

ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЯВЛЕНИЯ СТРУКТУР ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ В КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова

Институт химической физики им. Н. Н. Семенова
Российской академии наук
117977, Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 января 1997 г.

На модели Хаббарда и соответствующей $t - J$ -модели исследованы свойства коррелированных состояний со структурами валентных связей. Смешанные состояния с такими структурами и с антиферромагнитным спиновым порядком строятся с помощью унитарных локальных преобразований некоррелированных состояний и по энергии оказываются ниже антиферромагнитных решений среднего поля. Спиновые корреляции для разных степеней допирования $\delta = n - 1$ хорошо согласуются с результатами, полученными из точных расчетов конечных систем. В отличие от решений среднего поля учет корреляций типа валентных связей приводит к разумному значению критического δ , при котором исчезает дальний антиферромагнитный порядок. Вычисление спектральных функций, описывающих фотоэмиссионные спектры, показало характерную картину двух зон эффективных дырочных (и аналогично электронных) возбуждений и перенос интенсивностей в полосах при изменении квазимпульса от $(0,0)$ к (π, π) , прослеживаемый в расчетах конечных систем. Построено однородное коррелированное состояние флуктуирующих валентных связей (зонный аналог состояний флуктуирующих валентных связей) и показано, что его энергия ниже, чем энергия альтернативных структур валентных связей.

1. ВВЕДЕНИЕ

Два фактора способствуют прогрессу в изучении электронных свойств ВТСП [1]. Один из них — усовершенствование экспериментальных методов, например в исследованиях фотоэмиссионных спектров с угловым разрешением (ARPES [2–8]), спиновых корреляций с помощью нейтронного рассеяния [9] и т. д. Другой фактор — развитие численных методов расчета энергии и динамических свойств сильнокоррелированных конечных систем в рамках базовой модели Хаббарда или эквивалентной $t - J$ -модели (методы точной диагонализации или квантовый метод Монте-Карло) [1, 10, 11]. Результаты и тех, и других исследований нуждаются в интерпретации на языке более простых решений для этих же моделей с использованием одночастичных представлений при трактовке коррелированного состояния.

Решения для состояний разной электронной структуры — антиферромагнитной, спиральной [12, 13] и др. — удалось построить, исследуя модель Хаббарда методом среднего поля. Аналоги этих состояний или более сложные спиновые структуры, например киральные состояния [11, 14], предлагались и исследовались для $t - J$ -модели. В ряде работ [1, 10, 15–20] проводилось сравнение характеристик фотоэмиссионных спектров, поверхности Ферми, спиновой восприимчивости и др., получаемых из эксперимента, при численном моделировании конечных систем и антиферромагнитных решений среднего поля — обобщенного метода Хартри–Фока.

В настоящей работе мы хотим продолжить такое сравнительное исследование, распространив его на другие типы коррелированных состояний, а именно, на димерные структуры валентных связей и структуры валентных связей 4-х узлов, назовем их Q4-структурами. Первоначально состояния валентных связей были введены Андерсоном [21; 22]. Исследования альтернантных структур валентных связей проводилось в [23, 24].

Для построения коррелированных состояний со структурой валентных связей будем использовать вариационный метод унитарных локальных преобразований [24]. Он позволяет определить параметр порядка, отвечающий димерной структуре валентных связей, и провести рассмотрение при произвольном допировании. Для суждения о вкладе в точное основное состояние той или иной структуры важно знать не только энергию вариационного коррелированного состояния, но и физические характеристики, такие как форма поверхности Ферми, сигнал фотоэмиссионных спектров, спиновые корреляции. Целью данной работы является изучение физических проявлений структур валентных связей и качественное обсуждение их в связи с результатами точных расчетов конечных кластеров.

Итак, речь идет о модели Хаббарда и соответствующей ей $t - J$ -модели. Гамильтониан первой из них имеет вид

$$H = -t \sum_{\langle nm \rangle, \sigma} (c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_n U n_{n\uparrow} n_{n\downarrow} - \mu \sum_n n_n. \quad (1)$$

Моделирование плоскости CuO_2 [25, 26] в электронном представлении отвечает $t > 0$ и $n = n_e < 1$ для дырочно допированной плоскости CuO_2 .

В подпространстве функций только с однократно заполненными и незаполненными узлами модели (1) отвечает $t - J$ -модель, описываемая гамильтонианом

$$H_{t-J} = H^S + T, \quad H^S = J \sum_{\langle nm \rangle} \left(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_m - \frac{1}{4} n_n n_m \right), \quad (2)$$

$$T = -t \sum_{\langle nm \rangle, \sigma} (c_{1n\sigma}^\dagger c_{1m\sigma} + \text{H.c.}) + O\left(\frac{t^2}{U}\right), \quad (3)$$

$$J = 4t^2/U, \quad c_{1n\sigma} = c_{n\sigma}(1 - n_{n-\sigma}).$$

Ограничиваемся лишь главными членами в операторе T ; опустив трехузельные прыжковые члены $\sim t^2/U$ [11, 27] и константу, зависящую от полного числа частиц.

2. СПИНОВЫЕ СОСТОЯНИЯ НЕДОПИРОВАННОЙ $t - J$ -МОДЕЛИ

Симметрию коррелированных состояний, которые будут предметом изучения, поясним сначала на недопированной $t - J$ -модели.

Для $n = 1$ состояние $t - J$ -модели с локализацией электронов (дырок) по одному на узле описывается спиновым гамильтонианом (2). Сравним энергии $\langle H_{t-J} \rangle$ возможных локализованных состояний Ψ_{loc} с различной спиновой структурой. Они соответствуют разным решениям (см. п. 3) коррелированных состояний модели Хаббарда при конечном U/t и $n \neq 1$. Среди них следующие.

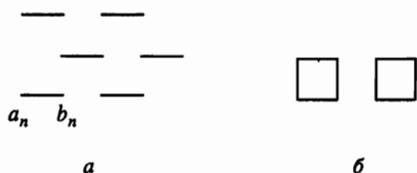


Рис. 1. Димерная структура валентных связей x -ориентации DM_x (а) и структура кластеров из 4-х узлов $Q4$ (б)

1. Неелевское состояние жесткого антиферромагнетика

$$\Psi_{loc}^{AF} = \prod_n |c_{n\sigma_n}^\dagger\rangle, \quad \sigma_n = \frac{1}{2}(-1)^{n_x+n_y} \quad (4)$$

является пределом при $U \rightarrow \infty, n \rightarrow 1$ антиферромагнитного решения среднего поля.

2. Димерное спиновое состояние — произведение синглетных компонент комплексов $\{a_n, b_n\}$:

$$\Psi_{loc}^{DM} = \prod_n \Psi_n^S(ab), \quad \Psi_n^S(ab) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma} \frac{\sigma}{|\sigma|} |a_{n\sigma}^\dagger b_{n,-\sigma}^\dagger\rangle \quad (5)$$

— отвечает парамагнитному коррелированному состоянию модели Хаббарда с димерной структурой валентных связей. Здесь n нумерует димеры.

3. Смешанное состояние с димерной и антиферромагнитной спиновой структурой достигается примешиванием триплетных компонент к спиновым функциям комплексов

$$\Psi_{loc}^{DM+AF} = \prod_n \{ \cos \gamma \Psi_n^S(ab) + \sin \gamma \Psi_n^T(ab) \} \quad (6)$$

и отвечает энергии

$$N^{-1} \langle H_{t-J} \rangle^{DM+AF} = J \left\{ -\frac{5}{8} - \frac{1}{2} \cos 2\gamma - \frac{3}{8} \sin^2 2\gamma \right\}. \quad (7)$$

4. Наконец, структуры валентных связей четырехузельных комплексов $\{a_n, b_n, c_n, d_n\}$, изображенных на рис. 1б ($Q4$ -структуры), отвечают парамагнитному или смешанному состоянию

$$\Psi_{loc}^{Q4} = \prod_n \phi_n^{L=0}, \quad (8)$$

$$\Psi_{loc}^{Q4+AF} = \prod_n \left(\sum_{L=0}^2 c_L \phi_n^L \right). \quad (9)$$

Здесь n нумерует четырехузельные кластеры, а кластерные компоненты

$$\phi_n^L = \sum_m C_{1m;1,-m}^{L,0} T_m(ac) T_{-m}(bd), \quad (10)$$

составленные из триплетов $T(ac)$ и $T(bd)$ диагональных узлов кластера, являются собственными функциями S_{ac}^2, S_{bd}^2 и суммарного спина $L^2 = (S_a + S_b + S_c + S_d)^2$ с нулевой проекцией $L_z = 0$.

Нетрудно проверить, что спиновое состояние (8) является низшим собственным состоянием внутрикластерной части гамильтониана $t - J$ -модели

$$h_{Q4} = J(S_a S_b + S_b S_c + S_c S_d + S_d S_a) = \frac{1}{2} J(L^2 - S_{ac}^2 - S_{bd}^2).$$

В предположении о дополнительном антиферромагнитном порядке среднее поле от спинов соседних кластеров приведет к примеси состояний кластеров с $L \neq 0$, т. е. к смешанному состоянию (9) с энергией

$$N^{-1} \langle H_{t-J} \rangle^{Q4+AF} = \frac{1}{4} J \left\{ -3 - c_0^2 + 2c_2^2 (\sqrt{2}c_0 + c_1)^2 \right\}, \quad (11)$$

$$c_0^2 + c_1^2 + c_2^2 = 1.$$

Средние энергии в расчете на 1 узел решетки для состояний (4-6, 8, 9) приведены в таблице. Для смешанных состояний $DM + AF$ и $Q4 + AF$ минимумы отвечают $\gamma \neq 0$ и $c_1, c_2 \neq 0$, что подтверждает возможность сосуществования структур валентных связей и антиферромагнитного порядка. В таблице приведен также средний спин $S_0 = (-1)^{n_x + n_y} \langle S_z \rangle$, приходящийся на один узел для состояний с антиферромагнитным порядком.

