

На правах рукописи

Михеенков Андрей Витальевич

**Зарядовые и спиновые возбуждения
в низкоразмерных
сильно коррелированных системах**

01.04.07 - физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва - 2007

Работа выполнена в Институте физики высоких давлений
им. Л.Ф.Верещагина Российской академии наук.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
член-корреспондент РАН,
профессор Максимов Евгений Григорьевич

доктор физико-математических наук
профессор Кашурников Владимир Анатольевич

доктор физико-математических наук
Полищук Илья Яковлевич

Ведущая организация: Институт физических проблем
им. П.Л.Капицы РАН

Защита состоится 29 октября 2007 года в ___ часов на заседании
диссертационного совета Д 002.97.01 при Институте физики высоких
давлений им. Л.Ф.Верещагина РАН по адресу: 142190, г.Троицк,
Моск. обл.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФВД РАН.

Автореферат разослан <___> _____ 2007 г.

Ученый секретарь совета Д 002.97.01
кандидат физико-математических наук

М.В.Магницкая

1 Общая характеристика работы

Актуальность темы диссертации

Предметом настоящей работы являются системы с сильными межэлектронными корреляциями. Точнее – с сильными корреляциями между подсистемой носителей и магнитным, спиновым фоном. Эта область физики твердого тела, всегда бывшая захватывающей и актуальной, получила сильнейший импульс после открытия высокотемпературной сверхпроводимости и последовавшего за ним всплеска корреляционных моделей ВТСП, а также бурного развития смежных областей, таких как тяжелые фермионы и квантовые фазовые переходы.

Для указанных систем и соответствующих моделей характерно наличие двух "этажей": нижнего – магнитного фона, и верхнего – зарядовых носителей. Фон обычно описывается стандартной моделью Гейзенберга или ее модификациями. Наиболее интересен с точки зрения теории и наиболее богат на интересные экспериментальные эффекты случай, когда взаимодействие между спинами магнитной подсистемы антиферромагнитно. Зарядовые носители – подвижные электроны или дырки в концентрациях от ничтожных до металлических.

Между подсистемами-этажами существует взаимодействие. Его физические причины (и математическое выражение) могут быть разными, но у всех рассматриваемых моделей есть важнейшая общая черта – это взаимодействие сильное. Сильное в том смысле, что даже для качественного описания картины необходимо учитывать его уже в нулевом приближении.

Самой простой и самой известной моделью такого типа является однозонная модель Хаббарда [1] с гамильтонианом

$$\hat{H}_{Hubbard} = t \sum_{ij\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} \quad (1)$$

В рассматриваемом контексте наиболее интересен, конечно, предел сильной корреляции $t \ll U$.

В модели Хаббарда одни и те же электроны выступают и как магнитный фон, и как зарядовые носители, то есть разделение на подсистемы не столь очевидно. Оно ясно проявляется в производной от модели Хаббарда $t - J$ модели

$$\hat{H}_{t-J} = t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{c}_{j\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \quad (2)$$

Первая сумма в $t - J$ гамильтониане описывает движение скоррелированных электронов (прыжок возможен только на свободный узел), вторая – обменное взаимодействие электронных спинов ($J \sim t^2/U$).

Еще в двух широко распространенных моделях – $s - d$ модели и периодической модели Андерсона – разделение на подсистемы производится изначально, взаимодействие же между магнитным фоном и носителями имеет разный вид.

В $s - d$ модели (она же $s - f$ модель, регулярная модель Кондо, спин-фермионная модель) взаимодействуют спины локализованных и зонных электронов (\mathbf{S}_i и \mathbf{s}_i , соответственно)

$$\hat{H}_{s-d} = \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + J \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{s}_i \quad (3)$$

(обменный член записан в гейзенберговском виде для наглядности).

В периодической (регулярной) модели Андерсона механизмом взаимодействия подсистем является гибридизация

$$\hat{H}_{Anderson} = \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \varepsilon_d \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^d + U \sum_i n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d \quad (4)$$

$$+ \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (V_{ij} c_{i\sigma}^+ d_{j\sigma} + h.c.) \quad (5)$$

здесь ε_d – уровень локализованного электрона $n_{i\sigma}^d = d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma}$ – число локализованных (d) электронов на узле.

Все четыре модели записаны здесь в простейшем виде, без учета нередко вводимых дополнительных взаимодействий, энергия везде отсчитана от центра зоны проводимости.

Существуют, конечно, и более сложные модели описанного вида. Самая известная из них – используемая при анализе CuO_2 плоскостей ВТСП купратов трехзонная модель Хаббарда.

Цель диссертационной работы состояла в теоретическом исследовании основного состояния, спиновых и зарядовых возбуждений в нескольких моделях описанного типа, в применении развитых методов к интерпретации нейтронных экспериментов в ВТСП купратах, в исследовании особенностей кинетики систем с типичным для низкоразмерных сильнокоррелированных систем спектром. Кроме того, оказалось возможным перенести разработанный метод рассмотрения спиновой жидкости на теорию классической жидкости – актуальную

проблему возможности фазового перехода в жидкости с изменением ближнего порядка.

Теоретические построения основаны двух физических идеях.

1. Основным состоянием магнитной системы с антиферромагнитным (АФМ) взаимодействием не обязательно является неелевское АФМ состояние с подрешетками, пусть даже и размытое спиновыми волнами. Конкурентным с ним по энергии нередко оказывается состояние другого типа – состояние RVB, спин-жидкостное состояние, сферически-симметричное синглетное состояние. В случае низкой размерности, в ультраквантовом пределе спина $S = 1/2$, при наличии фрустрации любого происхождения (геометрической или вызванной взаимодействием с дальними соседями) эта конкуренция усиливается.

Для такого состояния характерно отсутствие магнитных подрешеток и нулевой средний спин на узле. Однако антиферромагнитные корреляции в системе остаются, а их поведение на больших расстояниях определяет наличие или отсутствие дальнего порядка. Спектр спиновых возбуждений при этом может существенно отличаться от стандартных АФМ спиновых волн.

2. Из-за сильного взаимодействия с подсистемой носителей перестройка структуры магнитного фона сказывается и на спектре зарядовых возбуждений. Причина в том, что затравочные (или слегка перенормированные) электроны и дырки не являются в таких системах хорошими квазичастицами. Хорошая квазичастица, по крайней мере, в некоторых случаях, – это магнитный полярон, то есть электрон (дырка), сопровождаемый существенным искажением магнитного фона.

Поэтому спектр зарядовых квазичастиц может, во-первых, сильно отличаться от спектра затравочных электронов и дырок, а, во-вторых, существенно зависит от структуры магнитного фона.

Реализация этих идей на нескольких примерах – от модельных до весьма близких к эксперименту – представляла собой главную цель работы.

Научная новизна работы заключается в развитии методов построения основного состояния низкоразмерной сильно коррелированной системы, которое конкурентно по энергии с неелевским, но существенно отличается от него по структуре; методов определения спектра зарядовых и спиновых возбуждений на фоне такого состояния. Для двух важных случаев (двумерной модели Хаббарда и двумерной

$s - d$ модели продемонстрирована возможность корреляционного спаривания и необходимость учета при этом сложной структуры зарядовых возбуждений.

На основе развитого в работе метода для фрустрированной модели Гейзенберга в рамках единого подхода описаны эксперименты по спиновой восприимчивости ВТСП купратов в диапазоне допирования от нулевого до оптимального.

Для систем с типичным для ВТСП квазиодномерным спектром показано, что затягивание линейного хода сопротивления может объясняться геометрическими особенностями спектра, продемонстрирована необходимость выхода за τ -приближение для объяснения поведения кинетических коэффициентов.

Предложен новый подход к рассмотрению фазовых переходов в классической жидкости в моделях с core-softened потенциалом.

Научная и практическая значимость

Развитые в диссертации методы описания систем с сильной корреляцией между спиновым фоном и зарядовыми носителями могут быть как применены для расчетов и интерпретации различных эффектов в реальных экспериментах, так и служить основой для дальнейшего развития теории сильно коррелированных систем. На основе построенной теории был объяснен ряд экспериментальных результатов и предсказано появление новых эффектов.

Достоверность полученных результатов определяется использованием комплекса методов теоретической физики и сопоставлением результатов теоретического анализа с экспериментальными данными.

Научные положения, а также выводы и рекомендации, сформулированные в диссертации, обоснованы и хорошо согласуются с существующими экспериментальными результатами.

Основные результаты и положения, выносимые на защиту:

1. Развитие для 2D модели Хаббарда в пределе сильной корреляции (вблизи половинного заполнения) блочного вариационного метода, позволяющего корректно учесть ближний порядок, построение основного состояния и определение его структуры, построение одно- и двухчастичных зарядовых возбуждений.

2. Демонстрация для упомянутой модели возможности корреляционного механизма динамического спаривания локальных поляронов. Оценка энергии связи пары – биполярона.

3. Развитие самосогласованной теории двумерной фрустрированной $S = 1/2$ модели Гейзенберга с учетом действительных и мнимых перенормировок функций Грина спиновых флуктуаций.

4. Восстановление величины затухания спиновых возбуждений и его температурной зависимости для недодопированных купратов в рамках развитой теории и на основе анализа нейтронного эксперимента.

5. Построение аналитического вида скейлинговой функции для спиновой восприимчивости, которая описывает экспериментальный скейлинг в недодопированных купратах.

6. Теоретическое описание возникновения седловой точки вблизи $(\pi/2, \pi/2)$ в спиновом спектре лантановых купратов в диэлектрическом пределе.

7. Демонстрация в рамках страйп-сценария эволюции спинового спектра купратов с ростом допирования: сдвиг пика плотности состояний в область низких частот $\omega \sim 50 \text{ meV}$; возникновение седловой особенности в спектре вблизи $(\pi/2, 0)$; сильное смягчение спектра вблизи $(\pi, 0)$.

8. Развитие метода (гибрида ренормгруппы в прямом пространстве и вариационного подхода) нахождения энергии основного состояния для модели Хаббарда, который дает хорошее согласие с точным решением в 1D случае и допускает обобщение на большую размерность.

