

СПИНОВЫЕ ВОСПРИИМЧИВОСТИ МОДЕЛИ ХАББАРДА В ЗОННОМ ПОДХОДЕ

А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова*

Институт химической физики Российской академии наук
117977, Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 апреля 1999 г.

Для 2D-модели Хаббарда исследованы свойства спиновых возбуждений на фоне однородного основного состояния с антиферромагнитной (или спиральной) спиновой структурой. Выражения для спиновой восприимчивости выведены в методе хаотических фаз (RPA) с использованием расщепленных хаббардовских зон в качестве нулевого приближения. Расчет коллективной моды с дисперсией $\omega(Q) = c|Q - (\pi, \pi)|$ вблизи $Q \sim (\pi, \pi)$ хорошо воспроизводит характеристики спиновых возбуждений, наблюдаемых в недопированных купратах. Для допированных систем с антиферромагнитной структурой основного состояния расчет $\chi''(Q, \omega \rightarrow 0)$ дает такую же моду с пиком при $Q \sim (\pi, \pi)$ независимо от типа поверхности Ферми. Показано, что в допированных системах со спиральной спиновой структурой основного состояния пики $\chi''(Q, \omega \rightarrow 0)$ имеют место при несоизмеримых квазиимпульсах Q , связанных с вектором спиральности.

PACS: 74.20.Mn; 71.10.Fd; 71.10.Li

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы был получен ряд принципиальных результатов, касающихся электронной структуры купратов [1–3]. Среди — них данные, полученные из разрешенных по углу фотоэмиссионных спектров (ARPES) [3] и неупругого рассеяния нейтронов [4], открытие «малой» поверхности Ферми [5] и анизотропной псевдощели нормального состояния недопированных образцов [6, 7] и др. Особое место занимают данные по неупругому рассеянию нейтронов. Обнаружено различное поведение спиновой восприимчивости $\chi(k, \omega)$ при $\omega \rightarrow 0$ в разных купратах — наличие низкочастотных пиков в $\chi(k, \omega)$ при $k \sim (\pi, \pi)$ в иттриевой керамике или при несоизмеримых квазиимпульсах $k \sim (\pi \pm \delta, \pi)$ в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) [3, 8–12]. Проведены абсолютные измерения интенсивности и дисперсии спиновых волн в допированных и недопированных купратах в высокочастотной области (вплоть до 300 мэВ) [13–15]. Обнаружены зависящие от температуры и сверхпроводящего перехода пики в $\chi(k, \omega)$ в иттриевой керамике [16, 17].

Многие из результатов часто трактуются в терминах зонного подхода в предположении однородного основного состояния. Например, согласно одной из интерпретаций [18–20], различное низкочастотное поведение $\chi(k, \omega)$ в разных купратах связывается с различным поведением границы Ферми невозмущенной зоны. Однако во всех зонных теориях [18–20] сохраняется этап перенормировки спиновой восприимчивости

*E-mail: movchin@center.chph.ras.ru

невозмущенной системы $\chi^0(k\omega)$ к восприимчивости сильно коррелированной системы. Каждый вариант перенормировки остается не совсем ясным. Например, в теории [18] выполняется перенормировка $\chi^0(k\omega)$ путем обменного взаимодействия спинов $\sim J \sum S_n S_m$. Между тем последнее само есть следствие сильного одноцентрового взаимодействия, существенно меняющего зонную структуру. В такой ситуации нельзя использовать невозмущенную зону даже в качестве основы. Такой вывод вытекает из наиболее последовательных расчетов характеристик Ферми жидкости со слабым взаимодействием, выполненных в работах [21–25]. Для случая ферми-граней с нестингом при наличии ван-хововских сингулярностей в четырех точках фазовой плоскости была показана неустойчивость системы к антиферромагнитному упорядочению — волне спиновой плотности при $U > 0$. Однако теория возмущений, использованная в работах [21–25], не применима к сильной и промежуточной связи, с которой мы имеем дело в купратах. Поэтому мы используем вариационный метод среднего поля, в которое изначально заложена конкретная реализация обнаруженной в [21] неустойчивости. Соответствующий электронный спектр будет характеризоваться зоной, расщепленной на две.

Цель данной работы — провести вычисление $\chi(k\omega)$, основываясь на конкретных вариационных реализациях картины верхней и нижней хаббардовских зон, сравнить количественные характеристики спин-волновых возбуждений с наблюдаемыми и понять, сохранится ли в таком подходе трактовка несоизмеримых пиков динамической восприимчивости. Исследование касается только однородных состояний с антиферромагнитной и спиральной спиновой структурой.

Данная постановка задачи представляется актуальной по ряду причин.

1. В настоящее время из абсолютных измерений неупругого рассеяния нейтронов найдены количественные характеристики коллективных спиновых возбуждений вплоть до $\omega \leq 300$ мэВ в допированных и недопированных системах [13–15]. Появилась возможность сравнения с ними тех же характеристик, рассчитанных на основе зонной картины.

2. Представление о расщеплении зоны на верхнюю и нижнюю хаббардовские подзоны имеет достаточные основания при большом отношении параметров U/t и возникает во многих подходах [1, 26, 27]. Оно не противоречит объяснению многих физических свойств купратов близостью ван-хововской сингулярности в спектре состояний к уровню Ферми (так называемый VHS-сценарий) [2]. Напротив, хаббардовская щель $\Delta_H \sim U$ ренормирует ширины зон, приводя их в соответствие с фотоэмиссионными данными, и усиливает ван-хововскую сингулярность. Однако двухзонная картина отличается от VHS-сценария Маркевица [2, 28]. Согласно последнему ван-хововская сингулярность расположена в середине зоны, а псевдощель $\Delta^* \ll U$ нормального состояния недопированных соединений объясняется малым расщеплением зоны, обязанным волнам зарядовой плотности или искажениям решетки. Другое объяснение псевдощели предложено в картине расщепленных хаббардовских зон [29–32]. Она связывается с тонкими деталями верхнего края нижней хаббардовской зоны и диэлектризацией отдельных участков обобщенной границы Ферми при малом допировании. Это позволяет объяснить «малую» поверхность Ферми и фазовую диаграмму на основе корреляционного механизма притяжения дырок. Последний сводится к спин-поляронному притяжению в $t - J$ -модели [31] или к его аналогу — корреляциям типа валентных связей в модели Хаббарда [29, 30]. В каждой из моделей сверхпроводимость d -симметрии удается описать без эмпирических параметров. При этом область допирования, в которой

существует двумерный антиферромагнетизм CuO_2 -плоскостей, значительно превышает область наблюдаемого объемного антиферромагнетизма и перекрывает область существования сверхпроводимости. Как в хаббардовской картине [30, 31], так и в картине слаборасщепленной единой зоны [2, 28] тип поверхности Ферми и свойства псевдощели очень чувствительны к малому параметру t' , учитывающему взаимодействие ближайших соседей, или параметру t_{00} , характеризующему прыжки между атомами кислорода. Расчет спиновых возбуждений системы должен помочь сделать выбор между двумя интерпретациями псевдощели Δ^* : либо это малое расщепление единой зоны [2, 28], либо это энергия $\Delta^*(k) = -(E_k - \mu) > 0$ нижней хаббардовской зоны на диэлектрических участках обобщенной границы Ферми [29, 30].

Ранее возможность описания коллективных спиновых возбуждений в зонном приближении неограниченного метода Хартри—Фока (т. е. метода среднего поля с чередованием проекции спина) была продемонстрирована на $1D$ -моделях Хаббарда, описывающих электронную структуру полиенов [33]. В данной работе мы проведем аналогичный расчет спиновой восприимчивости для $2D$ -модели Хаббарда и обсудим ее соответствие наблюдаемым характеристикам спиновых волн в купратах. Если угодно, предлагаемый подход является противоположным подходу Пайнса и др. [34]. В последнем в большой степени эмпирическая спиновая восприимчивость $\chi(k\omega)$ служит основой для описания свойств основного состояния и, в частности, сверхпроводящего спаривания. Наша же цель — при помощи явно сконструированных вариационных функций с разной спиновой структурой рассчитать восприимчивость, чтобы иметь возможность судить о реализуемости основного состояния той или иной спиновой структуры.

Используемый нами метод расчета $\chi(k\omega)$ аналогичен [33], но отличается от метода [35]. В последнем расщепление на нижнюю и верхнюю подзоны описывается в приближении Хаббард I. В этом подходе нет строгого определения зонных состояний и их структура не детализирована, что проявляется в известном невыполнении ряда правил сумм. Соответственно, наши результаты существенно отличаются от результатов [35]. В данной работе свойства спиновых возбуждений исследуются для простейших однородных состояний среднего поля — антиферромагнитных и спиральных состояний без учета корреляций типа валентных связей. Учет последних, согласно [29, 30], заметно снижает энергию, уменьшает диэлектрическую щель и сужает область допирования, в которой проявляется двумерный антиферромагнетизм. Следовательно, корреляции типа валентных связей должны влиять и на спиновые возбуждения системы. Мы не касаемся также актуальной темы — описания неоднородных зарядовых и спиновых структур — страйп-фаз с чередованием антифазных антиферромагнитных доменов и концентрацией заряда на их границах. К настоящему времени получены строгие экспериментальные доказательства существования таких статических страйп-фаз в $\text{LaNiO}_{4+\delta}$ [36, 37], $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_x\text{Nd}_y\text{CuO}_4$ [38, 39], $\text{La}_2\text{SrCuO}_{4.005}$ [40] и других соединениях. Получены данные, указывающие на наличие аналогичных динамических флуктуаций спина в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) [40–42]. Это дало основу для альтернативной интерпретации несоизмеримых пиков $\chi(k\omega)$ в LSCO (в отличие от их зонной трактовки [18–20]).

Несмотря на сказанное, в данной работе мы исследуем только однородные состояния среднего поля, чтобы понять, как двузонная природа хаббардовской коррелированной системы влияет на спиновую динамику.

2. ВОСПРИИМЧИВОСТЬ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ СРЕДНЕГО ПОЛЯ

Рассмотрим стандартную модель Хаббарда, дающую однозонное отображение CuO_2 -плоскости ВТСП:

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + H_U, \quad H_U = U \sum_n n_{n\uparrow} n_{n\downarrow}, \quad (1)$$

$$\epsilon_k = 2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y.$$

Спиновая восприимчивость определяется как фурье-образ от запаздывающей корреляционной функции [43, 44]:

$$\chi_{\alpha\beta}(q\omega) = \langle\langle S_\alpha^q(\omega); S_\beta^{-q} \rangle\rangle = \frac{i}{\hbar} \int e^{-i\omega t} \langle\langle S_\alpha^q(t); S_\beta^{-q} \rangle\rangle dt, \quad (2)$$

$$\langle\langle A(t); B \rangle\rangle = \begin{cases} \langle[A(t), B]\rangle, & t > 0, \\ 0, & t < 0. \end{cases} \quad (3)$$

В формуле (2) q -компоненты спина и плотности $\rho^q = 0.5n^q$ можно записать в единообразном виде:

$$S_\alpha^q = \frac{1}{2} \sum_{ss'} (\sigma_\alpha)_{ss'} r_{ss'}^q, \quad \rho^q = \frac{1}{2} \sum_{ss'} (\sigma_0)_{ss'} r_{ss'}^q, \quad (4)$$

$$r_{ss'}^q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{iqn} \langle c_{ns}^\dagger c_{ns'} \rangle. \quad (5)$$

Здесь σ_α с $\alpha = 1, 2, 3$ (или x, y, z) — матрицы Паули, σ_0 — единичная матрица.