Таблица

Средние энергии в расчете на один узел решетки для состояний (4-9) недопированной $t - J$ -модели с разной структурой валентных связей или антиферромагнитным порядком. Для последних приведена величина спина S_0 на узлах. Последний столбец относится к ферромагнитному состоянию

	AF	DM	$DM+AF$	$Q4$	$Q4 + AF$	F
$\langle H \rangle / J$	-1	-0.875	-1.042	-1	-1.084	0
S_0	0.5		0.475		0.434	

Ряд свойств системы следуют из данных таблицы:

1. Стабилизация состояния в результате организации структуры валентных связей, что согласуется с рассчитанной в [24] фазовой диаграммой для парамагнитного состояния DM и состояния $(DM + AF)$ модели Хаббарда. Энергии понижаются в ряду состояний (4-6, 8, 9), и все они ниже энергии киральной фазы для этой модели, равной $-0.92t$ согласно [11, 14].

2. Высокая степень вырождения: средние энергии одинаковы для любой димерной структуры, полностью покрывающей $2D$ -решетку. Такое же вырождение имеет место и для разных структур $Q4 + AF$, если знак спина «привязан» к четности узла исходной решетки.

3. Малая разница энергий парамагнитного и антиферромагнитного решений при наличии структур валентных связей. Это предполагает более низкую температуру Нееля, чем завышенные ее значения, следующие из расчетов среднего пс тя.

4. Уменьшение значения локального спина S_0 на узлах магнитных подрешеток в смешанных антиферромагнитных состояниях со структурами валентных связей в сравнении с состоянием жесткого антиферромагнетика.

3. СВОЙСТВА ЗОННЫХ РЕШЕНИЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА С АЛЬТЕРНАНТНОЙ ДИМЕРНОЙ СТРУКТУРОЙ ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ

При конечной величине U/t для произвольно допированной модели Хаббарда вариационный способ построения состояний с альтернантной структурой валентных связей был предложен в [24]. Волновую функцию коррелированного состояния модели Хаббарда представляем как результат действия унитарных локальных преобразований на некоррелированное состояние Φ приближения Хартри–Фока или обобщенного метода Хартри–Фока:

$$\Psi = W\Phi, \quad W = \prod_n W_n. \quad (12)$$

Локальные унитарные операторы W_n относятся к неперекрывающимся элементам исследуемой структуры — кластерам. Тогда исходная задача (1) с гамильтонианом H в базе коррелированных состояний Ψ строго эквивалентна проблеме с преобразованным гамильтонианом

$$\tilde{H} = W^\dagger H W \quad (13)$$

в базе функций Φ . Задание локального оператора $W_n(\alpha)$ с вариационными параметрами α (по существу, параметрами порядка новых структур) и рассмотрение новой проблемы методом среднего поля позволяют исследовать новые типы коррелированных состояний при произвольном допировании. В отличие от неунитарного локального преобразования Гутцвиллера [28] для (13) можно найти явное, хотя и громоздкое выражение \tilde{H} через ферми-операторы системы и провести точное вычисление энергии для функций хартри–фоковского типа.

Для простейшей димерной структуры валентных связей, изображенной на рис. 1а, кластер отвечает двум центрам $\{a_n b_n\} = \{c_n c_{n+e_x}\}$, образующим связь, а оператор с одним вариационным параметром равен

$$W_n(\alpha) = \exp\left(\alpha \left[g_{n\sigma}^\dagger g_{n-\sigma}^\dagger u_{n-\sigma} u_{n\sigma} - \text{H.c.} \right]\right) = I + W_{ij} X_{2i,2j}^n; \quad W_{ij} = \begin{pmatrix} C_\alpha & s_\alpha \\ -s_\alpha & C_\alpha \end{pmatrix}_{ij}, \quad (14)$$

$$g_{n\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{n\sigma} + b_{n\sigma}), \quad u_{n\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{n\sigma} - b_{n\sigma}), \quad C_\alpha = \cos \alpha - 1, \quad s_\alpha = \sin \alpha. \quad (15)$$

Здесь $X_{2i,2j}^n$ — операторы Хаббарда для следующих состояний димера $\{a_n b_n\}$ с двумя электронами на нем ($n_a + n_b = 2$):

$$|2i\rangle = \left\{ |g_{n\sigma}^\dagger g_{n-\sigma}^\dagger\rangle, |u_{n\sigma}^\dagger u_{n-\sigma}^\dagger\rangle \right\}_i, \quad i = 1, 2. \quad (16)$$

Таким образом, W_n осуществляет поворот синглетных двухдырочных компонент (16) n -го кластера.

В результате эффективный гамильтониан (13) имеет вид

$$\tilde{H} = \sum_n \tilde{h}_n - t \sum_{n,\sigma} \sum_l \left[\tilde{b}_{n\sigma}^\dagger \tilde{a}_{n+l,\sigma} + \text{H.c.} \right]. \quad (17)$$

Здесь n нумерует димеры (четные узлы исходной решетки), l пробегает значения $l = e_x \pm e_y, 2e_x$, а преобразованные операторы

$$\tilde{Q}_n = \{\tilde{h}_n, \tilde{b}_{n\sigma}, \tilde{a}_{n\sigma}\} = W_n^\dagger Q_n W_n, \tag{18}$$

как и исходные операторы $Q_n = \{h_n, b_{n\sigma}, a_{n\sigma}\}$, относятся к n -му кластеру. Внутри-кластерная часть гамильтониана (1)

$$h_n = U [n_{n\uparrow}^a n_{n\downarrow}^a + n_{n\uparrow}^b n_{n\downarrow}^b] - t(a_{n\sigma}^\dagger b_{n\sigma} + \text{H.c.})$$

в результате преобразования приобретает вид

$$\tilde{h}_n = h_n + h_{2i', 2j'} [W_{i'i} W_{j'j} - \delta_{i'i} \delta_{j'j}] X_{2i, 2j}. \tag{19}$$

Здесь $i', i, j', j = 1, 2$, $h_{2i', 2j'} = \langle 2i' | h_n | 2j' \rangle$ — матричные элементы h_n в базе кластерных состояний (16); $W_{i,j}$ определены в (14). Операторы Хаббарда $X_{2i, 2j}$ легко выражаются через исходные ферми-операторы [24]. Аналогично, $\tilde{a}_{n\sigma}, \tilde{b}_{n\sigma}$ выражаются через

$$\tilde{g}_\sigma = g_\sigma + C_\alpha g_\sigma \{n_{-\sigma}^g (1 - n^u) + n_\sigma^u n_{-\sigma}^u\} + s_\alpha g_\sigma^\dagger u_{-\sigma} u_\sigma,$$

$$\tilde{u}_\sigma = u_\sigma + C_\alpha u_\sigma \{n_{-\sigma}^u (1 - n^g) + n_\sigma^g n_{-\sigma}^g\} - s_\alpha u_\sigma^\dagger g_{-\sigma} g_\sigma. \tag{20}$$

Индекс кластера здесь опущен; C_α, s_α определены в (15).

Таким образом, для \tilde{H} имеется явное выражение через ферми-операторы. Самосогласованное решение для преобразованного гамильтониана $\tilde{H}(\alpha)$ при фиксированном α в приближении обобщенного метода Хартри–Фока с последующей минимизацией по α приведено в [24]. Важно, что в базе однодетерминантных функций $\Phi = |\prod_k \chi_{k\sigma}^\dagger\rangle$ приближения обобщенного метода Хартри–Фока средняя энергия точно выражается [24] через набор одноэлектронных средних в базе $\{\Phi\}$, определенных в Приложении 1. Коррелированное состояние при этом представляется в виде

$$\Psi = W\Phi = |\prod_{k,\sigma} \tilde{\chi}_{k\lambda\sigma}^\dagger\rangle, \quad \tilde{\chi}_{k\lambda\sigma}^\dagger = W^\dagger \chi_{k\lambda\sigma}^\dagger W. \tag{21}$$

Произведение по k здесь относится к квазиимпульсам внутри границы Ферми, а одноэлектронные функции $\chi_{k\lambda\sigma}^\dagger$ — собственные состояния линейаризованного гамильтониана $(\tilde{H})_L = \sum_{k\sigma} h_{k\sigma} + \text{const}$ с собственными энергиями $E_{k\lambda}$, $\lambda = 1, 2$. Выражения для $h_{k\sigma}$, $E_{k\lambda}$, $\chi_{k\lambda\sigma}$ и процедура самосогласования, разработанные в [24], кратко представлены в Приложении 1.

Чтобы судить о роли структур валентных связей в реальных коррелированных системах, вычислим ряд физических характеристик для этих состояний и на качественном уровне обсудим их соответствие результатам точных численных расчетов конечных систем.