9. Развитие метода вычисления вариационной энергии для 1D регулярной модели Андерсона в высоком порядке по гибридизации и с учетом внутривузельного $s - f$ обмена. Определение структуры основного состояния, которое в АФМ фазе оказывается бесподрешеточным, и анализ ФМ \rightarrow АФМ перехода в зависимости от параметров модели.

10. Описание для 2D треугольной решетки перехода по фрустрации из 120° -структуры в страйп-фазу. Построение квантового основного состояния в обеих фазах, анализ спектра спиновых возбуждений.

11. Построение фазовой диаграммы для 2D модели с двумя спиновыми степенями свободы на каждом узле (обобщение модели Ашкина-Теллера). Демонстрация возможности фазового перехода АФМ \rightarrow спиновая жидкость – как в обеих подсистемах одновременно, так и только в одной из них.

12. Анализ неустойчивости двумерного вигнеровского кристалла по отношению к образованию конечного числа точечных дефектов. Де-

монстрация того, что косвенное взаимодействие дефектов через поджатие решетки может приводить к изменению картины перехода.

13. Для модели 2D допированного антиферромагнетика с квазиодномерным спектром зарядовых носителей (дно зоны вблизи границы АФМ зоны Бриллюэна) показано, что линейный ход сопротивления из-за квазинестинга в спектре носителей может быть существенно затянут в область низких температур, а коэффициент Холла может иметь сильную температурную зависимость из-за анизотропии рассеяния. Учет такого рассеяния (как на магнонах, так и на фононах) произведен в рамках многомоментного метода решения кинетического уравнения.

14. В рамках 2D решетки Кондо показано, что для появления сверхпроводящего спаривания недостаточно учета аномальных функций Грина для голых дырок – спаривание возникает только при введении аномальной функции Грина для спин-поляронных операторов.

15. На основе развитого выше (пункт 3) математического аппарата предложен основанный на модели Гейзенберга решеточный спинжидкостной подход к рассмотрению классической жидкости, который позволяет описать поведение полной корреляционной функции при изменении температуры и вида потенциала. Для модели двухступенчатого потенциала продемонстрирована возможность фазового перехода по температуре в жидкости с изменением ближнего порядка.

Апробация работы

Основные результаты диссертационной работы регулярно обсуждались на научных семинарах Теоретического отдела ИФВД РАН, докладывались на семинарах Отделения теоретической физики ФИАН, РИЦ "Курчатовский институт", СПИЯФ, Centralinstitut fur Festcorperphysik (Дрезден, 1988), представлялись на всероссийских и международных конференциях, школах и совещаниях: XI Int.Conf. AIRAPT, (Киев, 1987), Школа-семинар по статистической физике (Славское Львовской обл. 1991), Int.Seminar "Strongly correlated systems" (Дубна, 1994), Зимняя школа-конференция физиков-теоретиков "Коуровка" (1992, 1994, 1996, 2004, 2006), школа-семинар "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений" (Туапсе 1989, 1991, 1993, 1995, 1997, 2002, 2004, 2006), Summer school "Strongly correlate systems" (ICTP, Trieste, 1995), Семинар "Сильно коррелированные электронные системы и квантовые

критические явления" ИФВД (2005, 2006).

Публикации

Содержание диссертации опубликовано в статьях в ведущих отечественных и зарубежных журналах, а также в тезисах перечисленных выше конференций, совещаний и семинаров, ежегоднике ИФВД (всего 27 печатных работ). Опубликованные по теме диссертации работы полностью отражают ее содержание. Список основных 18 статей приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, 7 глав, заключения и списка цитированной литературы. Объем диссертации составляет 164 страницы, 40 рисунков и список цитированной литературы из 182 наименований.

2 Содержание работы

Во введении дан краткий обзор актуальных проблем теории систем с сильным взаимодействием между магнитным фоном и зарядовыми носителями, основных теоретических моделей, показана научная новизна и практическая значимость полученных результатов, представлено краткое содержание и основные результаты работы.

В первой главе представлен обзор концепции магнитного полярона в сильно коррелированных системах, изложены основные теоретические идеи, касающиеся спин-поляронного сценария для зарядовых возбуждений в двумерном антиферромагнетике. Отличительная особенность развиваемого подхода состоит в рассмотрении локального полярона (а не голый дырки) в качестве нулевого приближения для квазичастицы. На следующем этапе это возбуждение одевается в антиферромагнитные спиновые волны – формируется полярон промежуточного (или бесконечного) радиуса. Метод позволяет непрерывно описать переход от нулевых температур к конечным и рассмотреть широкий диапазон допирования.

Во второй главе рассматривается модель Хаббарда на плоской квадратной решетке в пределе сильной корреляции. В рамках вариационного блочного подхода строится основное состояние с той же энергией, что и у двухподрешеточного неелевского, но с существенно иной спиновой структурой. Одночастичные возбуждения на фоне этого состояния оказываются локальными поляронами со спином $1/2$.

Их эффективная масса совпадает в эффективной массой возбуждений в парамагнитном состоянии в приближении "Хаббард-I". Однако минимумы спектра расположены в других точках зоны Бриллюэна. Продемонстрирована возможность связывания двух одночастичных возбуждений в синглетную пару с зарядом $2e$. Энергия связи пары оказывается порядка $0.1t$. Отдельно также обсуждается специальный случай квадратной лестницы.

Модель Хаббарда [1] на плоской квадратной решетке – одна из основных в теории ВТСП. В ее рамках нередко рассматриваются состояния типа RVB – с резонансными валентными связями [2] и обсуждается возможность спаривания носителей. Обычно RVB состояние Ψ_{gr} строится на основе двухузельного двухэлектронного синглета. В настоящей же работе Ψ_{gr} строится на основе синглетного основного состояния $|4^0\rangle$ квадратного блока из четырех узлов с четырьмя электронами (один электрон на узел – половинное заполнение). Блочный синглет более адекватен квадратной симметрии задачи и лучше учитывает ближний порядок.

Итак, решетка делится на минимальные блоки, сохраняющие ее симметрию – квадраты из четыре узлов. Тогда гамильтониан Хаббарда (1) можно представить в блочном виде:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\mathbf{n}} \hat{h}_{\mathbf{n}} + \sum_{\langle \mathbf{nm} \rangle} \hat{t}_{\mathbf{nm}} \quad \hat{h}_{\mathbf{n}} = \sum_{S,i} \hat{X}_{\mathbf{n}}^{S^i S^i} \varepsilon_S^i \\ \hat{t}_{\mathbf{nm}} &= \sum_{Sij, Pkl} \left(\hat{t}_{\mathbf{nm}, SP}^{ij, kl} \hat{X}_{\mathbf{n}}^{(S-1)^i S^j} \hat{X}_{\mathbf{m}}^{(P+1)^k P^l} + h.c. \right) \end{aligned} \quad (6)$$

где $\hat{h}_{\mathbf{n}}$ есть гамильтониан блока \mathbf{n} , а $\hat{t}_{\mathbf{nm}}$ представляет собой оператор межблочного перескока, $\langle \mathbf{nm} \rangle$ – ближайшие соседние блоки, $\hat{X}_{\mathbf{n}}^{\lambda\mu}$ – оператор Хаббарда [1], переводящий блок \mathbf{n} из состояния μ в состояние λ , $|S\rangle$ собственное состояние блока с S электронами ($S = 0 \div 8$) и энергией ε_S^i (i – соответствующий набор квантовых чисел). Наконец $\hat{t}_{\mathbf{nm}, SP}^{ij, kl}$ – это соответствующие перескоковые матричные элементы.

В качестве индексов i удобно выбирать собственные значения q, v основных операций симметрии квадрата: \hat{C}_4 – вращения на $\pi/2$ и $\hat{\sigma}_y$ – отражения относительно оси Oy .

Основное состояние $|4^0\rangle$ блока с четырьмя электронами – синглет. Оно имеет $q = -1, v = +1$ и энергию $\varepsilon_4^0 = -12\alpha t [1 + O(\alpha^2)]$; $\alpha = t/U \ll 1$. Следующее по энергии состояние $|4^1\rangle$ имеет спин, равный единице и энергию $\varepsilon_4^1 = -8\alpha t$.

Далее вводится вариационная функция основного состояния системы с $4N$ электронами (N – число блоков). Она строится на основе $|4^0\rangle$ и всех состояний $|3^i\rangle, |5^j\rangle$ с тремя и пятью электронами в блоке:

$$\Psi_{gr} = \sum_{\mathbf{n}} \left(1 + \sum_{\mathbf{g}, i, j} \beta_{\mathbf{g}}^{ij} X_{\mathbf{n}}^{3^i 4^0} X_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{5^j 4^0} \right) \Psi_0 \quad \Psi_0 = \prod_{\mathbf{n}} |4_{\mathbf{n}}^0\rangle \quad (7)$$

$\beta_{\mathbf{g}}^{ij}$ – вариационные параметры, \mathbf{g} – вектор ближайшего блока-соседа. Нулевое приближение Ψ_0 построено из независимых блоков с четырьмя электронами, каждый из которых находится в синглетном состоянии $|4^0\rangle$ с наименьшей энергией ε_4^0 . Прямое вычисление $\langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$ для пробной функции (7) с учетом всех состояний $|3^i\rangle, |5^j\rangle$ ведет к следующей вариационной оценке для энергии на блок: $\varepsilon^0 = \varepsilon_4^0 + \tilde{\varepsilon}_4$, $\tilde{\varepsilon}_4 = -4\alpha t$, $\varepsilon^0 = -16\alpha t + O(\alpha^3 t)$. В пересчете на один узел $e_0 = \varepsilon_0/4 = -4\alpha t = -4t^2/U$, это ровно та же самая величина, что и для обычного антиферромагнитного неелевского состояния (e_N). Однако по своим свойствам построенное состояние (7) радикально отличается от неелевского и обладает типичными RVB-чертами: магнитные подрешетки отсутствуют, средний спин (и средняя проекция спина) на каждом узле равен нулю, однако спин-спиновые корреляторы на разных узлах отличны от нуля и имеют АФМ характер.

Для квазиодномерной "лестницы квадратов" (то есть для двух одномерных цепочек с одинаковым перескоком вдоль цепочек и между ними) аналогичные вычисления дают $e^0 = -3.5\alpha t$ для энергии основного состояния на один узел, что ниже неелевской энергии $e_N^0 = -3\alpha t$.