В отсутствие взаимодействия ($U = 0$) тензор восприимчивости изотропен:

$$\chi_{\alpha\beta}^0(q\omega) = \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{2} \chi^0(q\omega), \quad \chi^0(q\omega) = -\frac{1}{N} \sum_k \frac{f_{k+q} - f_k}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \omega + i\gamma} \quad (6)$$

и определяется зонными энергиями ϵ_k и соответствующими фермиевскими функциями $f_k = f(\epsilon_k/kT)$. Такое же выражение имеют при $U = 0$ и корреляции плотности.

Существует несколько эквивалентных способов вывода восприимчивости, перенормированной взаимодействием: метод хаотических фаз (RPA), факторизации уравнений движения, суммирования лестничных диаграмм [44]. Все они приводят к одинаковому результату:

$$\chi_{\alpha\alpha}(q\omega) = \frac{1}{2} \frac{\chi^0(q\omega)}{1 - U\chi^0(q\omega)}, \quad \alpha = x, y, z. \quad (7)$$

При больших U/t такой подход не может быть удовлетворителен в случае полузаполненной зоны или слабодопированных систем, так как их спектр далек от нулевого спектра ϵ_k . Для таких систем низшим состоянием среднего поля являются антиферромагнитные (или спиральные) состояния, в которых одноэлектронные уровни образуют верхнюю и нижнюю хаббардовские зоны, разделенные щелью

$$E_{k\lambda-1(2)} = \frac{\epsilon_k + \epsilon_{\bar{k}}}{2} \mp \sqrt{\delta\epsilon_k^2 + U^2 d_0^2}, \quad \delta\epsilon_k = \frac{1}{2}(\epsilon_k - \epsilon_{\bar{k}}), \quad \bar{k} = k - (\pi, \pi). \quad (8)$$

Здесь $d_0 = (-1)^n \sigma / |\sigma| \langle n_{n\sigma} \rangle$ — чередующаяся спиновая плотность.

Распространение исследований на коррелированные состояния показало [29, 30], что и при учете корреляций типа валентных связей двумерный антиферромагнетизм и расщепление зоны на две подзоны сохраняются в достаточно большой области допирования. Наиболее убедительный аргумент в пользу такой картины — определение псевдощели в нормальном состоянии как связанной с диэлектризацией отдельных участков границы Ферми и возможной только при наличии щели между верхней и нижней подзонами [29, 30]. Сказанное означает, что спектр (8) реально существующей расщепленной зоны должен использоваться при расчете нулевой восприимчивости $\chi^0(q\omega)$ и при дальнейшей ее перенормировке с учетом взаимодействия. Осуществление такой программы и является целью данной работы.

Для простоты берем за основу антиферромагнитные решения среднего поля без учета корреляций типа валентных связей (хотя именно последние согласно [29, 30] обеспечивают притяжение дырок в d -канале и сверхпроводимость). В соответствии с этим делим исходный гамильтониан (1) на линеаризованный гамильтониан, отвечающий самосогласованному решению с чередованием спинов, и оставшуюся часть, выступающую в качестве возмущения:

$$H = H_L + V, \quad V = H_U - (H_U)_L. \quad (9)$$

Собственные состояния линеаризованного гамильтониана, отвечающие зонным энергиям (8), равны

$$b_{k\lambda\sigma}^\dagger = \sum_i \{c_{k\sigma}^\dagger, c_{\bar{k}\sigma}^\dagger\}_i U_{i\lambda}(k\sigma), \quad i, \lambda = 1, 2, \quad \bar{k} = k + (\pi, \pi), \quad (10)$$

$$U_{i\lambda}(k\sigma) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_k & -\xi_\sigma \sin \varphi_k \\ \xi_\sigma \sin \varphi_k & \cos \varphi_k \end{pmatrix}, \quad \text{tg } 2\varphi_k = \frac{\delta\epsilon_k}{U d_0}, \quad \xi_\sigma = \frac{\sigma}{|\sigma|}, \quad \delta\epsilon_k = \frac{1}{2}(\epsilon_k - \epsilon_{\bar{k}}). \quad (11)$$

Обратное преобразование базисных операторов запишется в виде

$$c_{k\sigma}^\dagger = \sum_\lambda U_{i_k\lambda}(k\sigma) b_{\bar{k}\lambda\sigma}^\dagger, \quad (12)$$

где \underline{k} — квазиимпульс, приведенный к магнитной зоне Бриллюэна F ($|\underline{k}_x \pm \underline{k}_y| < \pi$), и i_k — соответствующий индекс приведения: $i_k = 1$, $\underline{k} = k$ при $k \in F$ или $i_k = 2$, $\underline{k} = k - (\pi, \pi)$ при $k \notin F$.

Условие самосогласованности решения, т. е. уравнение для величины d_0 , имеет известный вид:

$$1 = U \frac{1}{N} \sum_k^F \frac{1}{2g_k} (f_{k1} - f_{k2}), \quad g_k = \sqrt{\delta\epsilon_k^2 + U^2 d_0^2}. \quad (13)$$

Индекс F у знака суммы означает, что суммирование по k ведется внутри магнитной зоны Бриллюэна, $f_{k1(2)}$ — фермиевские функции для состояний нижней и верхней зон.

Уравнение дает большое значение для критического уровня допирования δ_c , отвечающего переходу антиферромагнитного решения в парамагнитное: $\delta_c \sim 0.45$ при

$U/t = 8$. При учете корреляций типа валентных связей [29, 30] это значение снижается до $\delta_c \sim 0.3$. Однако оба значения превышают область существования объемного антиферромагнетизма ($\delta_{exp} \sim 0.05$). Тем не менее вариационные расчеты энергии [30, 45] и расчеты в методе слэив-бозонов [46, 47] позволяют говорить о большом радиусе, $R_{AF} \gg a$, двумерных антиферромагнитных корреляций. Отметим также, что правильную температуру Нееля, $T_N \sim 4t^2/U$, нельзя получить из уравнения (13), из которого следовало бы $T_N \sim U/4$ (при $U/t \sim 8$). Возможно, T_N уменьшится при учете многократного рассеяния электронов с помощью паркетных диаграмм [21–23]. Но опять-таки подчеркнем, что это суммирование имеет смысл только при малом параметре U/t . При больших U/t невозможность описания T_N с помощью уравнения (13) означает, скорее, необходимость перехода к неоднородным решениям. Это следует из представлений [2, 37] о разрушении дальнего антиферромагнитного порядка при возникновении динамических или статических неупорядоченных антиферромагнитных доменов или локальных спиральных состояний. Доказательства локального магнитного порядка купратов в широкой области допирования получены из ядерного квадрупольного резонанса на ядрах меди, μ -мезонного спинового резонанса и мессбауэровских измерений (см. [2] и ссылки там).

В силу удвоения элементарной ячейки среди корреляторов $\langle\langle r^q(\omega); r^{-q'} \rangle\rangle$ отличными от нуля будут корреляторы не только с $q' = q$, но и с $q' = q \pm (\pi, \pi) = \bar{q}$. Полный набор квазиимпульсов зоны Бриллюэна G исходной решетки будем характеризовать теперь вектором \underline{q} , приведенным к магнитной зоне Бриллюэна F , и соответствующим индексом приведения $i_q = 1, 2$:

$$\underline{q} = q + (\pi, \pi)(i_q - 1), \quad \underline{q} \in F. \quad (14)$$

Соответственно, полный набор пространственных гармоник (5) спина и плотности определим как

$$r_{\sigma\sigma'}^q = Y_{\sigma\sigma'}^{q,1}, \quad r_{\sigma\sigma'}^{\bar{q}} = Y_{\sigma\sigma'}^{q,2}, \quad q \in F, \quad \bar{q} = q + (\pi, \pi). \quad (15)$$

Выражение для этих компонент в базисе зонных операторов $b_{k\sigma}$ имеет вид

$$Y_{\sigma,\sigma'}^{q,m} = \frac{1}{N} \sum_k^F \sum_{\lambda\lambda'} M_{\lambda\lambda'}^m(qk\sigma\sigma') b_{\underline{k+q}\lambda\sigma}^\dagger b_{k\lambda'\sigma'}, \quad (16)$$

$$M_{\lambda\lambda'}^m(qk\sigma\sigma') = \sum_{ij} U_{i\lambda}(k+q, \sigma) U_{j\lambda'}(k, \sigma') \delta^{(2)}(i+j+m+i_{kq}). \quad (17)$$

Здесь $\lambda, \lambda', i, j = 1, 2$, вектор $\underline{k+q} = k+q + (\pi, \pi)(i_{kq} - 1)$ приведен к магнитной зоне Бриллюэна с соответствующим индексом приведения i_{kq} и $\delta^{(2)}$ — δ -функция по модулю 2.

Из симметрии задачи следует, что корреляции $\langle\langle Y_{\sigma,\sigma'}^{q,m}; Y_{s,s'}^{-q,m'} \rangle\rangle$ между поперечными ($\sigma = -\sigma'$) и продольными ($\sigma = \sigma'$) компонентами отсутствуют. Начнем с вычисления отличных от нуля поперечных корреляторов

$$D_{ij}(q\omega\underline{\sigma}\sigma) = \langle\langle Y_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}}^{q,i}; Y_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}}^{-q,j} \rangle\rangle. \quad (18)$$

Из эквивалентных способов вывода выражения для восприимчивости используем простейший — метод факторизации уравнений движения [43]. Обращаясь к представлению (16) для $Y^{q,i}$, рассмотрим корреляционные функции

$$A_{\lambda_1, \lambda_2}^{qj}(k\underline{\sigma}t) = \langle \langle \vartheta_{\lambda_1, \lambda_2}^q(\underline{\sigma}, \sigma, t); Y_{\underline{\sigma}, \underline{\sigma}}^{-q, j} \rangle \rangle, \quad (19)$$

где $\underline{\sigma} = -\sigma$ и оператор

$$\vartheta_{\lambda\lambda'}^q(\underline{\sigma}, \sigma) = b_{k+q, \lambda, \underline{\sigma}}^\dagger b_{k\lambda', \sigma} \quad (20)$$

взят в момент времени t . Следуя [43] и дифференцируя (20) по времени, получаем

$$i \frac{d}{dt} A_{\lambda\lambda'}^{qj}(k\underline{\sigma}t) = \delta(t) \langle \langle \vartheta_{\lambda\lambda'}^q(\underline{\sigma}, \sigma), Y_{\underline{\sigma}, \underline{\sigma}}^{-q, j} \rangle \rangle|_{t=0} + \\ + (E_{k+q, \lambda} - E_{k\lambda'}) A_{\lambda\lambda'}^{qj}(k\underline{\sigma}t) + \langle \langle [\vartheta_{\lambda\lambda'}^q, V]_t; Y_{\underline{\sigma}, \underline{\sigma}}^{-q, j} \rangle \rangle. \quad (21)$$