Начнем с формы поверхности Ферми и плотности состояний

$$n_k = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle_\Psi = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \langle \Phi W^\dagger c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} W \Phi \rangle. \tag{22}$$

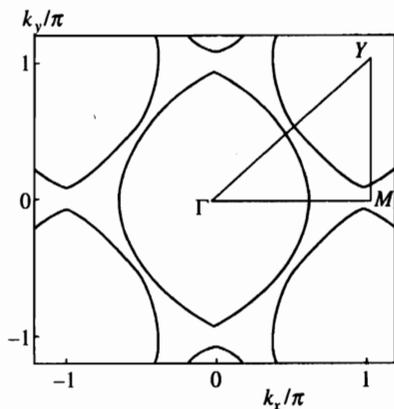


Рис. 2. Граница Ферми для состояния с димерной структурой валентных связей x -ориентации (DM_x) для модели Хаббарда с $U/t = 8$ при $n = 0.8$

Схема вычисления (22) для коррелированного состояния с волновыми функциями (12), (14) приведена в Приложении 1. Собственные энергии линеаризованного гамильтониана \tilde{H}_L формируют 2 зоны $\lambda = 1, 2$ со щелью $\sim U$ при $n = 1$. Для димерной структуры x -ориентации рис. 1а (сокращенно DM_x) очень плоские минимумы верхней, максимумы нижней зон отвечают координатам $k_x = \pm(\pi - \delta_x)$, $k_y = 0$ внутри основной зоны Бриллюэна $|k_x \pm k_y| \leq \pi$. Для недопированной системы функции заполнения зон $f_{\lambda k} = \langle \chi_{k\lambda\sigma}^\dagger \chi_{k\lambda\sigma} \rangle_\Phi$ равны соответственно 1 и 0. В согласии с электронно-дырочной симметрией модели Хаббарда, границы Ферми, определяемые из уравнений $E_{k\lambda} = \mu$, одинаковы при одинаковом по абсолютной величине электронном или дырочном допировании. На рис. 2 приведена поверхность Ферми в расширенной зоне Бриллюэна для $n = 0.8$, $U/t = 8$. Высота максимума составляет $E_{1k}^{max} - \mu = 0.092t$.

Поскольку реальные монокристаллы ВТСП (кроме $YBaCuO$) симметричны относительно $k_x \leftrightarrow k_y$, имеет смысл сравнить плотность состояний n_k , усредненную по двум димерным структурам валентных связей x - и y -ориентации

$$\bar{n}_k = \frac{1}{2} [n_k(DM_x) + n_k(DM_y)].$$

На рис. 3 приведены профили средней плотности состояний \bar{n}_k вдоль контура $\Gamma Y M \Gamma$ для $n = 1.2, 1, 0.8$ и карты уровней $\bar{n}_k(k_x, k_y)$ для смешанных состояний $DM + AF$. Для $n = 0.8$ приведена также плотность n_k для антиферромагнитного состояния обобщенного метода Хартри–Фока без структуры валентных связей со щелью вдоль границы $|k_x \pm k_y| = \pi$ основной ячейки Бриллюэна. Штриховая и точечная кривые отвечают структурам x - и y -ориентаций.

Разрывы или области резкого изменения n_k (черные области на рис. 3б) связаны, хотя и не так непосредственно, с наблюдаемыми границами сигнала в фотоэмиссионном спектре. А именно, величина n_k является интегралом по ω от спектральных плотностей, измеряемых в прямой и обратной фотоэмиссии (ARPES, IPES). Отметим, что внешняя по отношению к точке $\Gamma(0, 0)$ граница резкого изменения n_k в грубом приближении может ассоциироваться с «границей» Ферми, восстанавливаемой из измерений ARPES. Аналогично, внутренняя граница — с «границей» Ферми, которая могла бы наблюдаться в IPES, если бы в этом методе была возможность разрешения по углам. Отсюда следует, что «граница» Ферми, которая наблюдалась бы для состояния рассма-

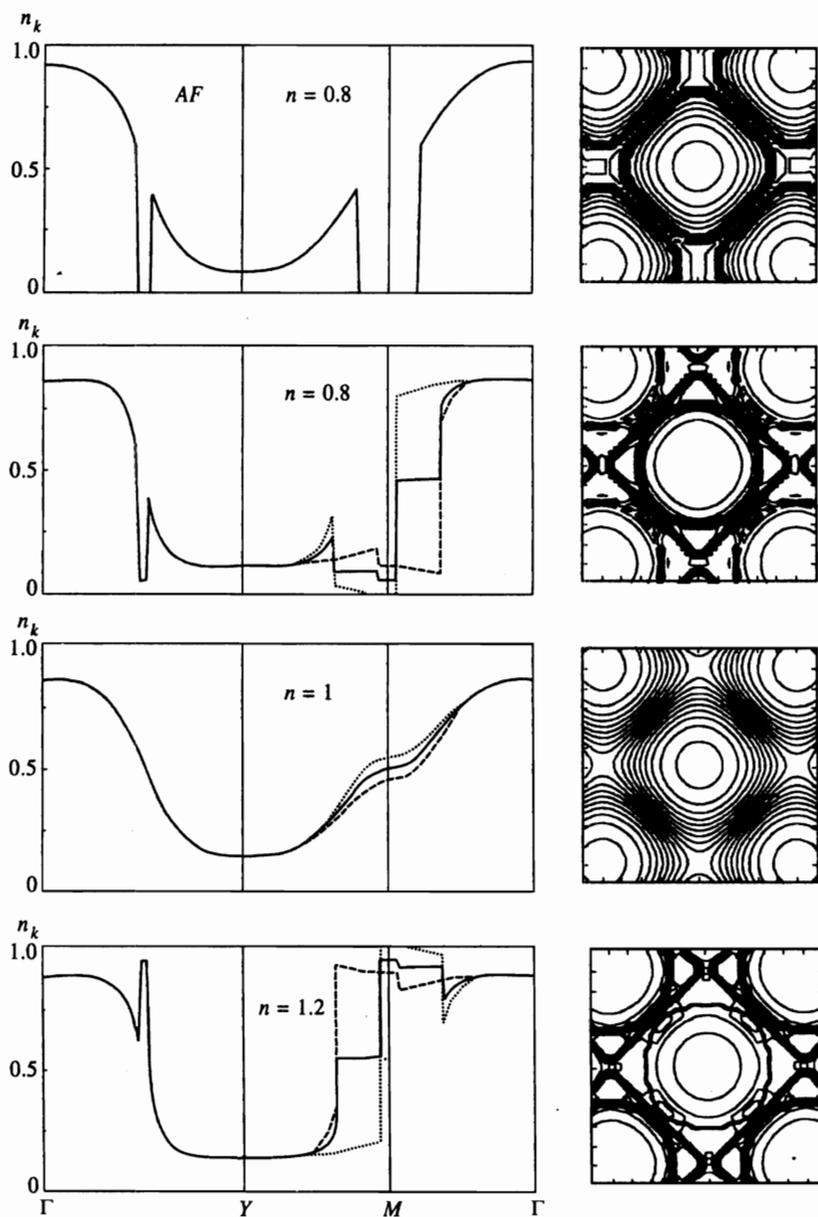


Рис. 3. Профили усредненной по двум структурам плотности состояний \bar{n}_k вдоль контура Γ, Y, M, Γ (сплошные линии) и карты уровней $\bar{n}_k(k_x, k_y)$ для смешанных состояний $DM + AF$ в области $|k_{x(y)}| \leq 1.2\pi$. Верхние рисунки относятся к антиферромагнитному состоянию среднего поля без структуры валентных связей. Пунктирные и штриховые линии соответствуют x - и y -ориентациям

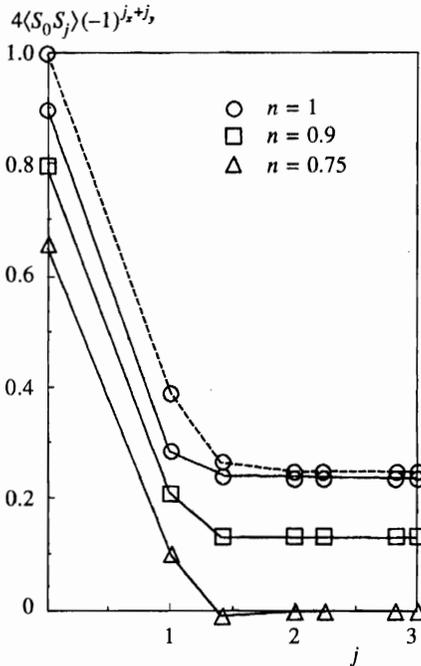


Рис. 4. Спиновый коррелятор как функция расстояния между спинами для состояния $DM + AF$ модели Хаббарда с $U/t = 8$ при разном допировании. Штрихи — то же для локализованного состояния (9) структуры $Q4 + AF$ недопированной $t - J$ -модели

триваемой структуры, приближенно имеет форму дуги вокруг точки $Y(\pi, \pi)$ как при электронном, так и при дырочном допировании. При таком определении «границы» Ферми теорема Латтинжера не выполнялась бы, что противоречило бы результатам экспериментальных наблюдений. При дырочном допировании ($n_h > 1$) область фазового пространства вне «границы» составляет менее половины всего фазового пространства, в то время как по теореме ее доля должна составить величину $n_h/2 > 0.5$. Указанное противоречие отмечено и в расчетах поверхности Ферми, выполненных методом операторов проектирования [29].