Для Ψ_{gr} вида (7) энергия e^0 в линейном по α приближении не понижается при усложнении состояния $|4\rangle$, то есть при подмешивании других состояний $|4^i\rangle$. Чтобы лучше учесть корреляции большего масштаба, необходимо увеличивать размер блока, разбивая плоскость на квадраты из 16 узлов. Точная аналитическая диагонализация гамильтониана такого блока очень сложна. Но можно построить состояния блока 4×4 приближенно, рассматривая их как нефакторизуемые комбинации состояний четырех блоков 2×2 . С учетом, как и в (7), перескоков между 4×4 -блоками получено в простейшем приближении $e = -4.06\alpha t$ для энергии на один узел, то есть ниже неелевской (оценка для энергии при этом остается строго вариационной).

На втором этапе рассматриваются одночастичные возбуждения дырочного типа на фоне основного состояния (7). Для построения их

волновых функций используются состояния $|3^i\rangle$ с тремя электронами в блоке (всего их восемь). Нижнее по энергии состояние $|3^0\rangle$ обладает спином $3/2$ (квартет) и энергией $\varepsilon_3^0 = -2t + O(\alpha t)$; симметричные индексы $q = v = -1$. Следующие четыре состояния $|3^{v,\sigma}\rangle$ преобразуются по двумерному представлению $\widehat{C}_4 |3^{v,\sigma}\rangle = -v |3^{-v,\sigma}\rangle$, $v = \pm 1$. Их спин $1/2$ (два вырожденных дублета) и энергия $\varepsilon_3^v = -\sqrt{3}t + O(\alpha t)$.

Каждое состояние $|3^i\rangle$ фактически является неподвижным магнитным поляроном, размер которого ограничен размером блока. Необходимо учесть возможность движения полярона, что может привести к понижению энергии. Итак, пробная функция дырочного возбуждения выглядит следующим образом:

$$\Psi_p^j = \sum_n \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{n}) \widehat{X}_{\mathbf{n}}^{3^j 4^0} \Psi_{gr} \quad (8)$$

где \mathbf{n} – радиус-вектор блока, а квазиимпульс \mathbf{p} лежит в зоне Бриллюэна решетки блоков. Спектр состояний (8) определяется матричными элементами $\langle 4_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^0 3_{\mathbf{n}}^i | \widehat{H} | 4_{\mathbf{n}}^0 3_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^j \rangle$. Для нижних по энергии "троек" $|3^0\rangle$ эти матричные элементы равны нулю, то есть энергия возбуждения Ψ_p^0 не зависит от импульса и равна $-2t + O(\alpha t)$. Спектр состояний, построенных из $|3^{v,\sigma}\rangle$, имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_v(\mathbf{p}) &= \varepsilon_3^v + \tilde{\varepsilon}_3 & \tilde{\varepsilon}_3 &= -2\gamma v [\cos(p_x 2a) - \cos(p_y 2a)] - \tilde{\varepsilon}_4 \\ \gamma &= | \langle 4_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^0 3_{\mathbf{n}}^{v,\sigma} | \widehat{H} | 4_{\mathbf{n}}^0 3_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{v,\sigma} \rangle | & &= 0.125t [1 + 2\sqrt{6}\alpha + O(\alpha^2)] \end{aligned} \quad (9)$$

где a постоянная решетки. Таким образом, состояние с наименьшей собственной энергией $|3^0\rangle$ неподвижно, а энергия состояния $|3^{v,\sigma}\rangle$ за счет движения по решетке становится меньше, чем энергия $|3^0\rangle$.

Минимум энергии дырки в состоянии $|3^{v,\sigma}\rangle$ равен $\varepsilon_3^v = -(\sqrt{3}t + 4\gamma) + O(\alpha t) = -2.23t$, ширина зоны $8\gamma = t$. Эффективная масса дырки $|3^{v,\sigma}\rangle$ около дна зоны равна $1/8\gamma a^2$. Такое же значение получается в приближении "Хаббард-I". Дырочная зона (9) вырождена по v , поскольку $|3^{v,\sigma}\rangle$ преобразуются по двумерному представлению.

Спектр электронных возбуждений (пять электронов в блоке) находится аналогично. В результате для щели в спектре одночастичных возбуждений получается: $\Delta = U - 4.46t$. Схема Хаббарда расщепления уравнений для функции Грина дает для парамагнитного состояния $\Delta = U - 4t$, для неелевского – $\Delta \simeq U - t^2/U$. В одномерном случае соответствующие значения для щели равны $U - 3.27t$ (излагаемый ме-

тод), $U - 2t$ (расщепление) и $\Delta \simeq U - t^2/U$ (неелевское состояние). Точное решение, известное только в 1D случае, дает $\Delta = U - 4t$ [3].

Третий шаг – рассмотрение двух дырок. Дырки в разных блоках описываются уже построенными состояниями - "тройками" $|3^{v,\sigma}\rangle$. Необходимо, учесть и случай, когда две дырки оказываются внутри блока, то есть рассмотреть "двойки" $|2\rangle$, с двумя дырками в блоке.

Состояние $|2^0\rangle$ с наимизшей энергией $\varepsilon_2^0 = -2\sqrt{2}t$ является синглетом; для него $q = v = +1$. Фактически состояние $|2\rangle$ есть биполярон, в том же смысле, в котором $|3\rangle$ является поляроном. Энергия первого возбужденного состояния- "двойки" $|2^1\rangle$ равна $\varepsilon_2^1 = -2t$.

Эффективное взаимодействие двух дырок в соседних блоках определяется их перескоком в один блок $|3_{\mathbf{n}}\rangle |3_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}\rangle \rightarrow |4_{\mathbf{n}}\rangle |2_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}\rangle$ и обратным процессом. Поскольку $2\varepsilon_3^v < \varepsilon_2^0 + \varepsilon_4^0$ ($\varepsilon_3^v = -\sqrt{3}t$, $\varepsilon_2^0 = -2\sqrt{2}t$, $\varepsilon_4^0 \sim at$), то, с точки зрения собственной энергии блоков, взаимодействие дырок имеет характер отталкивания. Но учет динамических процессов, то есть матричных элементов $\langle 2_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}4_{\mathbf{n}} | \hat{H} | 3_{\mathbf{n}}3_{\mathbf{n}+\mathbf{g}} \rangle$, может привести к притяжению. Свойства симметрии состояний $|2^0\rangle, |4^0\rangle$ таковы, что этот матричный элемент отличен от нуля только когда $|3_{\mathbf{n}}\rangle$ и $|3_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}\rangle$ обладают противоположной проекцией спина σ и одинаковой четностью v , Он равен $\tau = \langle 2_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^0 4_{\mathbf{n}}^0 | \hat{H} | 3_{\mathbf{n}}^{v,\sigma} 3_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{v,-\sigma} \rangle = 0.197t$.

Будем рассматривать задачу двух дырок в системе на фоне основного состояния Ψ_{gr} (7). При описании дырок ограничимся "двойками" и "тройками" с наимизшей энергией, то есть состояниями $|2^0\rangle, |3^j\rangle$ ($j = v, \sigma$). Тогда гамильтониан приобретает вид

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_{\mathbf{n}} (\varepsilon_2 \hat{X}_{\mathbf{n}}^{22} + \sum_j \varepsilon_3 \hat{X}_{\mathbf{n}}^{jj}) + \gamma \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{g}, j} v S_{\mathbf{g}} \hat{X}_{\mathbf{n}}^{j4} \hat{X}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{4j} \\ + \tau \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{g}, j} S_{\mathbf{g}} \sigma (\hat{X}_{\mathbf{n}}^{2\bar{j}} \hat{X}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{4j} + \hat{X}_{\mathbf{n}}^{j4} \hat{X}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{2\bar{j}}) \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} j = (V, \sigma) \quad \bar{j} = (V, -\sigma) \quad v, \sigma = \pm 1 \quad S_{\mathbf{g}} = (|g_x| - |g_y|) / |g| \\ \varepsilon_2 = -2\sqrt{2}t \quad \varepsilon_3 = -\sqrt{3}t \end{aligned}$$

$S_{\mathbf{g}}$ учитывает то, что перескоковый матричный элемент τ для прыжков вдоль осей Ox и Oy имеет разный знак. Гамильтониан (10) описывает собственные энергии поляронов и биполярона, свободное движение поляронов (матричный элемент γ из (9)) и образование биполярона. Хаббардовские операторы на каждом блоке связаны условием констрейнта $\hat{X}_{\mathbf{n}}^{44} + \sum_j \hat{X}_{\mathbf{n}}^{jj} + \hat{X}_{\mathbf{n}}^{22} = 1$.

Спектр определяется полюсами запаздывающих функций Грина

$$F_{\mathbf{n}} = \langle\langle \widehat{X}_{\mathbf{n}}^{42} | \widehat{X}_{\mathbf{n}}^{24} \rangle\rangle; \quad G_{\mathbf{n},\mathbf{n}+\mathbf{m}}^v = \sigma \langle\langle \widehat{X}_{\mathbf{n}}^{4j} \widehat{X}_{\mathbf{n}+\mathbf{m}}^{4j} | \widehat{X}_{\mathbf{n}}^{24} \rangle\rangle; \quad j = (v, \sigma) \quad (11)$$

Уравнения движения для них имеют вид:

$$\begin{aligned} (z - \varepsilon_2)F_{\mathbf{n}} &= \tau \sum_{\mathbf{g},v} (G_{\mathbf{n},\mathbf{n}+\mathbf{g}}^v + G_{\mathbf{n}+\mathbf{g},\mathbf{n}}^v) \\ (z - 2\varepsilon_3)G_{\mathbf{n},\mathbf{n}+\mathbf{m}}^v &= \tau \sum_{\mathbf{g}} \delta_{\mathbf{m},\mathbf{g}} S_{\mathbf{g}} (F_{\mathbf{n}} + F_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}) \\ &+ (1 - \delta_{\mathbf{m},0}) \gamma \sum_{\mathbf{g},v} v S_{\mathbf{g}} (G_{\mathbf{n},\mathbf{n}+\mathbf{m}+\mathbf{g}}^v + G_{\mathbf{n}+\mathbf{g},\mathbf{n}+\mathbf{m}}^v) \end{aligned} \quad (12)$$