Здесь $E_{k\lambda}$ — энергии (8) расщепленных зон ($\lambda = 1, 2$), а выражение для возмущения V через операторы $b_{k\lambda\sigma}$ дано в Приложении, формулы (П.1)–(П.3). При вычислении последнего члена в (21) оставляем в коммутаторе $[\vartheta, V]$ только такие операторы, которые воспроизводят пару частица–дырка $b_{k'+q, \lambda_1, \underline{\sigma}}^\dagger b_{k\lambda_2, \sigma}$ с тем же суммарным импульсом q на фоне основного антиферромагнитного состояния среднего поля (приближение малой концентрации возбуждений). В результате получим

$$[\vartheta_{\lambda\lambda'}^q, V]_t \simeq -U(f_{k+q, \lambda} - f_{k\lambda'}) \sum_i M_{\lambda\lambda'}^i(qk\underline{\sigma}\sigma) Y_{\underline{\sigma}, \sigma}^{q, i}(t). \quad (22)$$

Здесь операторы Y и функции M определяются формулами (16), (17), а все квазиимпульсы — приведенные, т. е. $k, q, k+q \in F$. Фермиевские функции $f_{k\lambda}$ отвечают уровням $E_{k\lambda}$ верхней и нижней хаббардовских зон. Повторяя этапы вывода в [43], найдем выражения для фурье-образов $A_{\lambda_1, \lambda_2}^{qj}(k\underline{\sigma}\omega)$ и $D_{ij}(q\underline{\omega}\sigma)$. Последние, в свою очередь, выражаются через суммы по k' от $A_{\lambda_1, \lambda_2}^{qj}(k'\underline{\sigma}\omega)$ с соответствующими весовыми функциями (17). В результате приходим к системе алгебраических уравнений для корреляторов D_{ij} (см. (18), (19)). Решение уравнений дает матричный аналог перенормированной поперечной восприимчивости для случая расщепленных зон:

$$D_{ij}(q\underline{\omega}\sigma) = \{[\hat{I} - U\hat{D}^0]^{-1}\hat{D}^0\}_{ij}. \quad (23)$$

Матрица второго порядка D_{ij}^0 в (23) равна

$$D_{ij}^0 = -\frac{1}{N} \sum_{\lambda\lambda'} \sum_k^F \frac{f_{k+q, \lambda} - f_{k\lambda'}}{E_{k+q, \lambda} - E_{k\lambda'} - \hbar\omega + i\gamma} R_{\lambda\lambda'}^{ij}, \quad (24)$$

$$R_{\lambda\lambda'}^{ij}(q, k, \underline{\sigma}\sigma) = M_{\lambda\lambda'}^i(qk\underline{\sigma}\sigma) M_{\lambda\lambda'}^j(qk\underline{\sigma}\sigma). \quad (25)$$

Используя определения (17), (11), получим следующие компактные выражения для R^{ij} :

$$R_{\lambda\lambda'}^{ii}(q, k, \underline{\sigma}\sigma) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + (-1)^{\lambda-\lambda'} \left[(-1)^{i+i_{kq}} \frac{\delta\epsilon_{kq}\delta\epsilon_k}{g_{kq}g_k} - \frac{\Delta^2}{g_{kq}g_k} \right] \right\}, \quad (26)$$

$$R_{\lambda\lambda'}^{12}(q, k, \underline{\sigma}\sigma) = R_{\lambda\lambda'}^{21}(q, k, \underline{\sigma}\sigma) = \frac{-\sigma}{2|\sigma|} \left\{ (-1)^{\lambda'} \frac{\Delta}{g_{kq}} - (-1)^\lambda \frac{\Delta}{g_k} \right\}, \quad (27)$$

$$\delta\epsilon_k = \frac{1}{2}(\epsilon_k - \epsilon_{\bar{k}}), \quad g_k = \sqrt{\delta\epsilon_k^2 + \Delta^2}, \quad \bar{k} = k + (\pi, \pi), \quad \Delta = U d_0, \quad (28)$$

а величины $\delta\epsilon_{kq}$, g_{kq} — аналогичные функции от приведенного квазиимпульса $\underline{k} + \underline{q} = k + q + (\pi, \pi)(i_{kq} - 1)$, где $i_{kq} = 1$ (2) при $k + q \in F$ ($\notin F$).

Диагональные элементы матрицы D_{ij} , вычисляемой из (24), непосредственно определяют поперечную восприимчивость

$$\chi''_{xx}(Q\omega) = \chi''_{yy}(Q\omega) = \frac{1}{2}\chi''_{+-}(Q\omega) = \frac{1}{2}\text{Im}\{D_{i_Q i_Q}(q\omega\sigma)\}, \quad (29)$$

где $q = Q - (\pi, \pi)(i_Q - 1)$ — квазиимпульс, приведенный к магнитной ячейке Бриллюэна и индекс $i_Q = 1$ (2) при $Q \in F$ ($\notin F$). Таким образом, диагональные компоненты D_{ii} непосредственно наблюдаются в неупругом нейтронном рассеянии. Недиагональные компоненты D_{ij} ($j \neq i$) могут вносить вклад лишь в локальные характеристики спиновой системы, в частности, измеряемые в ЯМР-экспериментах.

Для парамагнитного состояния среднего поля ($\Delta = 0$, $U \neq 0$) диагональные компоненты матрицы (23) переходят в известные выражения (7), (6) перенормированной восприимчивости $\chi_{+-}(Q\omega)$, рассчитанные с использованием нерасщепленной зоны в качестве нулевого приближения. Для недопированного антиферромагнитного случая $n = 1$ для фермиевских функций в (24) имеем $f_{k1} = 1$, $f_{k2} = 0$. Значит, низкочастотные коллективные спин-волновые возбуждения определяются в этом случае межзонным взаимодействием частица-дырка. Дисперсия $\omega(q)$ поперечных спиновых волн находится из уравнения для полюса в выражении (24), т. е. из уравнения

$$\text{Det} = \|\delta_{ij} - U D_{ij}^0(q\omega\sigma)\| = 0. \quad (30)$$

Покажем, что при $q \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$ поведение детерминанта имеет вид

$$\text{Det} = aq^2 - b\omega^2 + O(q^3, \dots). \quad (31)$$

В самом деле, при $q \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$ имеем $D_{12} \sim \omega$, $1 - UD_{11} \rightarrow \text{const} + O(q^2, \omega^2)$ и

$$1 - UD_{22}^0 = \left[1 - \frac{U}{N} \sum_k^F \frac{f_{qk,1} - f_{k2}}{2g_k} \right] + (aq^2 - b'\omega^2) + O(q^3). \quad (32)$$

Но выражение в квадратных скобках в (32) обращается в нуль согласно уравнению (13), определяющему самосогласованную величину d_0 чередующегося спина. В результате для Q вблизи (π, π) или $|q| = |Q - (\pi, \pi)| \ll \pi$ имеем

$$\chi''_{+-} = \text{Im}D_{22}(q\omega) = A\delta(c^2q^2 - \omega^2) = \frac{A}{2cq}\delta(\omega - c|q|), \quad q < 1. \quad (33)$$

Таким образом, зонный расчет спиновой восприимчивости при хаббардовском расщеплении зоны воспроизводит характерную дисперсию поперечных спиновых волн $\omega(Q) = c|q|$ для Q вблизи (π, π) , получаемую в гейзенберговской модели недопированного антиферромагнетика [44] и четко наблюдаемую в ряде купратов [13–15]. Аналогичные алгебраические уравнения (см. Приложение) описывают корреляции плотности и продольной восприимчивости χ_{zz} , где z — ось квантования спина антиферромагнитного состояния. В отличие от поперечных компонент низкочастотная коллективная мода спиновых возбуждений с z -поляризацией отсутствует.

В заключение разд. 2. приведем пример модели, характеризующейся щелью в спектре спиновых возбуждений. Добавим к гамильтониану (1) взаимодействие $\Delta H = B_0(-1)^n S_{zn}$ спинов с чередующимся «магнитным полем», параллельным оси квантования спинов антиферромагнитного состояния. Такое взаимодействие может грубо моделировать обменное взаимодействие спинов соседних CuO_2 -плоскостей. Тогда спектр зонных энергий определяется формулой (8), но с новым $g_k = \sqrt{(\delta\epsilon_k^2 + (Ud_0 - B_0)^2)}$, а самосогласованное значение d_0 чередующегося спина находится теперь из уравнения

$$1 = U \frac{1}{N} \sum_k^F \frac{1}{2g_k} \left(1 - \frac{B_0}{Ud_0}\right) (f_{k1} - f_{k2}) \quad (34)$$

с новым g_k . Уравнение (34) имеет два решения с разным знаком, $\nu = \text{sign}(d_0 B_0)$. Для решения с $\nu = -1$, отвечающего более низкой энергии, при малых ω/t , B_0/t и $q = |Q - (\pi, \pi)| < 1$ величина $1 - UD_{22}^0$ имеет следующее разложение:

$$1 - UD_{22}^0 = (aq^2 - b'\omega^2 - \nu\Delta_{Sp}^2) + O(q^3). \quad (35)$$

Оно отличается от (32) членом со спиновой щелью $\Delta_{Sp} = |B_0/(Ud_0)|$. В результате для низшего по энергии антиферромагнитного состояния ($\nu = -1$) из (35) получаем типичную спин-щелевую зависимость спектра возбуждений:

$$\omega(Q) = \sqrt{c^2 q^2 + \Delta_{Sp}^2}, \quad q = Q - (\pi, \pi). \quad (36)$$

Для метастабильного антиферромагнитного решения с $\nu = 1$, напротив, $\omega(Q)$ обращается в нуль при конечных $|q| \neq 0$, что говорит о неустойчивости решения. В приведенной модели щель проявляется при любой поляризации поперечных спиновых волн. В ряде купратов [14, 15] щель наблюдается только для одной из компонент поперечных спиновых возбуждений с поляризацией, перпендикулярной ab -плоскости. Одно из возможных описаний такого поведения могла бы дать модель с введением чередующегося «магнитного поля», перпендикулярного ориентации средних спинов антиферромагнитного состояния. Такая модель не противоречит обсуждаемому в [48] неколлинеарному расположению антиферромагнитно чередующихся спинов разных CuO_2 -слоев в Pr_2CuO_4 . Однако количественное описание требует введения в модель анизотропии спиновых взаимодействий, фиксирующей антиферромагнитную ось в пространстве. Полный учет такого рода спин-орбитальных и дипольных спин-спиновых взаимодействий — отдельная задача.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ: АНТИФЕРРОМАГНИТНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Начнем с недопированных систем ($n = 1$). В этом случае полностью заполненная нижняя хаббардовская зона ($f_{1k} = 1$) отделена щелью от незаполненной верхней зоны ($f_{2k} = 0$) и спиновые возбуждения определяются только «межзонными» парами частица-дырка. При этом двухчастичные возбуждения $\omega_q^{(0)} \geq 2\Delta$ (полюсы «нулевой» восприимчивости (23)) характеризуются щелью 2Δ , так что $\text{Im} D_{ij}^{(0)} = 0$, $\omega < 2\Delta$, $\gamma \rightarrow 0$. Дисперсия низкочастотной ветви коллективных возбуждений ω_q находится из уравнения для полюса перенормированной восприимчивости (24) при $\gamma \rightarrow 0$, а интенсивность $I(Q)$ в выражении