Что касается формы поверхности Ферми в виде дуги вокруг $Y(\pi, \pi)$, то именно такая форма наблюдается для большинства монокристаллов ВТСП, как электронно- [3, 4], так и дырочно- [5–8] допированных. Обычно такая форма объясняется с помощью эмпирических моделей с включением прыжкового взаимодействия t' для следующих за ближайшими соседних (диагональных) центров [30–33]. Прямой вывод [25, 26] параметров обобщенной модели Хаббарда из трехзонной модели Эмери дает для t' значения меньше, чем эмпирические значения, полученные из данных ARPES. У нас исходная модель (1) не содержит таких взаимодействий. Тем не менее димерные структуры исследуемого коррелированного состояния создают эффект взаимодействия ближайших соседей. Члены взаимодействия узлов n, m с $|n - m| = \sqrt{2}$, 2 присутствуют в явном выражении для $\hat{H}(\alpha)$.

Обсудим спиновые корреляции в смешанных $DM + AF$ -состояниях с димерной структурой. На рис. 4 приведены результаты расчетов статической корреляционной функции

$$\chi(l) = \frac{1}{3} N^{-1} \sum_m (-1)^{l_x+l_y} \langle 4S_m S_{m+l} \rangle_\Psi$$

при $U/t = 8$ и разной степени допирования. Здесь m, l нумерует узлы решетки, а не димеры. Именно такую величину, а не $\chi_z \sim (-1)^{l_x+l_y} \langle 4(S_m)_z(S_{m+l})_z \rangle_\Psi$ следует сравнивать с $\chi(l)$, рассчитанной в [17, 19] для конечных кластеров. Основному состоянию конечных систем с эквивалентными осями x, y, z надо ставить в соответствие набор $DM + AF$ -состояний $2D$ -плоскости с разными поляризациями локальных спинов. Это эквивалентно расчету $\chi(l)$ вместо $\chi_z(l)$ для состояния $DM + AF$ с одной (z) поляризацией. Наличие в кривых $\chi(l)$ плато, исчезающего по мере допирования, отвечает дальнему антиферромагнитному порядку с $\chi_z(l) \sim 3\chi(l)$ и согласуется с ранее найденной фазовой диаграммой.

Полученные зависимости $\chi(l)$ очень близки к результатам для $\chi(l)$, полученным в [17] для $t - J$ -модели (кластер 8×8 и $J = 4t^2/U = 0.4$) точной диагонализацией. Подобие результатов [17] и рис. 4 означает, что плато в χ_z при $l \geq \sqrt{2}$ в [17] отражает дальний антиферромагнитный порядок конечных систем. Для модели Хаббарда расчеты $\chi(l)$ для конечных систем квантовым методом Монте-Карло [19] выполнены для высоких температур ($kT = t/4$), и потому дальний антиферромагнитный порядок исчезает при меньшем допировании, чем в наших расчетах и в [17]. Заметим, что подобные кривые $\chi(l)$ с плато при $l \geq \sqrt{2}$ характерны и для состояний (6) или (9) $t - J$ -модели с разной структурой валентных связей — димерной или симметрии Q_4 . Результат для последней при $n = 1$ приведен на рис. 4. Это значит, что форма $\chi(l)$ не очень чувствительна к структуре валентных связей. Однако в методе среднего поля без структуры валентных связей, т. е. при $\alpha = 0$ в $W(\alpha)$, антиферромагнетизм и плато в $\chi(l)$ исчезают при очень больших степенях допирования ($\delta \sim 0.45$ вместо значения $\delta \sim 0.25$ для состояний $AF + DM$ при $U/t = 8$).

4. ЗОНЫ ВОЗБУЖДЕНИЙ, НАБЛЮДАЕМЫЕ В ФОТОЭМИССИОННЫХ СПЕКТРАХ

Попытаемся рассчитать фотоэмиссионные спектры, отвечающие основному коррелированному состоянию с димерной структурой валентных связей, для простоты без антиферромагнитного порядка. В разрешенных по углу прямой и обратной фотоэмиссиях (ARPES, IPES) измеряемый сигнал пропорционален спектральным функциям, отвечающим квазиимпульсу k и энергии ω (в электронном представлении) [1]:

$$A^-(k, \omega) = \sum_{\nu} |\langle \Psi_{\nu}^{N_e-1} | c_{k,\sigma} | \Psi_0^{N_e} \rangle|^2 \delta(\omega - \mu + E_{\nu}^{N_e-1} - E_0^{N_e}), \quad \omega \geq 0, \quad (23)$$

$$A^+(k, \omega) = \sum_{\nu} |\langle \Psi_{\nu}^{N_e+1} | c_{k,\sigma}^{\dagger} | \Psi_0^{N_e} \rangle|^2 \delta(\omega - \mu - E_{\nu}^{N_e+1} + E_0^{N_e}), \quad \omega \leq 0. \quad (24)$$

Здесь $\Psi_{\nu}^{N_e \pm 1}$ — возбужденные состояния системы с лишним электроном или дыркой и квазиимпульсом k .

Существует метод проекционных операторов [29] для самосогласованного приближенного вычисления спектральных функций. Незнание основного состояния в [28] компенсируется использованием правил сумм и расщеплением сложных операторов. В отличие от [29] мы будем исходить из вариационного основного состояния определенной структуры, конкретно, димерной структуры валентных связей. Наша цель — проследить, как эта структура проявляется в фотоэмиссионных спектрах. Родство с методом проекционных операторов [29] состоит в использовании конечного базиса операторов

ров $\{Q_{\lambda k\sigma}\}$ для построения возбужденных состояний $\Psi_{\nu}^{N_e-1}$ с квазиимпульсом k , проекцией спина σ и с лишней дыркой на фоне данного основного состояния $\Psi_0 = W\Phi_0$.

Возбужденные состояния с квазиимпульсом k ищем в виде

$$\Psi_{k\sigma}^{\nu} = W \sum_{\lambda} D_{\lambda}^{\nu} Q_{\lambda k\sigma} \Phi_0, \quad \lambda = 1, \dots, L_0. \quad (25)$$

При данном k из произвольного набора нечетных операторов $\{q_{ik\sigma}\}$, уменьшающих число частиц на 1, можно выделить и построить меньший набор «ортогональных» операторов $\{Q_{\lambda k\sigma}\}$ с ненулевой нормой (см. Приложение 2), таких что

$$S_{\lambda\lambda'} = \langle \Phi_0 Q_{k\lambda\sigma}^+ Q_{k\lambda'\sigma} \Phi_0 \rangle = S_{\lambda} \delta_{\lambda\lambda'}, \quad S_{\lambda} \neq 0, \quad \lambda, \lambda' = 1, \dots, L_0(k). \quad (26)$$

Именно такой набор использован в (25).

Тогда дискретный набор эффективных возбужденных состояний, имитирующих непрерывный спектр многочастичных дырочных возбуждений, находится из уравнения

$$[S_{\lambda}^{-1/2} H_{\lambda\lambda'} S_{\lambda'}^{-1/2}] D_{\lambda'}^{\nu} = E_k^{\nu} D_{\lambda'}^{\nu}, \quad (27)$$

где

$$H_{\lambda\lambda'} = \langle \Phi_0 Q_{k\lambda\sigma}^+ \tilde{H} Q_{k\lambda'\sigma} \Phi_0 \rangle. \quad (28)$$

Амплитуда сигнала фотоэмиссионного спектра $A(k, \omega)$, отвечающего возбуждению эффективных дырочных состояний E_k^{ν} из коррелированного состояния с димерной структурой валентных связей x -ориентации, запишется в виде

$$A(k\omega) = \sum_{\nu} |M^{\nu}(k_e)|^2 \frac{\Gamma}{(\omega - E_k^{\nu})^2 + \Gamma^2}, \quad (29)$$

$$M^{\nu}(k_e) = \sum_{\lambda} (D_{\lambda}^{\nu})^* \langle \Phi_0 Q_{\lambda k\sigma}^+ \tilde{c}_{k\sigma} \Phi_0 \rangle. \quad (30)$$

Здесь k_e — импульс выбиваемого электрона, а $\tilde{c}_{k\sigma} = W^+ c_{k\sigma} W = \tilde{a}_{k\sigma} + e^{ik_x} \tilde{b}_{k\sigma}$ получается в результате действия $c_{k\sigma}$ на $\Psi_0 = W\Phi_0$ в (23) и определения (25); $\delta(\omega - E_k^{\nu} - E_0)$ в (23) заменена лоренцевской функцией с шириной Γ , D_{λ}^{ν} — собственные векторы в матричном уравнении (27). В дальнейших вычислениях Γ — параметр, который полагается равным 0.1t. В принципе существует возможность оценки ширин Γ^{ν} для каждого эффективного уровня $E^{\nu}(k)$ через коммутаторы $[[Q_{\lambda k\sigma}, H], H]$. Однако их вычисление слишком громоздко. Аналогичные выражения получаются для $A^+(k\omega)$, $\omega > 0$ при выделении из операторного базиса $\{q_{ik\sigma}^+\}$ ортогонального набора $\{Q_{\lambda k\sigma}^+\}$. Для недопированной системы можно показать, что $A^+(k, \omega)|_{n=1} = A^-(\tilde{k}, -\omega)$, где $\tilde{k} = (\pi\pi) - k$.