где $z = \omega + i\delta$. (в правой части опущены коммутаторные члены, поскольку они не существенны при нахождении спектра). Уравнения получены в простейшем приближении, аналогичном приближению "Хаббард-I". Состояния с более чем двумя дырками в системе не учитывались, предполагалось, что $\langle \widehat{X}_{\mathbf{n}}^{44} \rangle = 1$. Первое уравнение описывает распад биполярона на два полярона в соседних блоках. Второе соответствует обратному процессу и свободному движению поляронов. Система (12) аналогична системе уравнений, которая возникает в задаче о связанном состоянии двух спиновых волн. После фурье-преобразования она решается точно, что приводит к следующим уравнениям, определяющим спектр $z = \omega(q)$:

$$\begin{aligned} \Theta \tilde{U} + (1 - \Theta)\omega &= w_{\mathbf{q}}^{-1} \quad \Theta = \frac{1}{2}(\gamma/t)^2 \quad \tilde{U} = \varepsilon_2 - 2\varepsilon_3 \\ w_{\mathbf{q}} &= \sum_{\mathbf{k}} [\omega + i0 - \varepsilon(\mathbf{q}/2 + \mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{q}/2 - \mathbf{k})]^{-1} \\ \varepsilon_{\mathbf{k}} &= 2\gamma[\cos(k_x 2a) - \cos(k_y 2a)] \end{aligned} \quad (13)$$

Спектр отсчитывается от центра зоны двух дырок с энергией $2\varepsilon_3$.

Система уравнений (13) имеет решения двух видов. Решение первого вида описывает свободное движение двух частиц с полным импульсом \mathbf{q} и наименьшей энергией -8γ . Другой вид соответствует связанному состоянию двух дырок ($\omega_{\mathbf{q}} < -8\gamma$) и возникает при

$$8\gamma(\Theta^{-1} - 1) > \tilde{U} \quad (14)$$

(Для "лестницы квадратов" 8γ в левой части надо заменить на 4γ).

Для полученных выше параметров задачи $\gamma = 0.125t$, $\Theta = 0.26$ и $U = 0.64t$ это условие выполнено. Дно зоны связанных состояний находится при $\mathbf{q} = 0$. Уравнение (13) при подстановке этих параметров дает для щели $\Delta = -8\gamma - \omega_{\mathbf{q}=0}$ значение $\Delta \simeq 0.1t$. При $\Delta \ll 8\tau$ эффективная масса m равна $2m_0$, где m_0 – масса одной дырки.

Таким образом, в рамках использованных приближений можно сделать вывод, что двум дыркам на плоскости энергетически выгодно объединиться в синглетную пару с зарядом $2e$. Эта пара представляет собой движущееся состояние $|2^0\rangle$ с когерентной примесью двух состояний $|3^{v,\sigma}\rangle$, "привязанных" к локальному биполярону $|2^0\rangle$.

Для 1D цепочки проведены аналогичные вычисления на основе состояний двухузельных блоков. Условие (14) в этом случае не выполняется, то есть связывание двух дырок в пару энергетически невыгодно.

Итак, для модели Хаббарда на квадратной решетке построено простое основное состояние RVB-типа, получен спектр одночастичных возбуждений и показана возможность связывания двух дырок в пару. Существенно, что подход опирается на переформулирование исходного узельного гамильтониана в блочном виде (6). Тогда дырка автоматически рассматривается как магнитный полярон малого размера. Две дырки соответствуют либо двум поляронам (дырки в разных блоках), либо биполярону (дырки в одном блоке). Тогда блочный гамильтониан эквивалентен обычному гамильтониану Хаббарда с внутриузельным отталкиванием (где новый "узел" – блок из четырех старых узлов), так как $\tilde{U} = \varepsilon_2 - 2\varepsilon_3 > 0$. Причем это отталкивание порядка затравочного перескока t . Еще одно отличие от стандартного гамильтониана Хаббарда в том, что матричный элемент τ для перескока дырки на блок, уже содержащий другую дырку, больше, чем матричный элемент γ для перескока на блок без дырок. Именно этот динамический механизм может быть ответственным за образование пар.

В конце главы оценено минимальное значение параметра $\alpha = t/U$, при котором еще можно не учитывать возможность образования "ферромагнитного мешка" [4]. Показано, что построенное состояние стабильно по отношению к образованию "ферромагнитного мешка" по крайней мере при $\alpha > 0.025$, то есть остается достаточно большой диапазон α , в котором выполняется условие сильной корреляции $\alpha \ll 1$.

В третьей главе анализируются экспериментальные данные по спиновой восприимчивости ВТСП купратов и построена теория, которая адекватно воспроизводит эксперимент. Учет действительных и мнимых перенормировок спиновых функций Грина позволяет детально объяснить эволюцию спектра спиновых возбуждений $\omega(q)$ и восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ в диапазоне от диэлектрика до оптимального допирования. При малой фрустрации, отвечающей слабодопирован-

ному режиму, воспроизводится седловая особенность $\omega(q)$ и скейлинг $\chi_{2D}(\omega) = \int d\mathbf{q} \mathbf{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)$, получено аналитическое выражение для скейлинговой функции. В режиме большой фрустрации (оптимальное допирование) демонстрируется страйп-сценарий, что позволяет получить пик $\chi_{2D}(\omega)$ в области $\omega \sim 50 meV$. Рассматривается только нормальное, несверхпроводящее состояние.

В начале главы подробно анализируются эксперименты по изучению спинового отклика в купратах. В самых общих чертах их результаты следующие. При нулевом и малом допировании проинтегрированная мнимая часть спиновой восприимчивости

$$\chi_{2D}(\omega, T) = \int d\mathbf{q} \mathbf{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega, T) \quad (15)$$

в широком диапазоне частот практически постоянна (см. Рис.1) и начинает расти при $\omega \gtrsim 150 meV$ [5]. То и другое слабо зависит от температуры. Кроме того, зависимость χ_{2D} от ω и T хорошо укладывается в эмпирический скейлинговый закон [6, 7, 8, 9, 10]

$$\frac{\chi_{2D}(\omega, T)}{\chi_{2D}(\omega, T \rightarrow 0)} = f\left(\frac{\omega}{T}\right) \quad (16)$$

где скейлинговая функция $f(x) = (2/\pi) \text{artg}(Ax + Bx^3)$, A и B зависят от допирования, при малом допировании $B \gg A \sim 1$, а с ростом допирования B резко убывает. При малом допировании спиновый отклик демонстрирует хорошие квазичастичные свойства – при фиксированном квазиимпульсе $\mathbf{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)$ проявляет частотный пик.

С ростом концентрации дырок поведение $\chi_{2D}(\omega)$ радикально меняется – пик смещается из области $\omega \gtrsim 200 meV$ вниз, опускаясь при оптимальном допировании до $\omega_0 \sim 35 meV$, см. Рис.1. В этой же области частот находится максимум $\mathbf{Im} \chi(\mathbf{Q}, \omega)$, то есть квазичастичный пик на антиферромагнитном векторе $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ [11], (в зонных обозначениях это точка \mathbf{M}). Оба пика имеют ширину $\sim \omega_0$.

Для объяснения эксперимента в настоящей работе предлагается подход, основанный на двумерной фрустрированной модели Гейзенберга. Ключевое предположение – аналогия между допированием в моделях со свободными носителями и фрустрацией в чисто спиновой модели. Это предположение физически естественно: движущаяся дырка разрушает магнитный порядок, в чисто спиновой модели то же самое происходит с ростом фрустрации. Кроме того, оно основано на

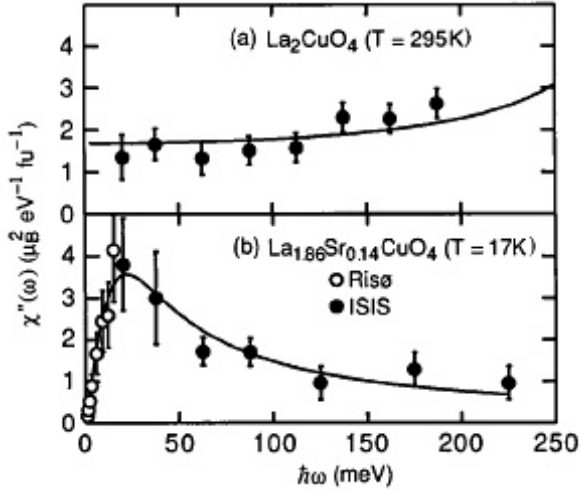


Рис. 1: Изменение экспериментальной проинтегрированной восприимчивости $\chi''_{2D}(\omega)$ с ростом допирования (из [5]). Верхняя кривая – диэлектрик La_2CuO_4 , нижняя – допирование, близкое к оптимальному $La_{1.86}Sr_{0.14}CuO_4$, ($T_c = 35K$).

сходном характере изменения спиновых корреляторов в зависимости от фрустрации и от допирования [12]. Подчеркнем, что никаких строгих утверждений на этот счет не существует. Оказывается, однако, что чисто спиновая фрустрированная модель позволяет воспроизвести все основные свойства спиновой подсистемы купратов в диапазоне допирования от нулевого до оптимального.

Гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{1}{2}J_1 \sum_{i,g} \vec{S}_i \vec{S}_{i+g} + \frac{1}{2}J_2 \sum_{i,d} \vec{S}_i \vec{S}_{i+d} \quad (17)$$

описывает локализованные на квадратной решетке $S = 1/2$ спины, J_1 – АФМ обменная константа для первых ближайших соседей, J_2 – для вторых ближайших, \mathbf{g}, \mathbf{d} – вектора первых и вторых ближайших соседей. Фрустрация характеризуется стандартной переменной p ("параметр фрустрации") $p = J_2/(J_1 + J_2)$, $J_1 = (1 - p)J$, $J_2 = pJ$, все энергетические величины измеряются в единицах J и считается $J = 1$. В соответствии со сказанным выше параметр фрустрации p можно считать аналогом концентрации дырок.