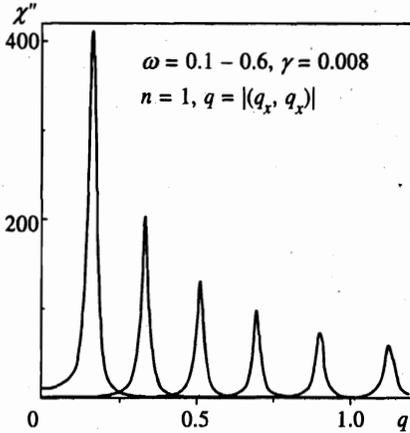


Рис. 1

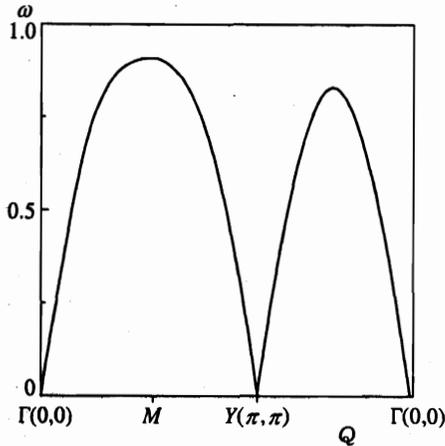


Рис. 2

Рис. 1. Восприимчивости $\chi''(q, \omega)$ как функции приведенного квазиимпульса q (в единицах [рад/а]) при значениях $\omega = 0.1 \div 0.6$ для недопированной системы с $U = 8, t' = -0.05$. Кривые рассчитаны при $\gamma = 0.008$. Все величины U, t', ω, γ даны в единицах t

Рис. 2. Дисперсия коллективной моды спиновых возбуждений $\omega(Q)$ (в единицах t) для квазиимпульса, меняющегося вдоль контура $\Gamma(0, 0) - M(\pi, 0) - Y(\pi, \pi) - \Gamma$. Параметры модели: $U/t = 8, t'/t = -0.05, n = 1$

$$\chi''_{x(y)}(Q\omega) = I(Q)\delta(\omega - \omega_q), \quad q = Q - (\pi, \pi)i_Q \in F \tag{37}$$

определяется вычетом функции $D_{ii}(\omega)$ при $\gamma \rightarrow 0$. Более наглядное представление дает непосредственный расчет χ'' согласно (33), (23) при конечном $\gamma > 0$, имитирующем конечное разрешение по энергии. На рис. 1 представлена типичная зависимость $\chi''(Q, \omega)$ для ряда значений ω вдоль сечения $q_x = q_y$ при $\gamma = 0.008t$ (q — квазиимпульс, приведенный к магнитной зоне Бриллюэна). Положение пика повторяет дисперсию ω_q , найденную из уравнения (30). Высота пика и его ширина $\Delta\omega_{1/2}$ зависят от искусственно введенного параметра γ таким образом, что интенсивность пика

$$I(Q) = \int \chi''(Q\omega)d\omega = \pi\gamma\Delta\omega_{1/2}$$

не зависит от γ при малых γ . На рис. 2 представлена типичная зависимость ω_Q для Q , меняющегося вдоль контура $\Gamma M Y \Gamma$. Функция ω_Q периодична в пределах магнитной зоны Бриллюэна, т. е. ω_Q вблизи точки $Y(\pi, \pi)$ повторяет ω_Q вблизи точки $\Gamma(0, 0)$. В отличие от ω_Q , интенсивность $I(Q)$ периодична лишь в основной зоне Бриллюэна. График безразмерной величины $I(Q)$ для квазиимпульса Q , меняющегося вдоль контура $\Gamma M Y \Gamma$, представлен на рис. 3. Функция $I(Q)$ имеет разное поведение $\sim |Q|$ или $\sim |Q - (\pi, \pi)|^{-1}$ соответственно в окрестности точек Γ и Y . Таким образом, для недопированного диэлектрика зонный расчет, как и стандартное описание спиновых волн в гейзенберговской модели, дает при малых ω линейную дисперсию $\omega_Q \sim cq$ и пик поглощения отвечает $Q = (\pi, \pi)$ согласно зависимости $I(Q) \sim 1/q$ при $q = |Q - (\pi, \pi)| < 1$.

Сравним расчетные характеристики спиновых волн недопированных систем с экспериментальными. Скорость спиновых волн $c = d\omega/dq|_{q=0}$ в наших моделях с $U/t = 8$,

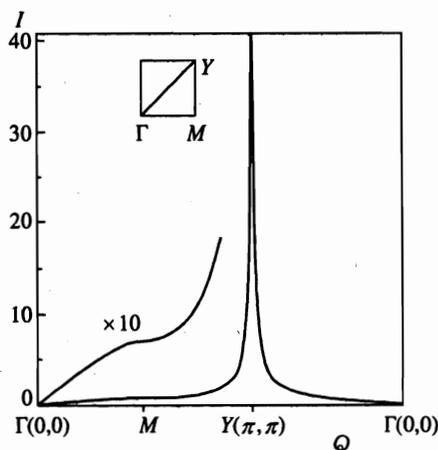


Рис. 3

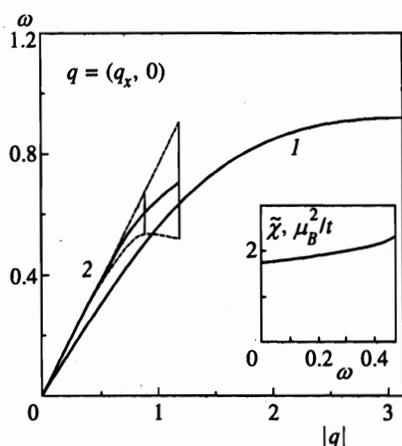


Рис. 4

Рис. 3. Зависимость интенсивности $I(Q)$ пика в $\chi''(Q, \omega)$, определенной выражением (37) для квазипульса, меняющегося вдоль контура $\Gamma - M - Y - \Gamma$. Параметры модели те же, что на рис. 2

Рис. 4. Зависимость частоты коллективной моды $\omega(q)$ (в единицах t) от приведенного квазипульса $q = |(q_x, 0)|$ (в радианах) для недопированной системы (кривая 1) и при допировании $1 - n = 0.15$ (кривая 2). Кривая 2 рассчитана на базе антиферромагнитного решения среднего поля как зависимость положения максимума $\omega_{max}(q)$ восприимчивости $\chi''(q, \omega)$ при фиксированном q . Длина вертикальных отрезков равна ширине $\Delta\omega_{1/2}$ пика на полувысоте. Штрихи — для наглядного представления уширения моды. На вставке — зависимость от ω величины (38) в единицах μ_B^2/t

$t' = \pm 0.05t$ варьируется в пределах $c = 0.60 \div 0.58 t/\text{рад}$. При оценках $t = 0.4 \div 0.5 \text{ эВ}$ [49, 50] ($J = 4t^2/U = 80 \div 125 \text{ мэВ}$) получаем $c = 880 \div 1140 \text{ мэВ} \cdot \text{А}$. Эти величины вполне согласуются с величинами $c_{exp} = 850, 1020, 800 \text{ мэВ} \cdot \text{А}$, найденными из измерений соответственно в купратах $\text{La}_2\text{CuO}_4, \text{Nd}_2\text{CuO}_4$ и Pr_2CuO_4 [13]. Абсолютные измерения [13] сечений неупругого рассеяния в высокочастотной области позволили авторам извлечь характеристику спектрального веса, а именно, величину

$$\tilde{\chi}_{2D}(\omega) = \frac{1}{2} (g\mu_B)^2 \int dQ_{2D} \text{Im}\chi(Q\omega) / \int dQ_{2D}. \quad (38)$$

Множитель перед интегралом с магнетоном Бора μ_B обязан различию определений χ в (2) и в [13]. В экспериментальной области, $\omega \leq 300 \text{ мэВ}$, величина (38), почти не зависящая от ω , составила $\tilde{\chi}_{exp} = 2.7, 1.8, 2.3 \mu_B^2/\text{эВ}$ для тех же купратов [13]. Величина $\tilde{\chi}_{2D}$, вычисленная нами для моделей с $U/t = 8$, также слабо зависит от ω (см. вставку на рис. 4) и составляет $\tilde{\chi}_{2D} \approx 2 \mu_B^2/t$, что равно $\tilde{\chi}_{2D} \approx 5 \div 4 \mu_B^2/\text{эВ}$ при $t = 0.4 \div 0.5 \text{ эВ}$. Как и ожидалось, этот результат ниже результата $\tilde{\chi}_{2D}^{cl} = S(g\mu_B)^2/2J$ ($S = 1/2, J = 4t^2/U$), полученного для классической модели Гейзенберга без учета квантовых поправок. Последняя величина равна $\tilde{\chi}_{2D}^{cl} = 8 \mu_B^2/eV$ при $t = 0.5 \text{ эВ}$ ($J = 125 \text{ мэВ}$). Вычисленные нами величины вдвое превышают экспериментальные значения. Главная, на наш взгляд,

причина расхождений, упоминавшаяся в [13], состоит в следующем. При сравнении с экспериментом в расчетном формфакторе рассеяния нейтрона на Си не учтен множитель α_d^4 , отражающий амплитуду α_d d -орбиты меди в гибридной p - d -орбите (однодырочной «узельной орбите» однозонной модели Хаббарда [49, 50]). При оценках $\alpha_d \sim 0.86$ [49, 50] поправочный множитель $\alpha_d^4 \approx 0.55$ позволит согласовать расчетные значения χ с экспериментальными.

Таким образом, зонный подход дает разумное количественное описание спиновых возбуждений в недопированных системах. Это позволяет применить его к допированным системам, чтобы ответить на вопросы: 1) Как влияет допирование на дисперсию спиновых волн и релаксацию (ширину пиков поглощения)? 2) Действительно ли изменение типа поверхности Ферми, связываемое со знаком t' в [29–31], кардинально меняет низкочастотное поведение восприимчивости $\chi''(Q, \omega)$? 3) Каким образом параметры модели влияют на характеристики спиновых волн?

Расчеты $\chi(Q, \omega)$ для допированных систем ($n-1 \leq 0.2$) показывают, что при малых ω сохраняются четко выраженные коллективные спиновые возбуждения. Они проявляются в поперечной восприимчивости как пики в $\chi''(q\omega)$ с максимумом при $\omega = \omega_q$ и шириной $\Delta\omega_{1/2}$ на полувысоте. При малых $\omega < 0.4t$ ширина пика оказывается равной удвоенной искусственно введенной ширине $\Delta\omega_{1/2} = 2\gamma$ (при $g = 0.04t$). Однако она резко возрастает при увеличении ω начиная с $\omega \sim 0.4t$ ($|q| > 0.7$ рад). На рисунке 2 приведена дисперсия ω_q спиновых возбуждений для системы с $n = 0.85$. Размер вертикальных отрезков на кривой характеризует ширину $\Delta\omega_{1/2}$ пика $\chi''(q\omega)$ при фиксированном q . Скорость спиновых волн $c = d\omega/dq|_{q=0}$ несколько выше в допированных системах, что отвечает уменьшению диэлектрической щели Ud_0 при допировании. Резкое уширение и асимметрия пика при больших ω не позволяют продолжить кривую ω_q в область $q > 1.2$ рад.