Для альтернантной структуры $DM_x + AF$ с двумя узлами в элементарной ячейке минимальный исходный базис операторов $\{q_{ik\sigma}\}$ состоит из двух операторов $\{a_{k\sigma}, b_{k\sigma}\}_i$. При $n = 1$ лишь одна из комбинаций $\chi_{1k\sigma} = c_a a_{k\sigma} + c_b b_{k\sigma}$ — решение линеаризованной задачи $(\tilde{H})_L$, отвечающее нижней хаббардовской зоне $\lambda = 1$, создает дырочные возбуждения с ненулевой нормой ($\chi_{2k\sigma} \Phi = 0$). В таком одночастичном приближении сигнал фотоэмиссии отвечал бы единственной зоне $E_{\lambda k\sigma}$ — нижней ($\lambda = 1$) или верхней ($\lambda = 2$) соответственно для прямой или обратной фотоэмиссии. Такая картина имеет место

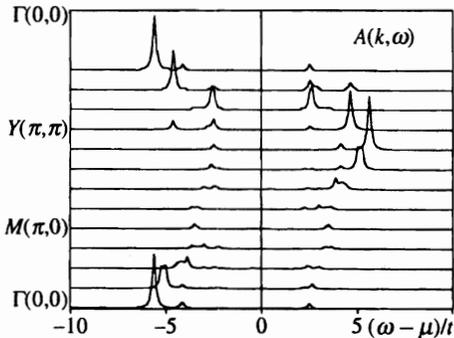


Рис. 5. Спектральные функции, рассчитанные по формулам (30), (31), с $\Gamma = 0.1t$ для состояния с димерной структурой валентных связей (без антиферромагнетизма) модели Хаббарда с $U/t = 8$, $n = 1$ с усреднением по двум структурам x - и y -ориентаций. Кривые (сверху вниз) отвечают значениям $k = (0, 0), (\pi/4, \pi/4), \dots, (0, 0)$ вдоль контура Γ, Y, M, Γ , изображенного на рис. 2

для основного антиферромагнитного состояния обобщенного метода Хартри-Фока без структуры валентных связей: из однодетерминантного основного состояния все прочие (многочастичные) возбужденные состояния недостижимы, поскольку их нельзя создать с помощью одночастичного оператора $c_{k\sigma}$, фигурирующего во взаимодействии электрона со светом.

Между тем в расчетах конечных кластеров методами точной диагонализации для $t - J$ -модели [17] или квантовым методом Монте-Карло для модели Хаббарда [20] четко прослеживается двухзонная структура каждой из спектральных функций (24), (25), отвечающих прямой и обратной фотоэмиссии. При использовании расширенного базиса операторов $q_{ik\sigma}$ наш расчет по формулам (29), (30) показывает, что учет корреляций типа образования валентных связей воспроизводит расщепление на 2 подзоны полос прямой и обратной фотоэмиссий. Базис операторов $q_{ik\sigma}$, схема и приближения расчета даны в Приложении 2.

На рис. 5 приведены спектральные функции $A(k, \omega)$ для основного состояния с димерной структурой валентных связей без антиферромагнитного порядка, рассчитанные по формулам (29,30) с $\Gamma = 0.1t$. Явно видны 2 зоны как при $\omega < 0$, так и при $\omega > 0$ с характерным переносом интенсивности от зоны к зоне при изменении квазиимпульса k от точки $\Gamma(0, 0)$ к точке $M(\pi, 0)$ и далее к $Y(\pi, \pi)$. Именно такой перенос интенсивностей показывают точные расчеты конечных систем [20].

Происхождение двух зон дырочных (или электронных) возбуждений для состояний с димерной структурой валентных связей становится понятным из приближенного описания их для недопированной $t - J$ -модели. Состояние (5) с локализованными спинами и димерной спиновой структурой на связях $\{a_n b_n\}$ можно тождественно переписать в виде

$$\Psi_{DM}^{t-J} = W \left(\alpha = \frac{\pi}{4} \right) \Phi_0^{t-J}, \quad \Phi_0^{t-J} = \left| \prod_{k,\sigma} g_{k\sigma}^{\dagger} \right\rangle = \left| \prod_{n,\sigma} g_{n\sigma}^{\dagger} \right\rangle, \quad W = \prod_n W_n \left(\alpha = \frac{\pi}{4} \right).$$

Здесь k заполняет основную ячейку F_0 зоны Бриллюэна, n нумерует димеры, оператор W_n осуществляет преобразование соответствующей компоненты функции Φ в синглетное состояние димера с локализацией спинов:

$$W_n \left(\frac{\pi}{4} \right) |g_{n\sigma}^{\dagger} g_{n,-\sigma}^{\dagger}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |a_{n\uparrow}^{\dagger} b_{n\downarrow}^{\dagger} + b_{n\uparrow}^{\dagger} a_{n\downarrow}^{\dagger}\rangle.$$

Общее состояние $t - J$ -модели с квазиимпульсом k и одной дыркой на фоне состоя-

ния (5) с димерной структурой рис. 1а можно записать в виде

$$\Psi_{k\sigma}^h = W \left(\frac{\pi}{4} \right) \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_n e^{ikx} (c_g g_{n\sigma} + c_u u_{n,-\sigma}^+ g_{n\sigma} g_{n,-\sigma}) \Phi_0^{t-J}.$$

Энергии двух зон дырочных возбуждений с точностью до членов $\sim t/U$ равны при этом

$$E_k^{1(2)} = \mp t \{ 5/4 - \cos k_x \cos k_y - \cos 2k_x + \cos^2 k_y \} + O(t^2/U).$$

Таким образом, две зоны дырочных (и аналогично электронных) возбуждений обязаны двум состояниям димера с $n_e = 1$ (или $n_e = 3$), которые перемешиваются при $k \neq (0, 0)$ и $k \neq (\pi, \pi)$. Заметим, что фотоэмиссия электрона со спином σ из основного состояния (4) жесткого антиферромагнетика может происходить как с узлов подрешетки со спиновой поляризацией σ , так и с узлов подрешетки с противоположной поляризацией, но с переворотом спинов соседей. Расщепление и дисперсия возникающих при этом дырочных возбуждений имеет порядок $\sim J = 4t^2/U$ вместо расщеплений $\sim t$ для возбуждений из локализованных состояний (5), (6) с димерными структурами валентных связей.

Однако интенсивности фотоэмиссии из любого локализованного состояния $t - J$ -модели при соответствующих частотах $\omega = E_k^{1(2)} - \mu$ никак не воспроизводят картину рис. 5 и аналогичные результаты расчетов конечных систем [20]. Для $t - J$ -модели при $n = 1$ имеет место симметрия

$$A(k, -\omega) = A(k\omega), \quad A(\tilde{k}, \omega) = A(k\omega), \quad \tilde{k} = (\pi, \pi) - k. \quad (31)$$

В отличие от соотношений (31) $t - J$ -модели, в расчетах модели Хаббарда при конечных U проявляется явная асимметрия $A(k\omega)$ для прямой и обратной фотоэмиссий, отражающая зонный характер основного коррелированного состояния. В частности, явно выражено свойство, характерное для невзаимодействующих электронов: интенсивности прямой ($\omega > 0$) или обратной ($\omega < 0$) фотоэмиссий отличны от нуля для квазиимпульсов внутри либо вне границы Ферми.

Изложенное объяснение не доказывает, однако, что удвоение полос фотоэмиссии обязательно является результатом формирования в системе исключительно димерных структур валентных связей. Простейший расчет дырочных возбуждений на фоне основного локализованного состояния (8) со структурой валентных связей симметрии $Q4$ для $t - J$ -модели показывает, что эта структура тоже может имитировать двухзонность полос. Из девяти зон, коррелирующих с уровнями отдельного четырехузельного комплекса с $n = 3$, т.е. с одной дыркой, и с суммарным спином $1/2$, лишь две пары близких зон оказываются активными в фотоэмиссии, что с учетом уширения может имитировать две полосы возбуждений.

5. ОДНОРОДНОЕ СОСТОЯНИЕ ФЛУКТУИРУЮЩИХ ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ

В [24] и выше изучались коррелированные состояния с альтернантной димерной структурой валентных связей с удвоенной элементарной ячейкой. Они строились с помощью локальных операторов, которые действовали на неперекрывающиеся кластеры — димеры $\{a_n, b_n\}$. Выбранные таким образом локальные операторы, коммутирующие между собой, сами вносили неэквивалентность связей внутри димеров и связей соседних узлов, принадлежащих разным димерам. Самосогласованное хартри-фоковское

решение для преобразованного гамильтониана \tilde{H} закрепляло «структуру» — самоподдерживающуюся неэквивалентность связей — аналогично состояниям волны спиновой плотности.