Вычисления проведены в рамках сферически-симметричного само-согласованного подхода, основанного на двух предположениях:

1. Средний спин на узле $\langle \mathbf{S}_i \rangle$ равен нулю. Таким образом, жесткие неелевские подрешетки отсутствуют (то есть рассматривается модель

спиновой жидкости), а магнитный порядок выражается на языке спин-спиновых корреляторов.

2. Сами эти спин-спиновые корреляторы сферически симметричны, то есть $\langle S_i^\alpha S_j^\beta \rangle \sim \delta_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = x, y, z$) и не зависят от α .

Процедура самосогласованного вычисления функции Грина при отсутствии затухания, то есть в среднеполевом приближении, следующая. Уравнение движения для двухвременной запаздывающей функции Грина $G_{\mathbf{nm}}^z = \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega+i\delta} = -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle [S_{\mathbf{i}}^z(t), S_{\mathbf{j}}^z] \rangle$ имеет вид

$$\omega \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega = i \varepsilon_{z\beta\gamma} \sum_{\mathbf{f}=\mathbf{g},\mathbf{d}} J_f \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}}^\beta S_{\mathbf{n}}^\gamma | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega \quad (18)$$

где $J_g = J_1, J_d = J_2$ (в правой части первое – коммутаторное – слагаемое равно нулю).

На втором шаге для функции Грина из правой части (18) имеем:

$$\begin{aligned} & \omega i \varepsilon_{z\beta\gamma} \sum_{\mathbf{f}=\mathbf{g},\mathbf{d}} J_f \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}}^\beta S_{\mathbf{n}}^\gamma | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega = \\ & -2J_1 c_g \sum_{\mathbf{g}} (\delta_{\mathbf{nm}} - \delta_{\mathbf{n}+\mathbf{g},\mathbf{m}}) - 2J_2 c_d \sum_{\mathbf{d}} (\delta_{\mathbf{nm}} - \delta_{\mathbf{n}+\mathbf{d},\mathbf{m}}) + \\ & + i \varepsilon_{z\beta\gamma} \sum_{\substack{\mathbf{f}_1=\mathbf{g}_1,\mathbf{d}_1 \\ \mathbf{f}_2=\mathbf{g}_2,\mathbf{d}_2}} J_{f_1} J_{f_2} \langle i \varepsilon_{\beta j l} S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}_1+\mathbf{f}_2}^j S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}_1}^l S_{\mathbf{n}}^\gamma + i \varepsilon_{\gamma j l} S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}_1}^\beta S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}_2}^j S_{\mathbf{n}}^l | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega \end{aligned} \quad (19)$$

Для трехузельных членов в правой части (19) принято приближение следующего вида, отвечающее проекционному методу

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2}^j S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1}^l S_{\mathbf{n}}^\gamma & \approx \alpha_{\mathbf{g}} (\delta_{j l} \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2}^j S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1}^l \rangle S_{\mathbf{n}}^\gamma + \delta_{l \gamma} \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1}^l S_{\mathbf{n}}^\gamma \rangle S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2}^j) \\ & + \alpha_{\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2} \delta_{j \gamma} \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2}^j S_{\mathbf{n}}^\gamma \rangle S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1}^l \end{aligned}$$

здесь $\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 \neq 0$ (тривиальный член с $\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 = 0$ находится точно); α – вершинные поправки (см. ниже).

Тогда в \mathbf{k} -пространстве функция Грина G^z принимает вид:

$$G^z(\mathbf{q}, \omega) = \langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_\omega = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad S_{\mathbf{q}}^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^z \quad (20)$$

$$F_{\mathbf{q}} = -2 [J_1 c_g z_g (1 - \beta_g) + J_2 c_d z_d (1 - \beta_d)] \quad (21)$$

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = 2 [(\beta_1 K_1 + \beta_2 K_2) - (\beta_3 K_3 + \beta_4 K_4) - (\beta_5 K_5 + \beta_6 K_6)] \quad (22)$$

Входящие в выражение для спектра величины $K_1 \div K_6$ представляют собой решеточные суммы корреляторов на первых пяти координационных сферах, а величины $\beta_1 \div \beta_6$ – простые комбинации $\beta_g(\mathbf{q}) = \frac{1}{z_g} \sum_{\mathbf{g}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{g}} = \frac{1}{2} (\cos(q_x) + \cos(q_y))$ и $\beta_d(\mathbf{q}) = \frac{1}{z_d} \sum_{\mathbf{d}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{d}} = \cos(q_x) * \cos(q_y)$. Здесь z_g и z_d – число первых и вторых ближайших соседей (для квадратной решетки $z_g = z_d = 4$).

В $F_{\mathbf{q}}$ и $\omega_{\mathbf{q}}^2$ входят корреляторы $c_{\mathbf{r}}$ для первых пяти координационных сфер. Выражая их через функцию Грина $G_{\mathbf{q}}^z$

$$c_{\mathbf{q}}^z = \langle S_{\mathbf{q}}^z S_{-\mathbf{q}}^z \rangle = -\frac{1}{\pi} \int d\omega m(\omega) \mathbf{Im} G^z(\mathbf{q}, \omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{2\omega_{\mathbf{q}}} (2m(\omega_{\mathbf{q}}) + 1)$$

$$m(\omega) = (e^{\frac{\omega}{T}} - 1)^{-1} \quad (23)$$

получаем систему пяти самосогласованных уравнений:

$$c_{\mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} c_{\mathbf{q}} \beta_{n,m}(\mathbf{q}); \quad \mathbf{r} = n\mathbf{g}_x + m\mathbf{g}_y \quad (\mathbf{r} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, 2\mathbf{g}, 2\mathbf{d}, \mathbf{g} + \mathbf{d}) \quad (24)$$

$$\beta_{n,m}(\mathbf{q}) = \frac{1}{z} \sum e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \frac{1}{2} (\cos(nq_x) \cos(mq_y) + \cos(mq_x) \cos(nq_y))$$

В $K_1 \div K_6$ входят $\tilde{c}_r = \alpha_r c_r$ – корреляторы с учетом вершинных поправок. Конкретный выбор этих вершинных поправок позволяет строго соблюсти спиновый констрейнт $\langle S_i^z S_i^z \rangle = 1/4$, обеспечить корректный предел $p \rightarrow 1$, где решетка (после перехода в страйп-фазу) распадается на две невзаимодействующие АФМ подрешетки, и предел нулевой температуры и нулевой фрустрации.

Полученная замкнутая система самосогласованных уравнений решается численно при каждом фиксированном значении температуры T и фрустрации p .

Основные черты эволюции спиновой восприимчивости купратов передаются уже в этом среднеполевом приближении. В пределе малой фрустрации и $T \rightarrow 0$ спектр имеет вид, аналогичный тому, какой получается в линейном подходе спиновых волн для 2D модели Гейзенберга со взаимодействием только ближайших соседей [13].

С ростом фрустрации открывается щель $\Delta_{\mathbf{Q}}$ в антиферромагнитной точке $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, что означает потерю дальнего антиферромагнитного порядка (даже и при $T = 0$). При еще большем увеличении фрустрации щель в $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ продолжает расти, а спектр в точках

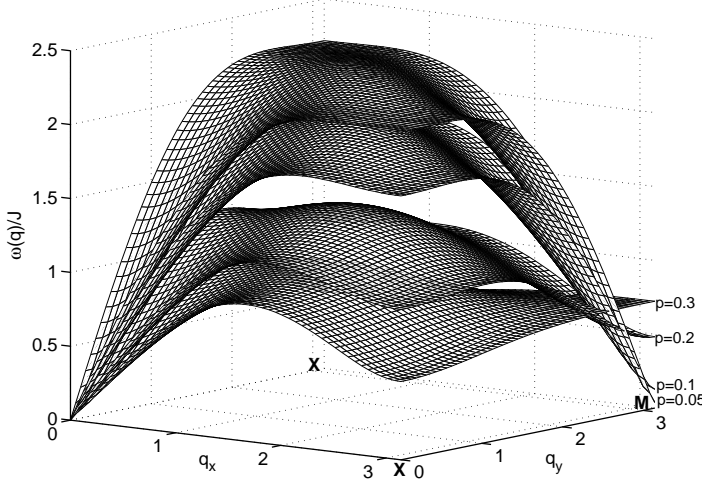


Рис. 2: Эволюция спектра $\omega(\mathbf{q})$ в среднеполевом приближении с ростом фрустрации. Температура $T/J = 0.1$. Показана четверть полной зоны Бриллюэна, $\mathbf{M} \equiv \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, $\mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$.

$\mathbf{X} = (0, \pm\pi), (\pm\pi, 0)$ смягчается. Закрывание щелей в точках \mathbf{X} соответствует в чисто спиновой задаче переходу в страйп-фазу. При любой фиксированной фрустрации с ростом температуры все щели растут.

Качественно это отвечает экспериментальной зависимости $\chi_{2D}(\omega, T) = \int d\mathbf{q} \text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)$ от допирования. При малой фрустрации на малых частотах, отвечающих линейному ходу спектра вблизи точки \mathbf{Q} , основной вклад в интеграл по квазиимпульсу от $\text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)$ (27) набирается вблизи этой точки. И тогда на этих частотах $\chi_{2D} \sim \text{Const}$. При частотах, близких к максимуму спектра, образуется максимум χ_{2D} . При большей фрустрации, когда щели в точках \mathbf{Q} и \mathbf{X} становятся близкими по величине, и максимум χ_{2D} перемещается в область меньших частот, порядка величины этих щелей. Эволюция спинового спектра в среднеполевом приближении показана на Рис.2, а восприимчивость $\chi_{2D}(\omega)$ – на Рис.3.

Однако некоторые важные экспериментальные результаты, в первую очередь скейлинг восприимчивости, невозможно даже качественно объяснить без выхода за рамки среднего поля. Этот выход осуществляется следующим образом.