Качественно указанная картина согласуется с измерениями $\chi''(q\omega)$ в LSCO в высокочастотной области, $25 \text{ мэВ} < \omega < 200 \text{ мэВ}$ [15]. Однако в низкочастотной области, $\omega < 20 \text{ мэВ}$, восприимчивость, рассчитанная для допированного антиферромагнитного состояния, не воспроизводит низкоэнергетических пиков при несоизмеримых квазиимпульсах $Q = (\pi \pm \delta, \pi)$, $Q = (\pi, \pi \pm \delta)$, наблюдаемых в LSCO [8–10]. В двух альтернативных подходах эти пики связывают либо с разным для разных купратов поведением ферми-границы «нулевой» зоны в условиях антиферромагнитных корреляций [8–10], либо с реально существующей спиновой и зарядовой суперструктурой — так называемыми страйп-фазами, обнаруженными в ряде купратов [38, 40–42]. Интерпретация первого типа имеет один существенный дефект. Она использует в основе нулевую восприимчивость, связанную с нулевым спектром ϵ_k . Одной из наших целей было изучение влияния ферми-поверхности на $\chi(k, \omega)$ в условиях расщепления зоны на верхнюю и нижнюю хаббардовские подзоны. Ранее, в [29–32], установлено, что в условиях двумерного антиферромагнетизма поверхности Ферми очень чувствительны к параметру t' , учитывающему диагональные прыжки. При смене знака t' меняется тип поверхности Ферми. При $t' > 0$ допирование формирует дырочные карманы вокруг значений $k \sim (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$, в то время как при $t' < 0$ — вокруг $k \sim (\pm\pi, 0)$, $(0, \pm\pi)$. Несмотря на такое различие, расчеты $\chi''(Q, \omega)$ по формулам (23), (25) для каждой из указанных систем, $t' > 0$ или $t' < 0$, дают близкие картины спиновых возбуждений $\omega_q = cq$ с небольшими вариациями скорости c , но не выявляют никаких пиков при несоизмеримых квазиимпульсах. Главное влияние на вариации c оказывают различия в диэлектрической щели Δ в системах разного типа и уменьшение Δ в процессе допи-

рования.

Причина такой нечувствительности дисперсии спиновых возбуждений к деталям зонных энергий при $\omega \ll t$ (в противоположность выводам работ [18–20]) состоит в том, что коллективная спиновая мода формируется из межзонных пар, частица верхней зоны — дырка нижней зоны. Именно для них весовые функции (25) (матричные элементы перехода) имеют порядок ~ 1 . При наличии диэлектрической щели ($E_{k+q,1} - E_{k,2} \geq 2\Delta \gg \omega$) детали зоны слабо влияют на межзонный вклад в выражение (24) для $\chi^0(q, \omega)$. При допировании и малых q и ω межзонный вклад в $\chi^0(q, \omega)$ остается основным. В самом деле, при малых ω из всех пар частица—дырка $\{b_{jk'}^\dagger, b_{1k\downarrow}\}$ одной и той же нижней зоны вклад в D_{ij}^0 (см. (24)) вносят только пары с квазиимпульсами $k' = k+q$ и k в узкой полосе вблизи границы Ферми. При малом допировании такие k, k' расположены близко к линиям нестинга. Но в этой области матричные элементы однозонных переходов и соответствующие весовые функции (25) малы, $R_{11} \ll |R_{12}|$. В результате всего (малости фазового объема и весовых функций) в слабодопированных системах при малых $\omega \ll t$ и $|q| < 1$ сохраняется обязанная межзонным парам коллективная мода с очень малым уширением. Только начиная с $\omega \geq 0.5t$ взаимодействие с однозонными парами приводит к резкому уширению коллективной моды.

Таким образом, расчет не обнаруживает несоизмеримых низкочастотных пиков в $\chi''(q, \omega)$ в картине антиферромагнитно-расщепленных зон ни при каком типе поверхности Ферми. Это противоречит предсказаниям [18–20], полученным с помощью более грубых перенормировок нулевой восприимчивости нерасщепленной зоны ϵ_k .

4. СПИНОВЫЕ ВОСПРИИМЧИВОСТИ В СЛУЧАЕ СПИРАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ

В свете сказанного более правдоподобным является объяснение несоизмеримых пиков как проявлений неоднородных спиновых и зарядовых структур, наблюдаемых в купратах [36–42]. Модельные расчеты методами Хартри—Фока [51–53] подтверждают возможность стабилизации таких структур. Более точные расчеты, с учетом корреляций типа валентных связей желательны, но достаточно сложны.

В данной работе мы ограничимся исследованием восприимчивости простейших спиновых структур — спиральных спиновых состояний среднего поля модели Хаббарда. Неясно, имеют ли такие состояния непосредственное отношение к купратам типа LSCO. В отличие от оксидов никеля, в LSCO несоизмеримые спиновые флуктуации неясно, возможно, динамический характер без явных признаков статических страйп-фаз. Ранее свойства электронной системы, взаимодействующей со спиновой системой в спиральном состоянии, изучались в [54]. В отличие от рассмотренной там $s-d$ -модели с двумя отдельными подсистемами, спинов и итинерантных электронов, в исследуемой нами модели Хаббарда локализованные спины формируются из самих же электронов. Это меняет электронный спектр и спектр магнитных флуктуаций по сравнению с [54].

Будут рассмотрены два типа спиральных состояний x - и xy -симметрии с векторами спиральности соответственно $Q = \pi(\eta, 1)$ и $Q = \pi(\eta, \eta)$. Разница энергий двух типов спиральных состояний среднего поля меньше ожидаемого выигрыша энергии от корреляций типа валентных связей. Поэтому только на основании средней энергии нельзя отдать предпочтение одному из двух типов состояний. Ниже некоторые обозначения, дублирующие обозначения разд. 2, имеют другое содержание. Например, Q — квазиимпульс, характеризующий спиральное состояние, а q — «квазиимпульс» спинового

возбуждения, меняющийся в пределах полной зоны Бриллюэна.

Спиральные состояния с вектором Q [44, 55] — это однодетерминантные состояния, характеризующиеся одноэлектронными средними вида

$$r_0 = \langle c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \rangle = \langle c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \rangle, \quad \langle r_{\sigma\sigma} \rangle = \langle c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \rangle = d_0 e^{i\xi_\sigma Q n}, \quad \xi_\sigma = \sigma/|\sigma|. \quad (39)$$

Линеаризованный гамильтониан модели Хаббарда для класса таких состояний имеет вид

$$H_L = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - U d_0 \sum_{k,\sigma} c_{k-Q/2,\sigma}^\dagger c_{k+Q/2,\sigma} + U(r_0^2 - d_0^2). \quad (40)$$

Здесь $\sigma = -\sigma$. Зонные энергии $E_{k\lambda}$, $\lambda = 1, 2$, и одноэлектронные операторы $b_{k\lambda}^\dagger$ гамильтониана (40) равны:

$$E_{k1(2)} = \frac{1}{2}(\epsilon_{k-Q/2} + \epsilon_{k+Q/2}) \mp g_k, \quad b_{k\lambda}^\dagger = \{c_{k-Q/2,\lambda}^\dagger, c_{k+Q/2,\lambda}^\dagger\}_i U_{i\lambda}, \quad (41)$$

$$g_k = \sqrt{\delta\epsilon_k^2 + U^2 d_0^2}, \quad \delta\epsilon_k = \frac{1}{2}(\epsilon_{k-Q/2} - \epsilon_{k+Q/2}), \quad (42)$$

$$U_{i\lambda}(k) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_k & \sin \varphi_k \\ \sin \varphi_k & \cos \varphi_k \end{pmatrix}, \quad \text{tg } 2\varphi_k = U d_0 / \delta\epsilon_k. \quad (43)$$

Здесь k пробегает все значения в полной зоне Бриллюэна. Определения в (41), (42) даны в форме, симметричной относительно $\sigma \rightarrow -\sigma$.

Знание собственных состояний и зон (41), (42) позволяет, в свою очередь, вычислить одноэлектронные средние (39), в частности d_0 :

$$d_0 = \frac{1}{2N} \sum_k \frac{U d_0 (f_{1k} - f_{2k})}{2g_k}. \quad (44)$$

Это замыкает процедуру самосогласования, т.е. минимизации энергии $\langle H \rangle$ по вариациям функции при фиксированном параметре Q . Последующая минимизация $\langle H \rangle$ по параметру Q спирального состояния определит оптимальный шаг «спирали».

На рис. 5 приведены зависимости от допирования параметра η , характеризующего вектор спиральности Q , и средней энергии для двух типов спиральных состояний с $Q = \pi(\eta, 1)$ и $Q = \pi(\eta, \eta)$.

При выборе линеаризованного гамильтониана в виде (40) взаимодействием, обеспечивающим существование коллективных спиновых возбуждений, служит возмущение $V = H - H_L = H_U - (H_U)_L$. Выражение для H_U через ферми-операторы $b_{k\lambda}$ выводится непосредственно и имеет следующий вид:

$$H_U = \frac{U}{N} \sum_{k_i, \lambda_i} U_{1\lambda_1}(k_1) U_{2\lambda_2}(k_2) U_{3\lambda_3}(k_3) U_{4\lambda_4}(k_4) b_{k_1, \lambda_1}^\dagger b_{k_2, \lambda_2} b_{k_3, \lambda_3}^\dagger b_{k_4, \lambda_4} \delta(k_1 - k_2 + k_3 - k_4). \quad (45)$$

Соответствующий линеаризованный оператор $(H_U)_L$ находится стандартным образом. Заметим, что оператор $b_{k\lambda}^\dagger$ (см. (41)) не является собственным оператором квазимпульса, связанного с трансляцией на период решетки. Следовательно, параметры k_i

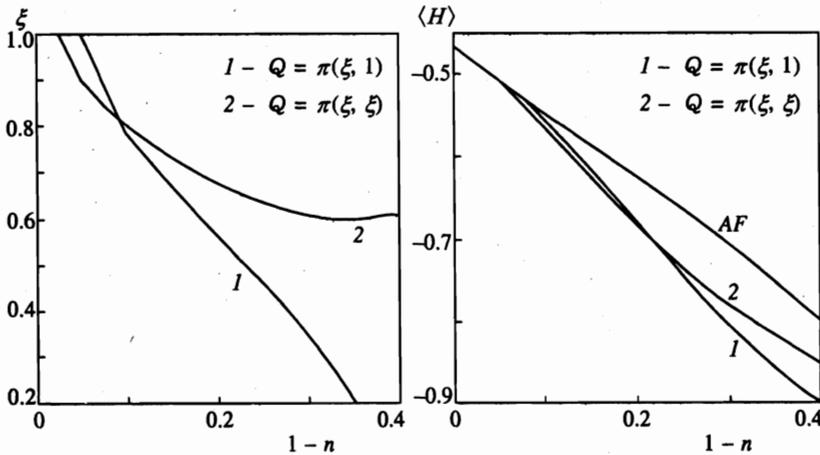


Рис. 5. Зависимости от допирования средней энергии на узел $\langle H \rangle$ (в единицах t) и параметра ξ , характеризующего вектор $Q = \pi(\xi, 1)$ или $Q = \pi(\xi, \xi)$ спирального состояния x - или xy -симметрии. Кривая AF относится к антиферромагнитному состоянию среднего поля с $Q = (\pi, \pi)$. Параметры системы: $U/t = 8$, $t'/t = -0.05$

в (45) не являются истинными квазиимпульсами. Тем не менее δ -функция имеет такой же вид, как у взаимодействия, сохраняющего суммарный «квазиимпульс» (псевдо-квазиимпульс) новых частиц.

