ - S_{f+\Delta}^+) \right]. \end{aligned} \quad (\text{П2.3})$$

Фурье-преобразование (П2.3) приводит к

$$\begin{aligned} (M_q)_{\text{lin}} &= C_1 \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \times \right. \\ &\times \left. \sum_k (\omega_{k+q} - \omega_k)^2 X_{k\uparrow}^+ X_{k+q\downarrow} - \frac{2}{z} (1 - \gamma_q) S_q^+ \right]. \end{aligned} \quad (\text{П2.4})$$

При вычислении функции Грина $\langle\langle (M_q)_{\text{lin}} | S_{-q}^- \rangle\rangle_{\omega}$ воспользуемся результатом ПСФ (33) и тогда

$$\begin{aligned} \langle\langle (M_q)_{\text{lin}} | S_{-q}^- \rangle\rangle_{\omega} &\approx C_1 \frac{1}{N} \sum_k \frac{(\omega_{k+q} - \omega_k)^2}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)} \times \\ &\times [(n_k - n_{k+q}) + E_{kq} \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_{\omega}] - C_1 \frac{2}{z} (1 - \gamma_q) \times \\ &\times \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_{\omega} = C_1 \left\{ G_2 + \left[G_3 - \frac{2}{z} (1 - \gamma_q) \right] \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_{\omega} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{П2.5})$$

где

$$\begin{aligned} G_2 &= G_2(q, \omega) = \frac{1}{N} \sum_k (\omega_{k+q} - \omega_k)^2 \frac{n_k - n_{k+q}}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)}, \\ G_3 &= G_3(q, \omega) = \frac{1}{N} \sum_k (\omega_{k+q} - \omega_k)^2 \frac{E_{kq}}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)}. \end{aligned} \quad (\text{П2.6})$$

Возможно дальнейшее упрощение полученного выражения (П2.5). Если в (П2.6) осуществить усреднение по зоне Бриллюэна

$$(\omega_{k+q} - \omega_k)^2 \rightarrow \frac{1}{N} \sum_k (\omega_{k+q} - \omega_k)^2 = \frac{2}{z} (1 - \gamma_q),$$

то

$$G_2 \rightarrow \frac{2}{z} (1 - \gamma_q) G_0, \quad G_3 \rightarrow \frac{2}{z} (1 - \gamma_q) G_1.$$

В этом случае

$$\begin{aligned} \langle\langle (M_q)_{\text{lin}} | S_{-q}^- \rangle\rangle_{\omega} &\approx C_1 \frac{2}{z} (1 - \gamma_q) \times \\ &\times [G_0 - (1 - G_1) \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_{\omega}]. \end{aligned} \quad (\text{П2.7})$$

Следует отметить, что коррелятор

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{N} \sum_f \frac{1}{z} \sum_{\Delta} \langle X_{f+\Delta}^{\sigma 0} X_f^{0\sigma} \rangle = \\ &= -\frac{1}{N} \sum_k \omega_k \langle X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{2} |\epsilon_{\text{kin}}(n)| \equiv |\epsilon|/2, \end{aligned} \quad (\text{П2.8})$$

т.е. равен половине модуля кинетической энергии электронов (на узел) и зависит от электронной концентрации n ($\epsilon_{\text{kin}}(1) = 0$).

1. Ю.А. Изюмов, *УФН* **165**, 403 (1995).
2. С.Г. Овчинников, *УФН* **173**, 27 (2003).
3. Дж. Займан, *Модели беспорядка*, Мир, Москва (1982).
4. С.В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1976).
5. Е.В. Кузьмин, *ФТТ* **44**, 1075 (2002).
6. Е.В. Кузьмин, *ЖЭТФ* **123**, 149 (2003).
7. Е.В. Кузьмин, *ФНТ* **29**, 764 (2003).

Dynamic magnetic susceptibility in t - J model

E.V. Kuz'min

The t - J model with the constraint for creation of «doubles» in the low Hubbard zone and holes in the upper zone is considered in the regime of strong electron correlations. The peculiarity of the electron states is described. An equation for transverse susceptibility as a function of wave vector q and frequency ω , $\chi(q, \omega)$, is obtained in the random phase approximation (RPA) for the metal state of the system; the static susceptibility as a function of electron concentration n is analyzed for the case of square lattice in the limits $q = 0$ and $q = Q = (\pi, \pi)$. The dielectric limit ($n \rightarrow 1$) is described as a spin liquid (SL) state. An equation for susceptibility combining the RPA and SL conception for the case of site percolation is proposed. It is shown that for a certain concentration region the static susceptibility is negative, $\chi(Q, 0) < 0$ (diamagnetic effect); this suggests that a superconducting state with the mechanism of exchange coupling is quite possible.