С помощью метода неприводимых функций Грина [14, 15] можно вывести формально точное выражение для $\langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega}$ [16]

$$G^z(\mathbf{q}, \omega) = \langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega} = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - M(\mathbf{q}, \omega)} \quad (25)$$

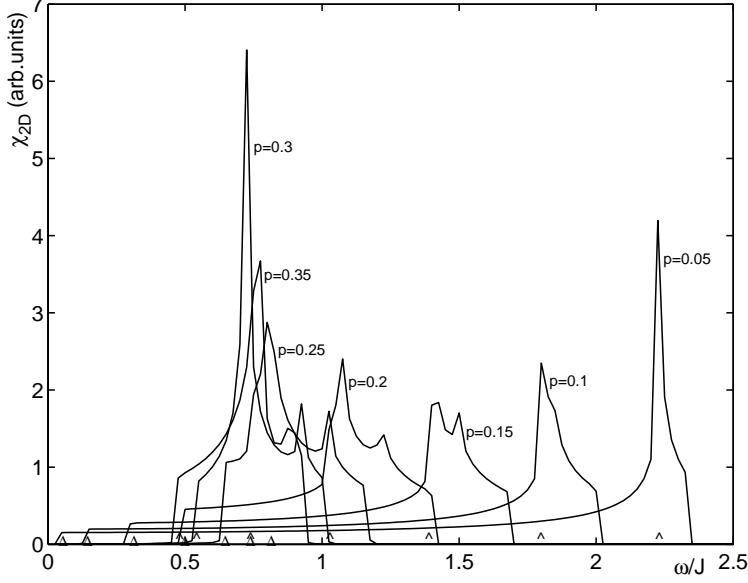


Рис. 3: Изменение $\chi_{2D}(\omega)$ в среднеполюсовом приближении с ростом фрустрации. Δ - положение щели в точке $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ при данной фрустрации (с ростом p она монотонно возрастает), $\hat{\ } -$ щель в точках $\mathbf{X} = (0, \pi)$ (с ростом p убывает).

где $\omega_{\mathbf{q}}$, как и в (20) – спектр спиновых возбуждений (22), а $M(\mathbf{q}, \omega) = M' + iM''$ – Фурье-образ новой сложной функции Грина, аналитические свойства которой такие же, как у $G_{\mathbf{q}, \omega}^z$. $M(\mathbf{q}, \omega)$ – это трехузельная неприводимая функция Грина, описывающая распад спиновой волны на три спиновых волны (или эффективный распад спинового возбуждения на электронное и дырочное возбуждения – в случае $t - J$ модели). Последовательное вычисление $M(\mathbf{q}, \omega)$ наталкивается на существенные математические трудности. Поэтому приходится прибегать к полуфеноменологическому рассмотрению.

В простейшем приближении вводятся поправки к затравочной функции Грина (20) от мнимой и действительной частей $M(\mathbf{q}, \omega)$. Мнимая часть $M''(\mathbf{q}, \omega)$ нечетна по ω . Поэтому полагаем $M''(\mathbf{q}, \omega) \approx -\omega\gamma$ и ограничиваемся затуханием γ , не зависящим от \mathbf{q} . В качестве приближения для действительной части M' берем $M' \sim |\sin(q_x) \sin(q_y)|^3$, то есть вводим перенормированный спектр $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2 = \omega_{\mathbf{q}}^2 + (\lambda |\sin q_x \sin q_y|)^3$. Выбор функционального вида M' обусловлен тем, что он должен содержать q -гармоники, отсутствующие в выражении для затравочного спектра (22).

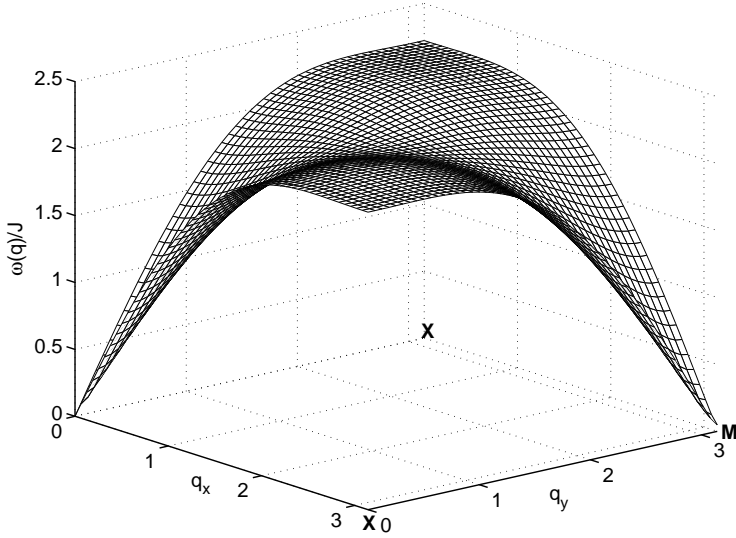


Рис. 4: Спектр спиновых возбуждений $\tilde{\omega}(\mathbf{q})$ для $p = 0.04$ с учетом перенормировок ($\gamma = 0.025$, $\lambda = -1.1$). Температура $T/J = 0.1$ ($T \sim 100K$ для $J \sim 100 meV$).

Таким образом, функция Грина принимает вид

$$G^z(\mathbf{q}, \omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2 + i\omega\gamma}, \quad (26)$$

и содержит два параметра – γ и λ . Процедура самосогласованных вычислений остается прежней. Мнимая часть динамической спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega) = -G^z(\mathbf{q}, \omega)$ в результате имеет вид

$$\text{Im } \chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\gamma\omega F_{\mathbf{q}}}{(\omega^2 - \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (27)$$

В пределе малого допирования $p \rightarrow 0$ щель в АФМ точке \mathbf{Q} при $T \rightarrow 0$ закрыта (в согласии с теоремой Мермина-Вагнера). С ростом фрустрации для нулевых перенормировок $\gamma = \lambda = 0$ щель открывается при $T \rightarrow 0$ при достижении $p = p^* \approx 0.09$. Учет затухания γ уменьшает щель, то есть увеличивает значение p^* .

На Рис.4 представлен спектр $\tilde{\omega}(\mathbf{q})$ для $p = 0.04$, $T = 0.1$, $\gamma = 0.025$ и $\lambda = -1.1$ ($T \sim 100K$ для $J \sim 100 meV$). Значение параметра фрустрации $p = 0.04$ – наименьшее из рассматриваемых – мы связываем с диэлектрическим пределом в купратах. Видно, что вблизи щели спектр почти линеен по $\tilde{q} = |\mathbf{q} - \mathbf{Q}|$ до $\omega_0 \sim 1.5$. Для $J = 120 meV$ скорость спиновых волн $\hbar c \approx 900 meV \text{ \AA}$, что близко к эксперименту [5].

Можно также убедиться, при любом фиксированном \mathbf{q} наблюдается

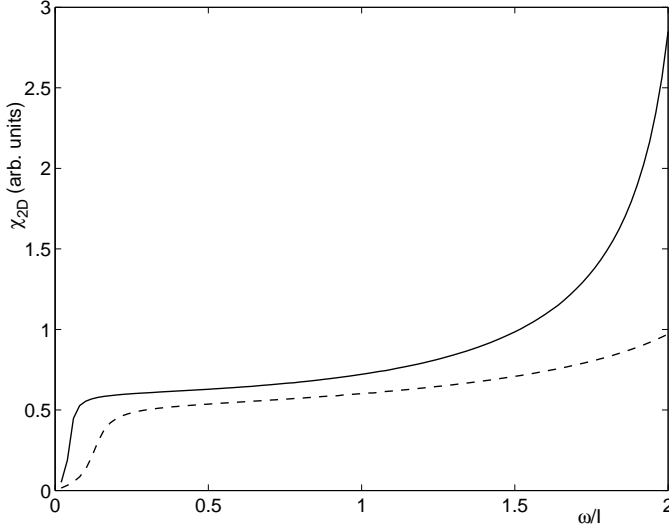


Рис. 5: Проинтегрированная восприимчивость $\chi_{2D}(\omega)$ для фрустрации $p = 0.04$ и линейного по температуре затухания $\gamma = 0.25T$. Сплошная линия – $T = 0.1J$, $\lambda = -1.0$, пунктирная – $T = 0.3J$, $\lambda = 2.0^{1/3}$. Щели в АФМ точке равны $\Delta_{\mathbf{Q}}(T = 0.1J) = 0.048J$, $\Delta_{\mathbf{Q}}(T = 0.3J) = 0.134J$, ($J \sim 100 meV$).

хорошо определенный частотный пик $\mathbf{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)$, который определяется спектром $\tilde{\omega}(\mathbf{q})$.

В согласии с экспериментом [17] $\tilde{\omega}(\mathbf{q})$ демонстрирует седловую особенность вблизи $\mathbf{q} = \mathbf{Q}/2$ ($\tilde{\omega}(\mathbf{q} = (0, \pi)) > \tilde{\omega}(\mathbf{q} = (\pi/2, \pi/2))$). Отметим, что в рамках спин-волновой теории для объяснения особенности необходим ФМ обмен J_2 на вторых соседях с $p \leq -0.1$ [17]. Это плохо согласуется с физической идеей о фрустрации (положительном обмене вторых соседей) как механизме разрушения дальнего порядка. Кластерные расчеты [18] также дают в диэлектрическом пределе $J_2 > 0$.

На Рис.5 показана $\chi_{2D}(\omega)$ при той же фрустрации $p = 0.04$ и линейном по температуре затухании $\gamma = 0.25T$ для двух случаев: $T = 0.1$, $\lambda = -1.0$ и $T = 0.3$, $\lambda = 2.0^{1/3}$. Значения λ выбирались из условия, чтобы результирующая щель в точке \mathbf{Q} также была приблизительно линейной по T : $\Delta_{\mathbf{Q}}(T = 0.1) = 0.048$, $\Delta_{\mathbf{Q}}(T = 0.3) = 0.134$. Как будет показано ниже, в пределе малой фрустрации линейность затухания и щели – необходимое условие скейлинга. Представленная $\chi_{2D}(\omega)$ демонстрирует качественное согласие с экспериментом [5] – она почти постоянна в широком интервале частот и растет при $\omega \gtrsim 150 meV$.