Для вычисления восприимчивостей $\chi_{\alpha\beta}(q, \omega) = \langle \langle S_{\alpha}^q(\omega); S_{\beta}^{-q} \rangle \rangle$ в системе, основное состояние которой является спиральным, выразим q -компоненты спина и плотности через зонные операторы $b_{k\lambda}$ спирального состояния:

$$S_{\alpha}^q = \frac{1}{2} \sum_{ij} r_{ij}^q(\sigma_{\alpha})_{ij}, \quad \rho = \frac{1}{2} \sum_{ij} r_{ij}^q(\sigma_0)_{ij}, \quad r_{ij}^q = \frac{1}{N} \sum_k c_{k+q,i}^{\dagger} c_{kj}. \quad (46)$$

Здесь σ_{α} , $\alpha = 1, 2, 3$, и σ_0 — матрицы Паули и единичная матрица; индексы $i, j = 1, 2$ введены вместо $\sigma, \sigma' = \pm 1/2$. В базисе зонных ферми-операторов (41) имеем

$$r_{ij}^q = \frac{1}{N} \sum_{kk'} U_{i\lambda}(k) U_{j\lambda'}(k') b_{k\lambda}^{\dagger} b_{k'\lambda'} \delta(k - k' - q + (i - j)Q). \quad (47)$$

Введем следующие обозначения для новых операторов, зависящих от пространственных гармоник:

$$X_{\alpha}^q = \frac{1}{2} \sum_{ij} (\sigma_{\alpha})_{ij} r_{ij}^q, \quad \alpha = 1, 3, \quad X_1^q = \frac{1}{2} (r_{12}^{q-Q} + r_{21}^{q+Q}), \quad X_2^q = \frac{-i}{2} (r_{12}^{q-Q} - r_{21}^{q+Q}). \quad (48)$$

Определенные таким образом операторы характеризуем общим параметром q вследствие их единообразного представления через зонные операторы $b_{k\lambda}$ спирального состояния

$$X_{\alpha}^q = \frac{1}{2N} \sum_k \sum_{ij\lambda\lambda'} (\sigma_{\alpha})_{ij} U_{i\lambda}(k+q) U_{j\lambda'}(k) b_{k+q,\lambda}^{\dagger} b_{k\lambda'}, \quad (49)$$

где $\alpha = 0, 1, 2, 3$. Из представлений (45) для H_U следует, что в случае основного спирального состояния отличными от нуля оказываются только корреляторы операторов X^q с одинаковыми q :

$$\langle\langle X_l^q(\omega); (X_{l'}^q)^\dagger \rangle\rangle = \delta_{qq'} G_{ll'}(q, \omega), \quad (X_\alpha^q)^\dagger = X_\alpha^{-q}. \quad (50)$$

Это еще одно основание для введения операторов (48).

Вычисление корреляторов (50) проводим по той же схеме, как в разд. 2. Имея в виду представление (49) для X_l^q , найдем предварительно уравнения для величины $\langle\langle \vartheta_{\mu\mu'}^q(kt); X_{l'}^{-q} \rangle\rangle$ и далее для ее ω -компоненты, где $\vartheta_{\mu\mu'}^q(k) = b_{k+q,\mu}^\dagger b_{k\mu'}$. В результате суммирования найденных величин $\langle\langle \vartheta_{\mu\mu'}^q(k\omega); X_{l'}^{-q} \rangle\rangle$ по k, μ, μ' с соответствующими весовыми функциями из (49) получим следующую систему алгебраических уравнений для $G_{ll'}(q\omega)$:

$$\left[\delta_{ll'} - U Z_{lm} \zeta_m \right] G_{ml'} = \frac{1}{2} Z_{ll'}, \quad (51)$$

$$\zeta_l = (1 - 2\delta_{l0}) = \{-1, 1, 1, 1\}_l, \quad l, m, l' = 0, 1, 2, 3,$$

$$Z_{ll'}(q) = -\frac{1}{2} \sum_{k\lambda\lambda'} \frac{f_{k+q,\lambda} - f_{k,\lambda'}}{E_{k+q,\lambda} - E_{k\lambda'} - \omega + i\gamma} F_{\lambda\lambda'}^l(k) \left(F_{\lambda\lambda'}^{l'}(k) \right)^*, \quad (52)$$

$$F_{\lambda\lambda'}^l(k) = \sum_{ij} U_{i\lambda}(k+q) (\sigma_l)_{ij} U_{j\lambda'}. \quad (53)$$

Подстановка в (53) выражения (45) для $U_{i\lambda}$ позволяет получить компактные матричные выражения для матриц $F_{\lambda\lambda'}^l(k)$:

$$\begin{aligned} F^0 &= \sigma_0 c_- - i\sigma_2 s_-, & F^1 &= -\sigma_1 c_+ - \sigma_3 s_+, \\ F^2 &= -\sigma_2 c_- + i\sigma_0 s_-, & F^3 &= \sigma_1 s_+ + \sigma_3 c_+, \end{aligned} \quad (54)$$

$$c_\pm = \cos(\varphi_{k+q} \pm \varphi_k), \quad s_\pm = \sin(\varphi_{k+q} \pm \varphi_k).$$

Здесь σ_l — матрицы Паули, а φ_k определены уравнением (43). Все величины в (51)–(54) зависят неявно и от параметра Q спиральности основного состояния.

Вычисляя $Z_{ll'}(q'\omega)$ из (52)–(54) и решая систему алгебраических уравнений (51), находим корреляторы $G_{ll'}(q'\omega)$ для каждого из трех значений аргумента $q' = q - Q, q, q + Q$. Вспоминая определения (47), (48), (50), получим для искомым спиновых восприимчивостей $\chi_{\alpha\beta} = \chi_{\alpha\beta}(q\omega)$ и корреляций плотности следующие выражения:

$$\begin{aligned} \chi_{zz} &= \langle\langle S_z^q(\omega); S_z^{-q} \rangle\rangle = G_{33}(q\omega), & \langle\langle \rho_z^q(\omega); S_z^{-q} \rangle\rangle &= G_{03}(q\omega), \\ \langle\langle S_z^q(\omega); \rho_z^{-q} \rangle\rangle &= G_{30}(q\omega) & \langle\langle \rho_z^q(\omega); \rho_z^{-q} \rangle\rangle &= G_{00}(q\omega), \end{aligned} \quad (55)$$

$$\chi_{xx} = \chi_{yy} = \frac{1}{4} \left\{ [G_{11} + G_{22} - i(G_{12} - G_{21})]_{|q+Q} + [G_{11} + G_{22} + i(G_{12} - G_{21})]_{|q-Q} \right\}, \quad (56)$$

$$\chi_{xy} = -\chi_{yx} = \frac{i}{4} \left\{ [G_{11} + G_{22} - i(G_{12} - G_{21})]_{|q+Q} - [G_{11} + G_{22} + i(G_{12} - G_{21})]_{|q-Q} \right\}. \quad (57)$$

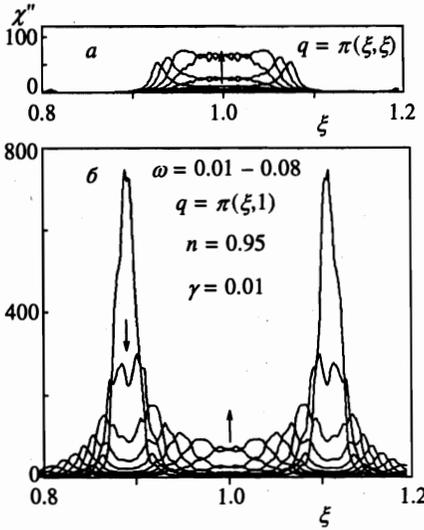


Рис. 6

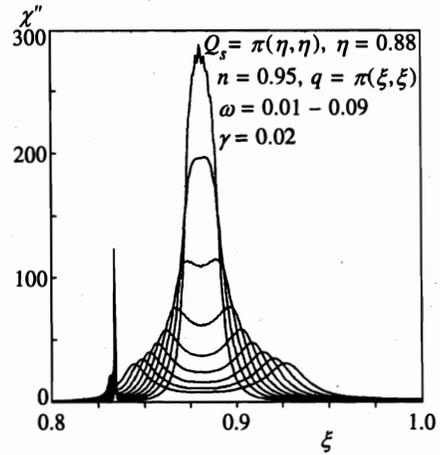


Рис. 7

Рис. 6. Зависимости $\chi''(q, \omega)$ от квазиимпульса, изменяющегося вдоль диагонали $q = \pi(\xi, \xi)$ (рис. а), либо вдоль оси x $q = \pi(\xi, 1)$ (рис. б) для набора частот $\omega/t = 0.01 \rightarrow 0.09$. Расчет выполнен для спирального состояния при допировании $1 - n = 0.05$, отвечающем вектору $Q = \pi(0.892, 1)$. Параметры: $\gamma/t = 0.01$, $U/t = 8$, $t'/t = -0.05$. Величина χ'' — в единицах $2t^{-1}$. При $\omega \rightarrow 0$ пики отвечают несоизмеримым импульсам $q_x = \pi(1 \pm 0.108)$ на оси x

Рис. 7. То же, что на рис. 6 для $q = \pi(\xi, \xi)$, меняющегося вдоль диагонали, и спирально-го состояния xy -симметрии с $Q = \pi(0.882, 0.882)$. Показана область $\xi < 1$ только одного из двух несоизмеримых пиков вокруг (π, π) . Положение $q_{max}(\omega)$ максимумов кривых $\chi''(q, \omega)$ при фиксированном ω отвечает спин-волновой зависимости $\omega = c|q_{max} - Q|$

Аргументами функций G_{ij} в каждой из квадратных скобок в (56), (57) являются соответственно $q + Q, \omega$ или $q - Q, \omega$. Индексы x, y, z относятся к «спиновой» системе координат с плоскостью xy вращения среднего спина спирального состояния.

Если при вычислении $Z_{ll'}$ учитывать только основной вклад от межзонных пар частица-дырка ($\lambda, \lambda' = 1, 2$ или $2, 1$ в (53)), то детерминант системы обратится в нуль при $\omega \rightarrow 0, \gamma \rightarrow 0$ в силу выполнения уравнения (44) и поперечные компоненты $G_{ij}(k\omega)$, $i, j = 1, 2$ будут расходиться при $k \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$. Согласно связи (56), (57) между χ_{xx}, χ_{yy} и $G(q \pm Q)$, это определяет возможность появления низкочастотных пиков в $\chi''(q\omega)$ при несоизмеримых квазиимпульсах $q = \pm Q$. Полный расчет по формулам (55)–(57), (51)–(53) подтверждает это.