Однако можно представить себе однородное коррелированное состояние флуктуирующих валентных связей, построенное из некоррелированного состояния Φ с помощью унитарного преобразования

$$\Psi = W\Phi, \quad W = e^{\alpha Z}, \quad Z = \sum_{(nm)} Z_{nm}. \quad (32)$$

Здесь локальный антиэрмитов оператор Z_{nm} , относящийся к двум ближайшим соседним узлам, является полным аналогом генератора в операторе преобразования (14) внутри димера (в (32) в отличие от (14) n, m нумерует узлы, а не димеры):

$$Z_{nm} = [g_{nm,\sigma}^\dagger g_{nm,-\sigma}^\dagger u_{nm,-\sigma} u_{nm,\sigma} - \text{H.c.}] \equiv -\frac{1}{2} \sum_{\sigma} j_{nm\sigma} \Delta_{nm,-\sigma}, \quad (33)$$

$$j_{nm\sigma} = c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} - c_{m\sigma}^\dagger c_{n\sigma}, \quad \Delta_{nm,-\sigma} = n_{n-\sigma} - n_{m-\sigma},$$

где g, u — четная и нечетная комбинации орбит соседних центров n, m . Суммирование в (32) проводится по всем связям ближайших соседей. Оператор Z_{nm} действует на синглетные компоненты соседних узлов с двумя частицами на связи в полной функции Φ . Такие компоненты встречаются в Φ вероятностным образом. Поэтому можно говорить о случайном образовании валентных связей, т. е. образовании на парах узлов синглетов из локализованных спинов вслед за флуктуациями заряда на этих парах в однодетерминантной функции Φ .

Ввиду некоммутативности локальных операторов мы не можем, как раньше, найти эффективный гамильтониан $\tilde{H} = W^\dagger H W$ во всех порядках по параметру преобразования α . Однако можно явно найти \tilde{H} с точностью до членов $\sim \alpha^2$ включительно:

$$\tilde{H} \approx H + \alpha[H, Z] + \frac{\alpha^2}{2} [[H, Z], Z] \quad (34)$$

и найти однородное по всем связям самосогласованное хартри-фоковское решение для \tilde{H} в пренебрежении членами $\sim \alpha^3$ и выше. Малость оптимального значения α , минимизирующего энергию $\tilde{H} = \langle \tilde{H}(\alpha) \rangle_{\Phi}$ позволит обосновать разложение по α и оценить точность приближения.

Для такой однородной задачи средняя энергия по однодетерминантному состоянию Φ приближения обобщенного метода Хартри–Фока зависит от девяти одноэлектронных средних по Φ :

$$\langle \tilde{H} \rangle_{\Phi} = \tilde{H}(y_{\nu}), \quad y_{\nu} = \{\rho_l, \delta_l\}_{\nu},$$

$$\rho_l = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \langle c_{n\sigma}^\dagger c_{n+l,\sigma} \rangle, \quad \delta_l = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \frac{\sigma}{|\sigma|} \langle c_{n\sigma}^\dagger c_{n+l,\sigma} \rangle, \quad (35)$$

$$l = (0, 0), (1, 1), (0, 2), (0, 1), (1, 2), (0, 3).$$

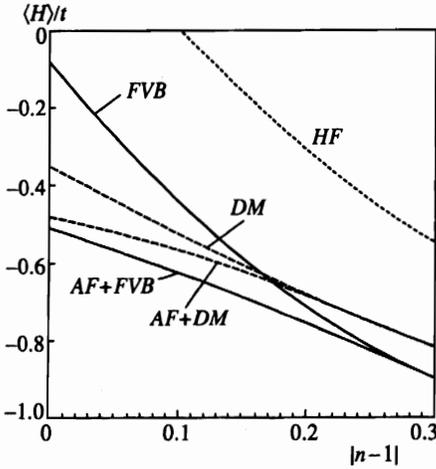


Рис. 6. Зависимость энергии от степени допирования для коррелированных однородных состояний с флуктуирующими валентными связями (сплошные кривые) или состояний с альтернативной димерной структурой (штриховая) при наличии или отсутствии антиферромагнетизма. Верхняя кривая отвечает энергии хартри-фоковского состояния. Для электронно-допированной системы ($n > 1$) ось ординат отвечает величине $[\langle H \rangle - U(n-1)]/t$

Из них $\delta_l \equiv 0$ для нечетных l . Основное состояние гамильтониана \tilde{H} в хартри-фоковском приближении

$$\Phi = \left| \prod_{k\sigma}^F \chi_{\lambda k \sigma}^\dagger \right\rangle$$

определяется собственными функциями $\chi_{\lambda k \sigma}$ и спектром $E_{\lambda k}$ линейризованного гамильтониана $\tilde{H}_L = \sum_{\nu} \{ \partial \tilde{H} / \partial y_{\nu} \} (y_{\nu} - y_{\nu}) + \tilde{H}$. В последнем y_{ν} — операторы, отвечающие средним y_{ν} .

На рис. 6 приведены зависимости средней энергии (в расчете на 1 узел) от степени допирования для однородного состояния с флуктуирующими валентными связями и антиферромагнитным упорядочением спинов ($\delta_l \neq 0$) и то же без антиферромагнитного порядка ($\delta_l = 0$) в сравнении с энергиями состояний с альтернантной структурой валентных связей для модели Хаббарда с $U/t = 8$. Среди антиферромагнитных решений состояния с однородным распределением валентных связей оказываются ниже по энергии, чем состояния с альтернантной структурой DM_x . Это может быть связано с увеличением в 4 раза числа связей, на которых проводится оптимизация двухдырочных компонент.

На рис. 7 приведены зависимости оптимального параметра преобразования $\alpha(n, U/t)$ от допирования $\delta = |n-1|$ при фиксированном $U/t = 8$ либо от U/t при $n = 1$ для однородного состояния валентных связей $FVB + AF$ в сравнении с соответствующим параметром α для альтернантной димерной структуры $DM_x + AF$. При $U/t \leq 9$ величина α для $FVB + AF$ действительно мала, $\alpha < 0.2$, что оправдывает квадратичное по α представление эффективного гамильтониана (34). Однако при $U/t \sim 12$ происходит резкое увеличение оптимального α для состояния FVB , при том что функция $\tilde{H}(\alpha)$ становится очень плоской вблизи минимума. Неясно, означает ли такое поведение качественное изменение основного состояния при $U/t \sim 12$. Выяснить это в рамках разложения (34) нельзя.

Сказанное выше относится к антиферромагнитным решениям. Парамагнитные состояния FVB при малом допировании значительно превышают по энергии состояния

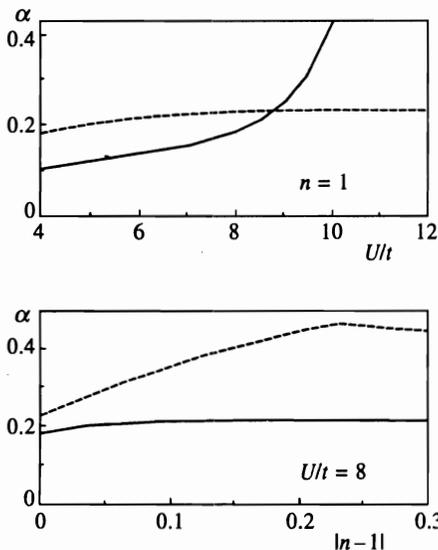


Рис. 7

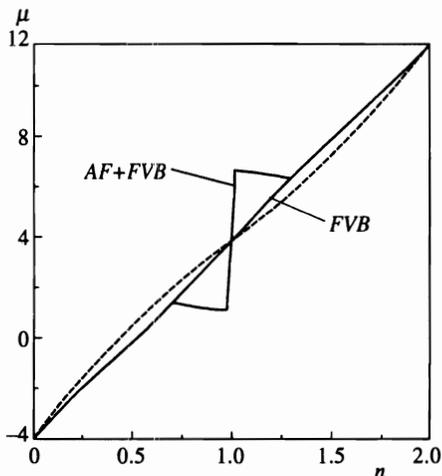


Рис. 8

Рис. 7. Зависимости оптимального параметра преобразования $\alpha(n, U/t)$ от U/t при $n = 1$ (верхний рисунок) либо от $\delta = |n - 1|$ при $U/t = 8$ (нижний рисунок) для состояний $FVB + AF$ (сплошные кривые) и $DM + AF$ (штриховые линии)

Рис. 8. Зависимости химического потенциала $\mu(n)$ от концентрации электронов для антиферромагнитного и парамагнитного решений FVB . Штрихи — то же для хартри-фоковского парамагнитного решения

димерных структур валентных связей и $AF + FVB$ с удвоенной элементарной ячейкой (см. рис. 6) в связи с возникновением щели в спектре последних. В соответствии с результатами [34] для конечных систем, наличие щели проявляется и в скачке химического потенциала $\mu(n)$ при $n = 1$. На рис. 8 приведены зависимости $\mu(n)$ для парамагнитного состояния FVB и состояния $AF + FVB$ для модели Хаббарда с $U/t = 8$. Зависимость $\mu(n)$ для парамагнитного состояния FVB не сильно отличается от $\mu(n)$ для хартри-фоковского решения (штриховая линия).