Численное нахождение для $p = 0.04$ при различных температурах скейлинговой функции $f(\omega/T)$ (16) показывают, что скейлинг хорошо выполняется и совпадает с экспериментальной подгонкой в

$La_{1.96}Sr_{0.04}CuO_4$ [7] $f_{ex}(\omega/T) = (2/\pi) \arctg\{0.43(\omega/T) + 10.5(\omega/T)^3\}$, если затухание линейно по T (в данном случае $\gamma = 0.25T$). При отклонении от этого условия скейлинг нарушается. То же самое происходит при большем значении фрустрации $p = 0.1$ (мы связываем этот случай с недодопированным режимом в купратах [10]). При выборе $\gamma = T$ и $\lambda = 0$ хорошо воспроизводятся скейлинговые кривые для купратов с промежуточным допированием $f_{ex}(\omega/T) = (\frac{2}{\pi}) \arctg\{a(\omega/T)\}$, $a \sim 1$ [8, 9, 10]. Отклонение $\gamma(T)$ от линейности разрушает скейлинг.

Таким образом, при не слишком больших p численные результаты демонстрируют скейлинг $\chi_{2D}(\omega, T)$, если γ линейна по T . При $p \ll 1$ это можно показать аналитически. Основной вклад в $\chi_{2D}(\omega)$ при не слишком больших частотах дает область вблизи точки \mathbf{Q} : $\tilde{q} = |\mathbf{q} - \mathbf{Q}| \leq \tilde{q}_0$, где $c\tilde{q}_0 \sim J$ – наибольший энергетический параметр задачи (вклад от окрестности $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ подавляется числителем $F_{\mathbf{q}}$ (21)). Тогда разложение спектра $\tilde{\omega}^2(q) \approx \Delta^2 + c^2\tilde{q}^2$ ($\Delta \equiv \Delta_{\mathbf{Q}}$), и в области $\omega < \omega_0 = c\tilde{q}_0$ нетрудно провести интегрирование (15), (27).

Полученное громоздкое выражение в наиболее интересном пределе $\Delta^2, \omega^2, \gamma^2 \ll c^2\tilde{q}_0^2$ приобретает вид

$$\chi_{2D}(\omega) = \frac{\overline{F_{\mathbf{q}}}}{4\pi c^2} \left[\begin{array}{ll} \Phi(\omega, \Delta, \gamma); & \theta < 1 \\ \pi + \Phi(\omega, \Delta, \gamma); & \theta > 1 \end{array} \right] \quad (28)$$

$$\Phi(\omega, \Delta, \gamma) \approx \arctg \left\{ \frac{\gamma\omega}{(\Delta^2 - \omega^2)} \right\} = \arctg \left\{ \frac{(\frac{\gamma}{T})\frac{\omega}{T}}{((\frac{\Delta}{T})^2 - (\frac{\omega}{T})^2)} \right\} \quad (29)$$

$$\theta = (c^2\tilde{q}_0^2 + \Delta^2 - \omega^2)(\omega^2 - \Delta^2)\gamma^{-2}\omega^{-2} \quad (30)$$

Выражение (28) доказывает, что линейности щели и затухания по температуре $\gamma = \alpha T$ и $\Delta = \beta T$ необходимы для скейлинга.

В рассматриваемом пределе переключение режимов (28), определяется Θ -функцией $\Theta(\theta) \simeq \Theta(\omega^2 - \Delta^2) = \Theta((\frac{\omega}{T})^2 - \beta^2)$. Тогда скейлинговая функция приобретает вид

$$\tilde{f}(\frac{\omega}{T}) = \Theta((\frac{\omega}{T})^2 - \beta^2) + \frac{1}{\pi} \arctg \left\{ \frac{\alpha\omega/T}{(\beta^2 - (\omega/T)^2)} \right\} \quad (31)$$

Таким образом, в противоположность экспериментальным подгонкам с помощью простого арктангенса или арктангенса от кубического полинома, здесь получается арктангенс "с переключателем" (переключение происходит при $\omega = \Delta$), содержащий, к тому же, микроскопиче-

скую информацию о Δ и γ . Эта функция при соответствующем под-
боре параметров α и β очень хорошо воспроизводит эксперименталь-
ный скейлинг как при малом, так и при промежуточном допировании
(напомним, что все численные результаты для $f(\omega/T)$ получены при
 $\gamma \sim T$ и таком выборе $\lambda(T)$, чтобы результирующая щель тоже была
линейной по температуре $\Delta \sim T$).

Итак, в рассмотренном аналитическом приближении $\chi_{2D}(\omega)$ (а с
ней и скейлинговая функция $\tilde{f}(\omega/T)$) при $\omega \lesssim J$ определяется выра-
жением (31) и представляет собой ступеньку, обращающуюся в ноль
при $\omega \sim \Delta$ и размытую на ширину $\sim \gamma$. Однако измерения при ге-
лиевых температурах в слабодопированных купратах демонстрируют
отклонение от такого поведения – на самых низких частотах $\chi_{2D}(\omega)$
начинает расти и лишь затем обращается в ноль [7, 8, 9].

Это также нетрудно продемонстрировать аналитически, если счи-
тать, что в очень узкой окрестности \mathbf{Q} спектр уплощается по отноше-
нию к дираковскому виду ($\tilde{\omega}^2(q) \approx \Delta^2 + c^2 \tilde{q}^2$), то есть для $\omega < \tilde{\omega}_0 \ll \omega_0$
спектр имеет вид $\tilde{\omega}^2(q) \approx \Delta^2 + \mu^2 \tilde{q}^4$. Отметим, что разложение (22),
в том числе и с учетом γ - и λ -перенормировок, не приводит к такому
виду, то есть здесь предположено наличие еще одной действительной
перенормировки M' . В этом случае интегрирование по $d\mathbf{q}$ (как и вы-
ше, с точностью до усреднения медленной функции $F_{\mathbf{q}}$) также мож-
но провести аналитически. Не приводя окончательного громоздкого
ответа, отметим лишь, что в нем можно явно указать на слагаемое,
содержащее при малых ω частотную зависимость $\sim 1/\omega$, как это и
наблюдается экспериментально [7, 8, 9]. Численный расчет $\chi_{2D}(\omega)$ на
основе выражения (27) с уплощенным вблизи точки \mathbf{Q} спектром вос-
производит полученный аналитический результат.

С ростом фрустрации щель в точке \mathbf{Q} растет, а в точке \mathbf{X} – падает.
Значение параметра фрустрации $p = 0.28$, при котором $\Delta_{\mathbf{Q}} \approx \Delta_{\mathbf{X}}$, мы
связываем со случаем оптимального допирования в купратах. В этой
области структурный фактор $s_{\mathbf{q}}$ уже не является узким пиком вокруг
точки \mathbf{Q} , а имеет гораздо более сложный вид.

В 2D модели Гейзенберга со взаимодействием первых и вторых бли-
жайших соседей в случае $p \rightarrow 0$ реализуется шахматная фаза, а для
 $p \rightarrow 1$ – страйп-фаза. При $T = 0$ в обоих пределах существует дальний

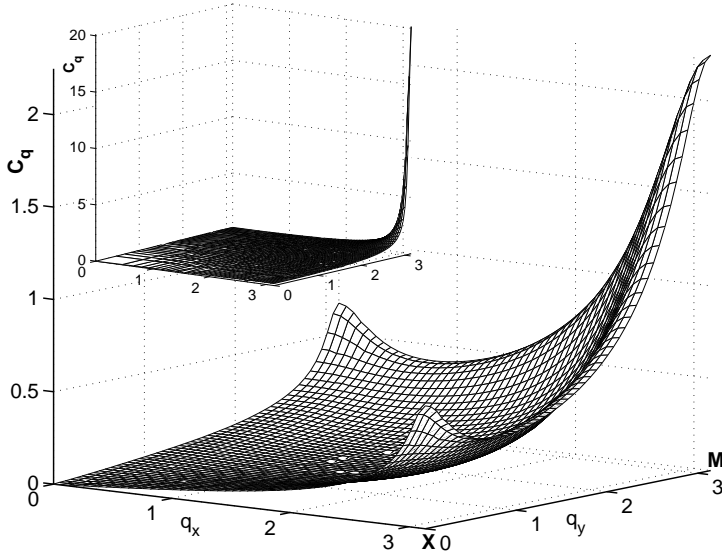


Рис. 6: Структурный фактор $c_{\mathbf{q}}$ при большой фрустрации $p = 0.28$. Температура $T = 0.025$, $\gamma = 0.4$, $\lambda = 10.0^{1/3}$. На вставке – узкий пик $c_{\mathbf{q}}$ при малой фрустрации $p = 0.1$ ($T = 0.1$, $\gamma = 0.08$, $\lambda = 0$), при меньших T и p пик $c_{\mathbf{q}}$ еще острее.

порядок, и спиновые корреляторы на больших расстояниях имеют вид

$$\begin{aligned} c_{r \rightarrow \infty}^{Neel} &= c_{\infty} (-1)^{n_x + n_y}; \\ c_{r \rightarrow \infty}^{stripe} &= c_{\infty} (1/2) [(-1)^{n_x} + (-1)^{n_y}]; \quad \mathbf{r} = n_x \mathbf{g}_x + n_y \mathbf{g}_y \end{aligned} \quad (32)$$

($\mathbf{g}_x, \mathbf{g}_y$ – вектора ближайших соседей по горизонтали и по вертикали).

Первому случаю отвечает закрытая щель в точке \mathbf{Q} , второму – в точке \mathbf{X} . Структурный фактор – острый пик вокруг соответствующей точки. При конечной температуре щель открывается, дальний порядок исчезает, c_{∞} в (32) переходит в убывающую функцию r , структурный фактор размывается на величину порядка обратной корреляционной длины ξ^{-1} . В области же промежуточных фрустраций, во-первых, дальний порядок нарушен уже при $T = 0$, во-вторых, "мотивы" неелевской и страйп фаз присутствуют с сопоставимыми весами. Поэтому структурный фактор $c_{\mathbf{q}}$ представляет собой суперпозицию размытых пиков вокруг \mathbf{Q} и \mathbf{X} . $c_{\mathbf{q}}$ при $p = 0.28$ представлен для температуры $T = 0.025$ на Рис.6 (значения перенормировок $\gamma = 0.4$, $\lambda = 10.0^{1/3}$, качественная картина $c_{\mathbf{q}}$ от них не зависит слабо).

Корректно ввести в этой ситуации корреляционную длину нельзя, можно лишь говорить, что спин-спиновые корреляции сохраняются на расстояниях порядка нескольких постоянных решетки.