На рисунке 6 представлены результаты расчета $\chi''(q\omega)$ при $\omega = 0.01 \rightarrow 0.09$ на двух сечениях фазовой плоскости, $q = \pi(\xi, 1)$ и $q = \pi(\xi, \xi)$, для спирального состояния x -симметрии с вектором спиральности $Q = \pi(0.892, 1)$ оптимальным при $n = 0.95$. Несоизмеримые пики появляются на оси x в точках $q = Q$ и $[2(\pi, \pi) - Q]$, симметричных относительно вектора (π, π) . Аналогично для спирального состояния другой симметрии с $Q = \pi(\eta, \eta)$ низкочастотные пики в $\chi''(q\omega)$ появляются в несоизмеримых точках, расположенных на диагонали симметрично относительно (π, π) . Соответствующие зависимости на половинном интервале приведены на рис. 7. Узкий пик с $\xi = 0.83$ обязан

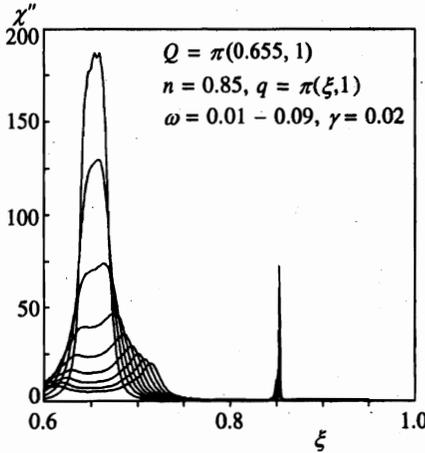


Рис. 8. То же, что на рис. 6, но при допировании $1 - n = 0.15$, отвечающем вектору $Q = \pi(0.658, 1)$ спирального состояния той же x -симметрии. Показана область $\xi < 1$ только одного из двух несоизмеримых пиков вокруг (π, π) . Пик при $\xi \sim 0.85$ обязан внутризонным парам частица-дырка и зависит от поверхности Ферми нижней зоны Хаббарда

вкладу внутризонных пар частица-дырка и зависит от параллельных участков поверхности Ферми нижней зоны Хаббарда при $n = 0.95$. На основные пики при $q = \pm Q$ тип поверхности Ферми влияет слабо.

С увеличением частоты главный пик поглощения расщепляется. При данном ω максимумы на кривой $\chi''(q, \omega)$ отвечают квазиимпульсам, удовлетворяющим соотношению $c^*|q - Q| = \omega$. Последнее аналогично дисперсии $\omega \sim c|q - (\pi, \pi)|$ спиновых волн при антиферромагнитном спиновом порядке. Для системы с $U/t \sim 8$ скорость спиновых волн $c^* \sim 0.7t/a_0$ вокруг несоизмеримого вектора Q имеет тот же порядок величины, что и в случае антиферромагнитного решения. Заметим, что подобные спиновые волны вокруг несоизмеримого Q наблюдались в оксидах никеля [36], где строго доказано существование суперструктуры неоднородных страйп-фаз. Наши результаты неприменимы непосредственно к зарядово-неоднородным структурам. Тем не менее спиральные состояния интересны как простейшие зарядово-однородные системы, обладающие спиновой структурой с несоизмеримым периодом.

С увеличением допирования смещение $\Delta Q = |Q - (\pi, \pi)|$ низкочастотного пика восприимчивости $\chi''(q, \omega)$ меняется соответственно зависимостям $Q(n)$, представленным на рис. 5а. На рисунке 8 представлены те же зависимости $\chi''(q, \omega)$, что и на рис. 6, но для системы с $n = 0.85$.

Еще один вывод следует из рассмотрения спиральных состояний. Возникновение спиновой структуры наряду с параметром t' , характеризующим диагональные прыжки, само меняет форму поверхности Ферми, а значит, может влиять на низкоэнергетические свойства системы. В качестве иллюстрации на рис. 8 приведены поверхности Ферми и уровни зонной энергии $[E(k) - \mu]$ как функции двумерного параметра k — псевдоквазиимпульса одноэлектронных собственных операторов $b_{k\lambda}$ спирального состояния. На рисунке 9 видно, что спиральный спиновый порядок расщепляет ван-хововские сингулярности (VHS) одноэлектронного спектра по энергии и вносит асимметрию в их положение на фазовой плоскости. Такое поведение можно считать электронным аналогом ян-теллеровского расщепления VHS от искажений решетки [2, 56].

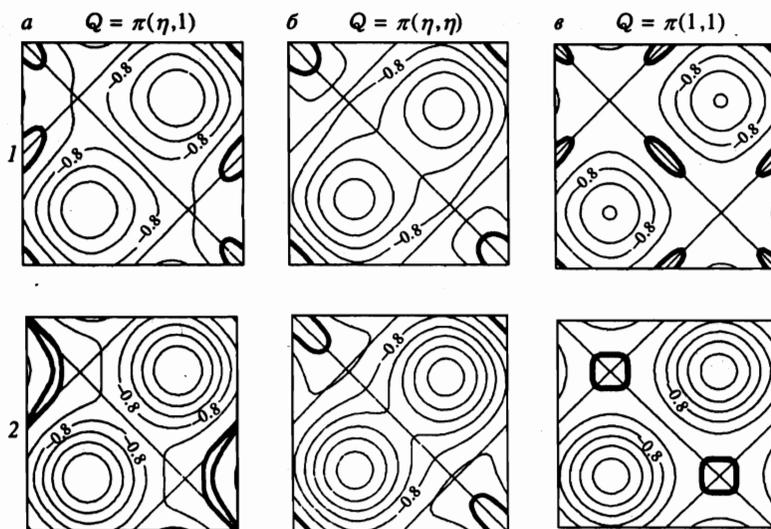


Рис. 9. Поверхности Ферми (жирные линии) и уровни энергии ($E_k - \mu$) нижней зоны Хаббарда для систем с $n = 0.95$ в спиральных состояниях x - и xy -симметрии или антиферромагнитных состояниях среднего поля на плоскости псевдодваимпульса (k_x, k_y) , $|k_x(y)| \leq \pi$. Рис. *a*, *б*, *в* соответствуют $Q = \pi(\eta, 1)$, $Q = \pi(\eta, \eta)$ и $Q = (\pi, \pi)$; 1 и 2 относятся к $t'/t = 0.05$ либо $t'/t = -0.05$. Диагональные прямые отвечают линиям нестинга исходной зоны в указанных координатах

5. ВЫВОДЫ

В рамках зонного подхода и метода RPA выведено выражение для спиновой восприимчивости модели Хаббарда с использованием антиферромагнитно-расщепленных хаббардовских зон в качестве нулевого приближения. Показано, что коллективная мода спиновых возбуждений формируется межзонными парами частица-дырка и потому (вопреки предсказаниям более грубых RPA-теорий [18–20]) слабо чувствительна к форме и типу поверхности Ферми.

Расчет хорошо передает характеристики спиновых волн ряда недопированных и слабодопированных купратов. Это служит дополнительным аргументом в пользу того, что зонный подход в картине расщепленных верхней и нижней хаббардовских подзон может адекватно передавать низкоэнергетическую спиновую динамику коррелированной системы. Этот подход должен быть дополнен учетом корреляций типа валентных связей, индуцирующих согласно [30] сверхпроводящее спаривание, и возможных зарядовой и спиновой неоднородностей для описания суперструктур, существующих в ряде купратов.

Показана невозможность объяснения несоизмеримых пиков неупругого нейтронного рассеяния в LSCO свойствами поверхности Ферми однородного антиферромагнитного состояния среднего поля. Вывод работ [36–42] о том, что источником спиновых флуктуаций с несоизмеримым импульсом являются неоднородные структуры, подтвержден модельным расчетом восприимчивости для простейших структур с несоизмеримым спиновым порядком — зарядово-однородных спиральных состояний.

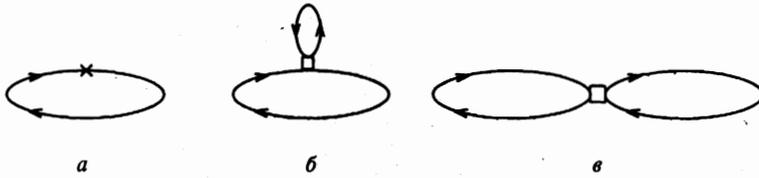


Рис. 10. Диаграммы первого порядка по U для поперечного поляризационного оператора

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 7-03-33727А, № 96-15-97492), а также фонда международного научно-технического центра (грант № 872). Авторы благодарны Р. О. Зайцеву и В. Я. Кривнову за полезные замечания и обсуждения.

ПРИЛОЖЕНИЕ

При самосогласованном решении задачи с нулевым линеаризованным гамильтонианом (9) возмущением служит оператор с четырех- и двухфермионным вкладом. В базисе собственных операторов (10) они имеют вид

$$V = V_4 + V_2, \quad V_4 = H_U, \quad V_2 = -(H_U)_L, \tag{II.1}$$

$$V_4 = \frac{U}{N} \sum_{m=1,2} \sum_{kk'q}^F M_{\lambda\lambda'}^m(qk\sigma\underline{q}) M_{\nu\nu'}^m(qk'\sigma\underline{q}) b_{k+q\lambda\sigma}^\dagger b_{k'+q\nu\sigma} b_{k'\nu'\underline{\sigma}}^\dagger b_{k\lambda'\underline{\sigma}}, \tag{II.2}$$

$$V_2 = -U r_0 N + U d_0 \sum_{\sigma\lambda\lambda'} \xi_\sigma \sum_k^F M_{\lambda\lambda'}^m(qk\sigma\sigma) b_{k\lambda\sigma}^\dagger b_{k\lambda'\sigma}. \tag{II.3}$$

Здесь $2r_0$ и d_0 — средняя и чередующаяся спиновые плотности частиц на узле; $\xi_\sigma = \sigma/|\sigma|$; $\underline{k} + \underline{q} = k + q + (\pi, \pi) i_{kq} \in F$ — квазиимпульс, приведенный к магнитной зоне Бриллюэна с соответствующим индексом приведения i_{kq} . Функции $M_{\lambda\lambda'}^m(qk\sigma\sigma')$ даются формулой (17). В частности, для $\sigma' = \underline{\sigma} = -\sigma$ получаем

$$M_{\lambda\lambda'}^m(qk\sigma\underline{\sigma}) = \begin{pmatrix} c_+ & \xi_\sigma s_+ \\ -\xi_\sigma s_+ & c_+ \end{pmatrix}_{\lambda\lambda'} \delta^{(2)}(m + i_{kq}) + \begin{pmatrix} \xi_\sigma s_- & c_- \\ c_- & -\xi_\sigma s_- \end{pmatrix}_{\lambda\lambda'} \delta^{(2)}(m + i_{kq} + 1), \tag{II.4}$$

$$c_\pm = \cos(\varphi_{\underline{k}+\underline{q}} \pm \varphi_k), \quad s_\pm = \sin(\varphi_{\underline{k}+\underline{q}} \pm \varphi_k). \tag{II.5}$$

Здесь $\delta^{(2)}$ — δ -функция по модулю 2. Средние r_0 , d_0 определяются стандартными выражениями.

При вычислении коммутатора (22) вклад $[\vartheta, V_2]$ сокращается с соответствующими членами в $[\vartheta, V_2]$ при замене $n_{k\lambda\sigma} \rightarrow f_{k\lambda\sigma}$. Результат можно пояснить на языке диаграмм первого порядка по U для поперечного поляризационного оператора [44]. Так, на

диаграммах рис. 10 вклады от а) и б) сокращаются и остается только вклад от диаграммы в) из класса лестничных. Крест и квадрат на рис. 10 отвечают взаимодействиям соответственно V_2 и V_4 . Суммирование лестничных диаграмм всех порядков на базе нулевого гамильтониана H_L и возмущения V дает результат, совпадающий с (23).