Отметим различие в границе Ферми для периодических структур (антиферромагнитных или димерных структур валентных связей) с двумя узлами в элементарной ячейке и для однородного парамагнитного состояния FVB . В первом случае при $n \neq 1$ поверхность Ферми охватывает полосу вдоль линии нестинга $|k_x \pm k_y| = \pi$ недопированной системы, так что внешняя и внутренняя части границы охватывают фазовые объемы $V_{1(2)} = 4\pi^2(1 \pm |n - 1|)$. Для однородного состояния FVB в парамагнитном случае (т.е. без магнитного удвоения элементарной ячейки) остается лишь одна из этих границ, охватывающая фазовый объем $V = 4\pi^2n$ в соответствии с теоремой Латтинжера, подтверждаемой в экспериментах ARPES [2-8]. В отличие от [2-8], форма поверхности Ферми для однородного состояния FVB описывается феноменологической линейной моделью с прыжковым взаимодействием узлов (n, m) с нечетным $l = m - n$. В такой модели отсутствует взаимодействие следующих за ближайшими соседних уз-

лов с $l = m - n = (\pm 1, \pm 1)$. Форма поверхности Ферми для однородного состояния FVB оказалась очень близкой к поверхности Ферми для $2D$ -модели Хаббарда без взаимодействия. Она не воспроизводит характерную для эксперимента ($NdNiCuO$ [2–4], $YBaCuO$ [5], $BiBaCuO$ [6–8]) форму поверхности Ферми в виде дуги вокруг точки $Y(\pi\pi)$. Причины могут быть различными. Возможно электронные корреляции не исчерпываются корреляциями, описываемыми преобразованиями (32), (33), или исходная модель должна включать прыжковое взаимодействие ближайших соседей, как в [31–33]. Тем не менее состояние (32) важно тем, что дает пример явного построения коррелированного состояния с флуктуациями.

6. ВЫВОДЫ

В $t - J$ -модели и модели Хаббарда образование димерных или более сложных структур валентных связей стабилизирует как антиферромагнитные, так и парамагнитные состояния. В отличие от макронеоднородного состояния с расслоением фаз, вытекающего из решений среднего поля только для допированных систем [13], состояния с макронеоднородными структурами валентных связей вполне сосуществуют с антиферромагнитным порядком как для недопированных систем, так и при допировании в значительной области изменения параметров $\delta = |n - 1|$ и U/t . Унитарные локальные преобразования с вариационным параметром служат удобным способом построения состояний со структурой валентных связей.

Хорошее согласие зависимостей спинового коррелятора $\chi(l)$ от расстояния между спинами l и степени допирования δ , найденных для состояний с димерной структурой валентных связей и в точных расчетах конечных систем [1, 15–20], позволяет интерпретировать короткорadiusные корреляции как следствие образования структур валентных связей, а дальний порядок — как антиферромагнетизм, исчезающий при критической степени допирования δ_c . При учете корреляций типа образования структур валентных связей критическое значение $\delta_c \sim 0.25$ для перехода антиферромагнитного состояния в парамагнитное оказывается значительно меньше $\delta_c \sim 0.45$, предсказываемого теорией среднего поля (цифры приведены для $U/t = 8$).

Состояния со структурами валентных связей обнаруживают картину двух зон эффективных (многочастичных) дырочных (и аналогично электронных) возбуждений с дисперсией и расщеплением $\sim t$. Именно такая картина получена в точных расчетах конечных кластеров [20]. Более простые решения для $t - J$ -модели со структурой валентных связей позволяют интерпретировать их как следствие двух (четного и нечетного) состояний димера с числом частиц $n = 1$ или $n = 3$, смешивающихся при k , отличном от $(0, 0)$ и (π, π) . В отличие от локализованных спиновых состояний расчеты для зонных коррелированных состояний со структурой валентных связей воспроизводят также перенос интенсивностей между полосами при изменении квазиимпульса от $(0, 0)$ к (π, π) , наблюдавшийся в точных расчетах конечных систем и характерный для некоррелированных состояний.

Высокая степень вырождения состояний с разными структурами валентных связей (обнаруженная для более простых решений $t - J$ -модели) делает маловероятной реализацию лишь одной определенной структуры. Это подтверждает и построенное нами однородное вариационное коррелированное состояние валентных связей, флуктуирующих вслед за флуктуациями заряда в некоррелированном состоянии. Энергия такого

состояния с флуктуирующими валентными связями оказывается ниже энергии состояния с альтернантной структурой валентных связей. Состояния с *FVB* дают пример явного представления коррелированного состояния с одним из возможных типов флуктуаций — через образование валентных связей соседних узлов. Вопрос о форме поверхности Ферми в ВТСП представляется более сложным. Неясно, в какой степени обобщение на другие типы корреляций, в частности, с участием ближайших соседей, или расширение самой модели Хаббарда, или более тонкая обработка данных фотоэмиссии смогут устранить существующие расхождения в форме поверхности Ферми.

Это исследование оказалось возможным благодаря гранту № 015-943 Международного научно-технического центра, а также Российскому фонду фундаментальных исследований (проект 97-03-33727А). Авторы благодарны также В. Я. Кривнову за полезные обсуждения результатов работы и Е. Плеханову за помощь в проверке вычислений.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Средняя энергия $\bar{H}(y_i) = \langle \Psi H \Psi \rangle = \langle \Phi \bar{H} \Phi \rangle$ для состояний димерных структур валентных связей $\{a_n, b_n\}$ рис. 1а точно вычисляется и зависит от следующих одноэлектронных средних по однодетерминантному состоянию Φ :

$$\{y_i\} = \{\rho_0, \delta_0, \gamma_0, \rho_1, \delta_1, \gamma_1, \beta_1, \rho_2, \delta_2, \gamma_2, \beta_2\}_i, \tag{36}$$

$$\rho_\nu - \zeta_\sigma \delta_\nu = \langle a_{n\sigma}^\dagger a_{m\sigma} \rangle_\Phi = \langle b_{n,-\sigma}^\dagger b_{m,-\sigma} \rangle_\Phi,$$

$$\gamma_\nu + \beta_\nu = \langle a_{n\sigma}^\dagger b_{m\sigma} \rangle_\Phi,$$

$$\gamma_\nu - \beta_\nu = \langle b_{n\sigma}^\dagger a_{m\sigma} \rangle_\Phi, \quad \nu = 1, 2, 3. \tag{37}$$

Здесь $\mathbf{m} = \mathbf{n} + \mathbf{l}_\nu$, $\mathbf{l}_\nu = (0,0)$, $(1,1)$ или $(2,0)$ для $\nu = 0, 1, 2$. Параметр $\beta_0 \equiv 0$ не включен в $\{y_i\}$ и $\zeta_\sigma = \sigma/|\sigma| = \pm 1$.

Из явной зависимости $\bar{H}(y_i)$ находим линеаризованный гамильтониан

$$\bar{H}_L = \sum_{k\sigma} \hat{h}_{k\sigma} + \bar{H} - \sum_\nu \frac{\partial \bar{H}}{\partial y_\nu} y_\nu, \tag{38}$$

$$\hat{h}_{k\sigma} = A_k \delta_{i,j} + \begin{pmatrix} -\zeta_\sigma \Delta_k & V_k' + iV_k'' \\ V_k' - iV_k'' & \zeta_\sigma \Delta_k \end{pmatrix}_{ij} \begin{pmatrix} a_{k\sigma}^\dagger \\ b_{k\sigma}^\dagger \end{pmatrix}_i \begin{pmatrix} a_{k\sigma} \\ b_{k\sigma} \end{pmatrix}_j, \tag{39}$$

$$\{A_k, \Delta_k, V_k'\}_\mu = \frac{1}{4} \sum_{\nu=0}^2 \left\{ \frac{\partial \bar{H}}{\partial \rho_\nu}, \frac{\partial \bar{H}}{\partial \delta_\nu}, \frac{\partial \bar{H}}{\partial \gamma_\nu} \right\}_\mu \cos k_x l_x \cos k_y l_y,$$

$$V_k'' = \frac{1}{4} \sum_{\nu=0}^2 \frac{\partial \bar{H}}{\partial \beta_\nu} \sin k_x l_x \cos k_y l_y.$$

В выражениях под знаком суммы $l = l(\nu) = (0, 0)$, $(1, 1)$ или $(2, 0)$ для $\nu = 0, 1, 2$. В свою очередь собственные функции и энергии линеаризованной задачи (38), (39)

$$\chi_{\lambda k \sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} c_k + \zeta_{\sigma} s_k & c_k - \zeta_{\sigma} s_k \\ c_k - \zeta_{\sigma} s_k & -c_k - \zeta_{\sigma} s_k \end{pmatrix}_{ij} \begin{pmatrix} e^{i\theta} a_{k\sigma}^{\dagger} \\ e^{-i\theta} b_{k\sigma}^{\dagger} \end{pmatrix}_j, \quad (40)$$

$$E_k^{(2)} = A_k \mp [\Delta^2 + V_0^2]^{1/2}, \quad V_0^2 = (V_k')^2 + (V_k'')^2, \quad (41)$$

$$c_k = \cos \phi_k; \quad s_k = \sin \phi_k, \quad \text{tg } 2\phi_k = -\Delta_k/V_0, \quad \text{tg } 2\theta_k = V_k''/V_k'$$

позволяют вычислить средние (36) и замкнуть процедуру самосогласования.