Ранее [21–24] было показано, что такой класс диаграмм недостаточен, если использовать нулевой базис $\{c_{k\sigma}\}$ исходной зоны ϵ_k с нестингом и ван-хововскими сингулярностями от четырех точек А, В, С, D: $k = (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$. Однако в базисе (10) расщепленных подзон «нулевые» вершинные части для точек А, В, С, D и всей линии нестинга обращаются в нуль для опасных диаграмм. К последним относятся диаграммы с пропагаторами $G(k\lambda\omega)G(k'\lambda'\omega')$, отвечающими одной подзоне $\lambda = \lambda'$ (для межзонных вкладов $\lambda \neq \lambda'$ результирующий энергетический знаменатель не имеет сингулярности из-за хаббардовской щели $E_{k_2} - E_{k_1} > 2Ud_0$). В самом деле, при $q = 0$ или (π, π) и $k, k' = k + q$, расположенных на линиях нестинга $|k_x \pm k_y| = \pi$, имеем

$$\varphi_k = \varphi_{k'} = -\pi/4, \quad c_+ = s_- = 0, \quad c_- = -s_+ = 1, \tag{П.6}$$

что с учетом (61) дает $M_{\lambda\lambda}^m(qk\sigma\sigma) = 0$ для таких k, q . В связи с этим можем ограничиться суммированием лестничных диаграмм с нулевым приближением для вершинной части, что соответствует результату (23) для поперечной восприимчивости. Этот факт не является удивительным, поскольку новый базис с нарушенной симметрией выбран именно для устранения неустойчивости по отношению к волне спиновой плотности, обнаруженной в первоначальных разложениях с исходной зоной [21–24].

Восприимчивости для продольных компонент спина и плотности вычисляются аналогично выводу (23). Среди них отличны от нуля следующие величины

$$B_{ij}(q\omega) = \left(\begin{array}{cc} \langle\langle S_z(q\omega); S_z(q) \rangle\rangle & \langle\langle S_z(q\omega); \rho(\tilde{q}) \rangle\rangle \\ \langle\langle \rho(\tilde{q}\omega); S_z(q) \rangle\rangle & \langle\langle \rho(\tilde{q}\omega); \rho(\tilde{q}) \rangle\rangle \end{array} \right)_{ij}, \quad q \in \bar{F}, \quad i, j = 1, 2, \tag{П.7}$$

определенные внутри магнитной зоны Бриллюэна и аналогичные корреляторам $B_{ij}(\tilde{q}\omega)$ для $\tilde{q} = q + (\pi, \pi) \notin \bar{F}$. Повторяя вывод, аналогичный выводу уравнений (23), получим следующие выражения для величин B_{ij} :

$$B_{ij}(q, \omega) = \frac{1}{2} \{ [I - UB^0\sigma_3]^{-1} B^0 \}_{ij}, \tag{П.8}$$

$$B_{ij}(\tilde{q}, \omega) = \frac{1}{2} \{ [I - U\sigma_1 B^0 \sigma_1 \sigma_3]^{-1} \sigma_1 B^0 \sigma_1 \}_{ij}. \tag{П.9}$$

Здесь σ_1, σ_3 — матрицы Паули, а двумерная матрица B_{ij}^0 равна

$$B_{ij}^0 = -\frac{1}{N} \sum_{\lambda\lambda'} \sum_k^F \frac{f_{k+q,\lambda} - f_{k\lambda'}}{E_{k+q,\lambda} - E_{k\lambda'} - \hbar\omega + i\gamma} P_{\lambda\lambda'}^{ij},$$

$$P_{\lambda\lambda'}^{11} = \begin{pmatrix} c_-^2 & s_-^2 \\ s_-^2 & c_-^2 \end{pmatrix}_{\lambda\lambda'}, \quad P_{\lambda\lambda'}^{22} = \begin{pmatrix} s_+^2 & c_+^2 \\ c_+^2 & s_+^2 \end{pmatrix}_{\lambda\lambda'}, \quad P_{\lambda\lambda'}^{12} = P_{\lambda\lambda'}^{21} = \begin{pmatrix} c_-s_+ & s_-c_+ \\ -s_-c_+ & -c_-s_+ \end{pmatrix}_{\lambda\lambda'},$$

$$c_{\pm} = \cos \varphi_{\pm}, \quad s_{\pm} = \sin \varphi_{\pm}, \quad \varphi_{\pm} = \varphi_{k+q} \pm \varphi_k.$$

Величины c_{\pm} , s_{\pm} и φ_k определяются уравнениями (62) и (11); $E_{k\lambda}$, $f_{k\lambda}$ ($\lambda = 1, 2$) — зонные энергии и фермиевские функции верхней и нижней хаббардовских зон. Важно, что детерминанты матриц в квадратных скобках в (65), (66) не обращаются в нуль при $\omega \rightarrow 0$. Это означает, что низкочастотные коллективные моды флуктуаций продольных компонент спина и плотности отсутствуют.

Литература

1. E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
2. R. S. Markiewicz, J. Phys. Chem. Solids **58**, 1179 (1997).
3. Z.-X. Shen and D. S. Dessau, Phys. Report **253**, 1 (1995).
4. R. J. Birgeneau and G. Shirane, in *Physical Properties of High Temperature Superconductors. I*, ed. by D. M. Ginzberg, World Scientific, Singapore (1989). Р. Дж. Биржено, Г. Ширан в кн. *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, т. I, с. 163; ред. Д. М. Гинзберг, Мир, Москва (1991).
5. D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser et al., Phys. Rev. Lett. **76**, 4841 (1996).
6. A. G. Loeser, Z.-X. Shen, D. S. Dessau et al., Science **273**, 325 (1997).
7. H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano et al., Nature **382**, 51 (1996).
8. T. E. Mason, G. A. Aeppli, S. M. Hayden et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 919 (1993).
9. S. W. Cheong, G. Aeppli, T. E. Mason et al., Phys. Rev. Lett. **67**, 1791 (1991).
10. K. Yamada, S. Wakimoto, G. Shirane et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 1526 (1995).
11. J. Rossat-Mignod, L. P. Renault, C. Vettrier et al., Physica C **185**, 86 (1991).
12. L. P. Regnault, P. Bourges, P. Burllet et al., Physica B **213**, 48 (1995).
13. P. Bourges, H. Casalta, A. S. Ivanov et al., Phys. Rev. Lett. **79**, 4906 (1997).
14. S. M. Hayden, G. Aeppli, H. A. Mook et al., Phys. Rev. Lett. **76**, 1344 (1997).
15. P. Bourges, H. F. Fong, L. P. Regnault et al., Phys. Rev. B **56**, R11436 (1997).
16. H. F. Fong, B. Keimer, D. L. Milius et al., Phys. Rev. B **54**, 6708 (1996); Phys. Rev. Lett. **78**, 713 (1997).
17. P. Dai, H. Mook, and F. Dogan, Phys. Rev. Lett. **80**, 1738 (1998).
18. D. Z. Liu, Y. Zha, and K. Levin, Phys. Rev. Lett. **75**, 4310 (1995).
19. Q. Si, Y. Zha, K. Levin et al., Phys. Rev. B **47**, 9055 (1993).
20. P. Benard, L. Chen, and A.-M. S. Tremblay, Phys. Rev. B **47**, 587 (1993).
21. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **93**, 1487 (1987).
22. И. Е. Дзялошинский, В. М. Яковенко, ЖЭТФ **94**, 344 (1988).
23. И. Е. Дзялошинский, Е. И. Кац, ЖЭТФ **62**, 1105 (1972).
24. H. Shulz, Europhys. Lett. **4**, 609 (1987).
25. J. Ruvalds and A. Virosztek, Phys. Rev. **4**, 609 (1991); **42**, 4064 (1990).
26. E. Dagotto, A. Nazarenko, and A. Moreo, Phys. Rev. Lett. **74**, 310 (1995).
27. A. Nazarenko and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **74**, 310 (1995).
28. R. S. Markiewicz, Phys. Rev. B **56**, 9091 (1997).
29. A. A. Ovchinnikov and M. Ya. Ovchinnikova, Phys. Lett. A **249**, 531 (1998).
30. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, Е. А. Плеханов, Письма в ЖЭТФ **67**, 985 (1998); ЖЭТФ **114**, 985 (1998); ЖЭТФ **115**, 649 (1999).
31. N. M. Plakida, V. S. Oudovenko, R. Horsch et al., Phys. Rev. B **55**, 11997 (1997).
32. R. O. Kuzin, R. Hayn, A. F. Barabanov et al., Phys. Rev. B **58**, 6194 (1998).
33. I. A. Misurkin, A. A. Ovchinnikov, and G. A. Vinogradov, Int. J. Quant. Chem. **9**, 605 (1975).
34. D. Pines, Z. Phys. B **103**, 129 (1997).
35. J. Hubbard and K. P. Jain, J. Phys. C **1**, ser. 2, 1650 (1968).

36. J. M. Tranquada, P. Wochoer, and D. J. Buttrey, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2133 (1997); *Phys. Rev. B* **55**, R6113 (1997).
37. A. Bianconi and M. Missori, in *Phase Separation in Cuprate Superconductors*, ed. by E. Sigmound, K. A. Muller; Springer-Verlag, Berlin (1994).
38. J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe et al., *Nature* **375**, 561 (1995).
39. B. Buchner, M. Brener, and A. Freimuth, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1841 (1994).
40. J. M. Tranquada, D. J. Axe, M. Ichikawa et al., *Phys. Rev. B* **54**, 7489 (1996); *Phys. Rev. Lett.* **78**, 338 (1997).
41. X. L. Dong, Z. F. Dong, B. R. Zhao et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2701 (1998).
42. A. Bianconi, N. L. Saini, A. Lanzara et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4312 (1996).
43. T. Izuyama, T. Kim, and R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jap.* **18**, 1025 (1963).
44. Ю. А. Изюмов, М. И. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, Наука, Москва (1994).
45. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, *ЖЭТФ* **110**, 342 (1996); *ЖЭТФ* **112**, 1409 (1997).
46. U. Trapper, D. Ihle, and H. Fenke, *Phys. Rev. B* **52**, R11553 (1995).
47. G. Baumgartel, J. Schmalian, and K. H. Benemann, *Europhys. Lett.* **24**, 601 (1993).
48. I. W. Sumarlin, J. W. Lynn, T. Chattapadhyay et al., *Phys. Rev. B* **51**, 5824 (1995).
49. H. B. Schuttler and A. J. Fedro, *Phys. Rev. B* **45**, 7588 (1992).
50. J. H. Jefferson, H. Eskes, and L. F. Feiner, *Phys. Rev. B* **45**, 7959 (1992).
51. T. Mizokawa and A. Fujimori, *Phys. Rev.* **56**, 11920 (1997).
52. J. Zaanen and M. L. Horbach, *Phys. Rev.* **53**, 8671 (1996).
53. V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Physica C* **209**, 597 (1993).
54. Yu. A. Izyumov and V. M. Laptev, *Int. J. Mod. Phys. B* **4**, 447 (1990).
55. F. Hu, S. K. Sarker, and C. Jayaprakash, *Phys. Rev. B* **50**, 17901 (1994).
56. R. S. Markiewicz, *Physica C* **255**, 211 (1995).