Вычисление плотности состояний $\langle n_k \rangle_{\Psi} = \langle \tilde{n}_k \rangle_{\Phi}$ для коррелированного состояния с димерной структурой валентных связей производится аналогично нахождению средней энергии. Если ограничиться линейным приближением по нелокальным одноэлектронным средним $\rho_l, \delta_l, \gamma_l, \beta_l, l \neq 0$, но полностью учесть все порядки от локальных средних ($l = 0$), то получим

$$\langle \tilde{n}_k \rangle_{\Phi} = \rho_0 + \cos k_x G_0 + \sum_{\mu=1}^4 G_{\mu} \{ \rho_k, \delta_k, \gamma_k, \beta_k \}_{\mu}. \quad (42)$$

Здесь $G_{\mu} = G_{\mu}(\rho_0, \delta_0, \gamma_0)$, $\mu = 0, \dots, 4$, — явные, хотя и громоздкие функции от локальных средних (36), а остальные величины под знаком суммирования определяются функциями заполнения $f_{\lambda k} = f_F(E_{\lambda k} - \mu)$ зонных состояний линеаризованной задачи:

$$\rho_k = \frac{1}{2}(f_{1k} + f_{2k}), \quad \delta_k = \frac{1}{2}(f_{1k} - f_{2k}) \sin 2\phi_k, \quad \gamma_k + i\beta_k = \frac{1}{2}(f_{1k} - f_{2k}) e^{2i\theta_k} \cos 2\phi_k.$$

Уравнения, определяющие величины ϕ_k, θ_k , даны выше.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

При расчете эффективных дырочных возбуждений на фоне основного состояния с димерной структурой валентных связей используем имеющую место для этих состояний малость нелокальных одноэлектронных средних (36) ($l \neq 0$) в сравнении с локальными внутридимерными средними ($l = 0$). Поэтому при построении эффективных дырочных возбуждений создаем исходный набор операторов $q_{jk\sigma}$ на базе локальных операторов, относящихся к n -ому димеру:

$$q_{jk\sigma} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_n e^{ikn} q_{jn\sigma},$$

$$q_{jn\sigma} = \{ g_{n\sigma}, \quad u_{n\sigma}, \quad g_{n\sigma} n_{n,-\sigma}^g (1 - n_{n\sigma}^u) (1 - n_{n,-\sigma}^u), \quad u_{n\sigma} n_{n,-\sigma}^u (1 - n_{n\sigma}^g) (1 - n_{n,-\sigma}^g),$$

$$u_{n,-\sigma}^{\dagger} g_{n,-\sigma} g_{n\sigma} (1 - n_{n\sigma}^u), \quad g_{n,-\sigma}^{\dagger} u_{n,-\sigma} u_{n\sigma} (1 - n_{n\sigma}^g) \}_{j}. \quad (43)$$

Операторы $q_{jn\sigma}$ с $j > 2$ генерируются из одночастичных операторов $g_{n\sigma}, u_{n\sigma}$ путем коммутации с оператором преобразования W .

Матрицы

$$s_{ij} = \langle \Phi_0 q_{in\sigma}^{\dagger} | q_{jn\sigma} \Phi_0 \rangle,$$

$$H_{ij} = \langle \Phi_0 q_{in\sigma}^\dagger | \tilde{H} | q_{jn\sigma} \Phi_0 \rangle$$

вычисляются в линейном по нелокальным средним приближении (для примера, при $n = 1$, $U/t = 8$ для локальных, $l = 0$, и нелокальных, $l \neq 0$, средних y_i в (36) имеем (0.5, 0.399, 0.227) и (0, -0.036, 0.042, -0.06, 0, -0.022, 0.049, 0.056)). В таком приближении элементы матриц s_{ij} , H_{ij} выражаются в виде разложений, аналогичных разложению (42) для $\langle n_k \rangle$, со своими коэффициентами вместо G_μ . Для каждой пары (i, j) эти коэффициенты найдены как явные функции от локальных средних. В результате s_{ij} , H_{ij} полностью известны из решения линеаризованной задачи \tilde{H}_L . Поскольку величины $\rho_k, \delta_k, \gamma_k, \beta_k$ в разложениях типа (42) пропорциональны фермиевским функциям заполнения $f_{\lambda k} = f_F(E_{\lambda k} - \mu)$ одноэлектронных уровней в функции $|\Phi_0\rangle$, то число ненулевых собственных значений эрмитовой матрицы s_{ij} , вычисленной в таком приближении, оказывается зависящим от положения k по отношению к границе Ферми. В частности, для $n = 1$ имеем 3 ненулевых собственных значения S_λ . Этапы расчета включают:

- 1) вычисление матриц s_{ij} , H_{ij} ;
- 2) нахождение собственных значений и собственных векторов эрмитовой и положительно определенной матрицы

$$s_{ij} u_{j\lambda} = u_{i\lambda} S_\lambda;$$

3) выделение из них собственных векторов $\lambda = 1, \dots, L_0(k)$ с ненулевой нормой $S_\lambda \neq 0$;

- 4) построение на основе этих векторов базиса операторов

$$Q_{\lambda k\sigma} = \sum_i q_{ik\sigma} u_{i\lambda}, \quad \lambda = 1, \dots, L_0(k)$$

с отличной от нуля нормой (26), которые используются для построения дырочных возбуждений;

- 5) вычисление матрицы (28) ранга L_0 , равной

$$S_\lambda^{-1/2} H_{\lambda\lambda'} S_{\lambda'}^{-1/2} = S_\lambda^{-1/2} u_{i\lambda}^* h_{ij} u_{j\lambda'} S_{\lambda'}^{-1/2},$$

диагонализация которой определяет векторы (25) и энергии $E_{k,\nu}$ эффективных дырочных (многочастичных) возбуждений при данном k и данном исходном наборе операторов $q_{jk\sigma}$. Аналогичным образом вычисляются также амплитуды $M^\nu(k_e)$ в спектральных функциях (29).

Заметим, что в методе проекционных операторов [29] аналогом матриц s_{ij} , H_{ij} служат

$$s_{ij}(k) = \langle [q_{ik\sigma}^\dagger, q_{jk\sigma}]_+ \rangle_\Psi, \quad F_{ij} = \langle [q_{ik\sigma}^\dagger, [H, q_{jk\sigma}]_-]_+ \rangle_\Psi$$

вместо наших матриц

$$s_{ij}^h = \langle \tilde{q}_{ik\sigma}^\dagger \tilde{q}_{jk\sigma} \rangle_\Psi, \quad s_{ij}^e = \langle \tilde{q}_{ik\sigma} \tilde{q}_{jk\sigma}^\dagger \rangle_\Psi,$$

используемых отдельно для дырочных либо электронных возбуждений. В методе [29] эффективные электронные и дырочные возбуждения определяются одновременно из полюсов функции $\langle \{ S^{-1/2} F S^{-1/2} - \omega \}^{-1} \rangle$.

Литература

1. E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
2. J. W. Allen, R. Claessen, R. O. Anderson et al., in *The Physics of the Hubbard model*, ed. by D. K. Campbell, JMP Carmelo and F. Guinea, Plenum Press, NY (1994).
3. R. O. Anderson, R. Claessen, J. W. Allen et al., *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3163 (1993).
4. D. M. King, Z. X. Shen, D. S. Dessau et al., *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3159 (1993).
5. K. Gofron, J. C. Campuzano, H. Ding, C. Gu et al., *J. Phys. Chem. Sol.* **54**, 1193 (1993).
6. D. M. King, Z. X. Shen, D. S. Dessau et al., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3289 (1993).
7. D. S. Dessau, Z.-X. Shen, D. H. King et al., *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2781 (1993).
8. H. Ding, J. C. Campuzano, A. F. Bell et al., *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2284 (1995); *Phys. Rev. B* **54**, 9678 (1996).
9. T. E. Mason, G. Aeppli, S. M. Hayden et al., *Phys. Rev. Lett.* **71**, 919 (1993).
10. G. Senator and N. H. March, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 445 (1994).
11. Ю. А. Изюмов, М. И. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, Наука, Москва (1994).
12. M. Hamada, H. Shimahara, and H. Mori, *Phys. Rev. B* **51**, 11597 (1995).
13. F. Hu, S. K. Sarker, and C. Jayarakash, *Phys. Rev. B* **50**, 17901 (1994).
14. X. G. Wen, F. Wilezek, and A. Zee, *Phys. Rev. B* **39**, 11413 (1989).
15. E. Dagotto, A. Moreo, F. Ortolani et al., *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1918 (1991).
16. E. Dagotto, A. Nazarenko, and M. Boninsegni, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 728 (1994).
17. S. Haas, A. Moreo, and E. Dagotto, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4281 (1995).
18. Aebi et al., *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2757 (1994).
19. D. Duffy and A. Moreo, *Phys. Rev. B* **75**, 11882 (1995).
20. R. Preuss, W. Hanke, and W. von der Linden, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1344 (1995).
21. P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
22. E. J. Mele, *Phys. Rev. B* **38**, 8940 (1988).
23. I. I. Ukrainskii, *Int. J. Quant. Chem.* **52**, 413 (1994).
24. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, *ЖЭТФ* **110**, 342 (1996).
25. H. B. Schuttler and A. J. Fedro, *Phys. Rev. B* **45**, 7588 (1992).
26. J. H. Jefferson, H. Eskes, and L. F. Feiner, *Phys. Rev. B* **45**, 7959 (1992).
27. J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1317 (1985).
28. M. C. Gutzwiller, *Phys. Rev. A* **137**, 1726 (1965).
29. P. Unger and P. Fulde, *Phys. Rev. B* **48**, 16607 (1993).
30. R. J. Radke and M. R. Norman, *Phys. Rev. B* **50**, 9554 (1995).
31. M. R. Norman, M. Randeria, H. Dind, and J. C. Campuzano, *Phys. Rev. B* **52**, 615 (1995).
32. T. Dahm, *Phys. Rev. B* **54**, 10150 (1996).
33. F. Onufrieva, S. Petit, and Y. Sidis, *Phys. Rev. B* **54**, 12464 (1996).
34. E. Dagotto, A. Moreo, F. Ortolani et al., *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1918 (1991).