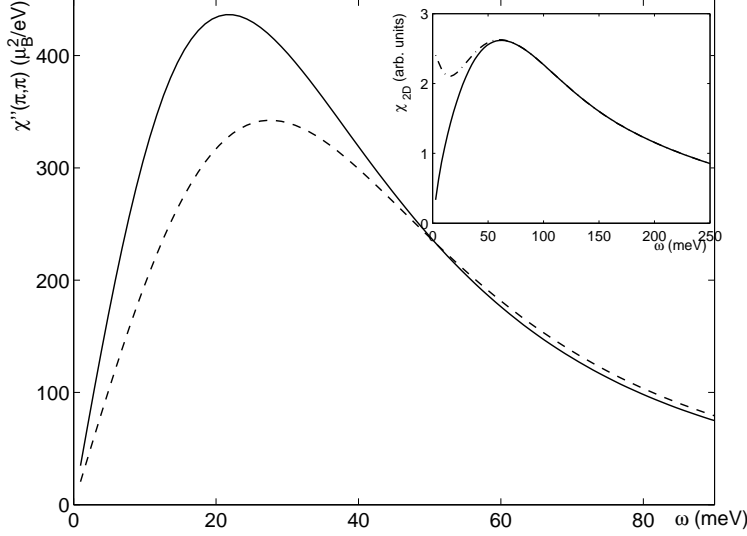


Рис. 7: Q -пики (мнимая часть восприимчивости в АФМ точке $\mathbf{Im} \chi(\mathbf{Q}, \omega)$) для случая фрустрации $p = 0.28$. Сплошная линия $T/J = 0.025$, пунктир – $T/J = 0.05$. Затухание $\gamma = 0.38 + 0.8T$, параметр $\lambda = 10.0^{1/3}$. При пересчете в абсолютные единицы использовано $J_1 = (1 - p)J = 140 \text{ meV}$. На вставке: $\chi_{2D}(\omega)$ – сплошная кривая и $\chi_{2D}(\omega)(2n_{Bose} + 1)$ – штрих-пунктир для случая $T/J = 0.05$.

Что же касается восприимчивости χ_{2D} , то интеграл для нее даже и при $T \rightarrow 0$ уже не определяется вкладом только от окрестности \mathbf{Q} , и аналитическое рассмотрение становится невозможным.

Для $p = 0.28$ характеристики спиновой подсистемы численно находятся на основе (27) и сравниваются с экспериментом для купратов, близких к оптимально допированным. Результаты приведены для температур $T = 0.025$ и 0.05 . Затухание взято в виде $\gamma = 0.38 + 0.8T$, в отличие от предела малой фрустрации, здесь γ не стремится к нулю при $T \rightarrow 0$. Второй ренормировочный параметр $\lambda = 10.0^{1/3}$. Значения γ и λ выбирались так, чтобы наилучшим возможным образом удовлетворить эксперименту. Для $T = 0.025$ и 0.05 щели $\Delta_{\mathbf{Q}} = 0.197$, $\Delta_{\mathbf{X}} = 0.179$ и $\Delta_{\mathbf{Q}} = 0.228$, $\Delta_{\mathbf{X}} = 0.210$, соответственно.

На Рис.7 представлены для этих температур Q -пики, то есть $\mathbf{Im} \chi(\mathbf{Q}, \omega)$. Они находятся в хорошем согласии с экспериментом [11], в том числе воспроизводятся наиболее заметные черты экспериментальных Q -пигов: положение максимума почти не зависит от температуры, ширина пиков порядка щели (то есть "плохие" квазичастицы).

Спектр $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}$ для $T = 0.05$ представлен на Рис.8. Важной чертой спектра является наличие седловых точек около $\mathbf{q} = (\pi; \pi/2); (\pi/2; \pi)$, кроме того, спектр слабо меняется вдоль направления $\mathbf{X} - \mathbf{Q}$. Поэто-

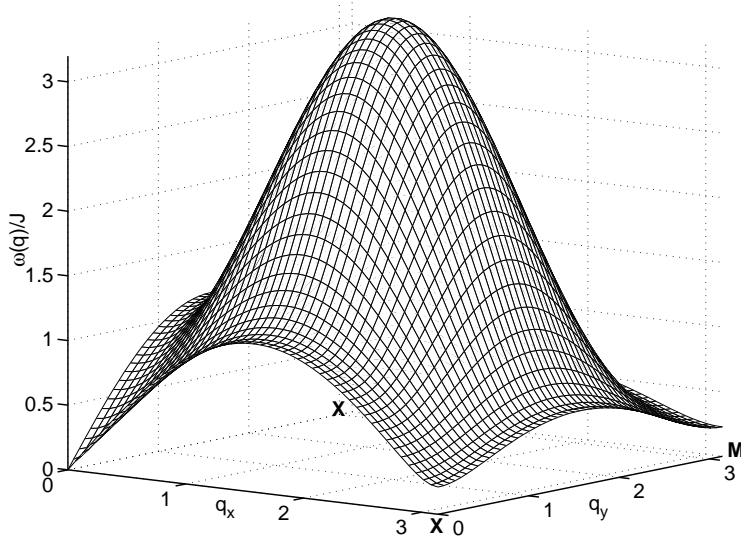


Рис. 8: Спектр спиновых возбуждений $\tilde{\omega}(\mathbf{q})$ для случая большой фрустрации $p = 0.28$ с учетом перенормировок ($\gamma = 0.42$, $\lambda = 10.1^{1/3}$). Температура $T/J = 0.05$.

му максимум $\chi_{2D}(\omega)$ формируется на частотах $\sim \Delta_{\mathbf{Q}} \sim \Delta_{\mathbf{X}}$ (точнее при $\omega \gtrsim 2 \div 3 \Delta_{\mathbf{Q}}$). Это видно на вставке к Рис.7, где изображены $\chi_{2D}(\omega)$ (сплошная кривая) и $\chi_{2D}(\omega)(2n_{Bose} + 1)$ (штрих-пунктир) для $T = 0.05$ (здесь использовано $J_1 = (1 - p)J = 140 \text{ meV}$). Такое поведение $\chi_{2D}(\omega)$ близко к результатам эксперимента для купратов [19]: максимум $\chi_{2D}(\omega)$ при $\omega \approx 60 \text{ meV}$, падение приблизительно вдвое на $\omega \approx 200 \text{ meV}$.

Таким образом, картина эволюции спинового спектра двумерной фрустрированной модели Гейзенберга от неелевской фазы в сторону страйп-фазы позволяет воспроизвести все основные экспериментальные черты спиновой восприимчивости в купратах в диапазоне от диэлектрического до оптимально допированного режима. Существенно, что не используется никакой модельный спектр спиновых возбуждений – спектр и $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ есть результат самосогласованных вычислений.

Четвертая глава, носящая более модельный характер, посвящена рассмотрению нескольких хорошо известных низкоразмерных сильно коррелированных моделей. В каждом случае со стороны предела сильной корреляции рассматривается конкуренция основных состояний различной структуры, в первую очередь стандартного антиферромагнитного и беспорядочного с АФМ корреляциями.

В первом параграфе главы рассматривается простейшая сильнокоррелированная модель – модель Хаббарда (1) с одним электроном на

узел в 1D случае (для которой известно точное решение). Разлит метод – гибрид ренормгруппы в прямом пространстве и вариационного подхода – нахождения энергии основного состояния. В пределе сильной корреляции по сравнению с теорией возмущений и стандартными вариационными подходами метод существенно понижает энергию. Во всем интервале параметров отклонение от точного решения не превышает 7%. Метод допускает обобщение на более высокую размерность.

На первом этапе задача рассматривается для блока $K^{(0)}$ из d узлов. В пространстве функций с числом электронов, равным числу узлов, строится состояние $|l^{(0)}\rangle$ со средним значением энергии $\varepsilon^{(0)}$, близким к энергии основного состояния блока. На следующем этапе два блока $K^{(0)}$ объединяются в блок $K^{(1)}$ из 2^1d узлов. Для каждого из блоков $K^{(0)}$ строятся состояния с $d+1$ и $d-1$ электронами $|\bar{l}^{(0)}\rangle$, $|\underline{l}^{(0)}\rangle$, которые получаются из $|l^{(0)}\rangle$ в результате действия межблочного перескока $t_{\alpha\beta}^{(1)}$. Для удвоенного блока $K^{(1)}$ выбирается пробная вариационная функция $|l^{(1)}\rangle$, образованная из $|l^{(0)}\rangle$, $|\bar{l}^{(0)}\rangle$, $|\underline{l}^{(0)}\rangle$ с фиксированным числом электронов – один электрон на узел. Варьируя параметры функции $|l^{(1)}\rangle$, минимизируем среднее значение энергии $\varepsilon^{(1)}$. Затем объединяем два блока $K^{(1)}$ в блок $K^{(2)}$ из 2^2d узлов и проделываем аналогичную процедуру. И так далее.

Корректное построение $|l^{(0)}\rangle$ хорошо учитывает ближний порядок, то есть предел $t \ll U$. Но, поскольку возникающие на r -том шаге возбужденные состояния учитываются и на последующих шагах, неплохо описывается и предел свободных электронов $t \gg U$. Все матричные элементы вычисляются только на первом шаге, итерационное выражение имеет простой аналитический вид и дает хорошую сходимость для ε_0 . Одномерность системы непринципиальна для этой схемы. Энергия основного состояния вычисляется во всем диапазоне параметра t/U .

Метод реализован в двух вариантах: для стартового блока из двух узлов (блочная задача решается точно) и из четырех узлов (точное решение затруднено, строится приближенное нефакторизуемое состояние, остающееся вариационным). В первом случае для энергии основного состояния в пределах $t \ll U$ и $t \gg U$ получается соответственно, $\varepsilon \approx -2.50t^2/U$ и $\varepsilon \approx -1.15t$. Точное решение [3] приводит к $\varepsilon \approx -2.77t^2/U$ и $\varepsilon \approx -1.27t$. Существенно, что в наиболее интересном случае $t \ll U$ теория возмущений по t/U и множество эквивалентных ей в этом пределе методов (например, ренормгруппа в прямом

пространстве, вариационные методы в k -пространстве и прямом пространстве), дают гораздо худшее значение $\varepsilon_0 \approx -2t^2/U$.

В случае большего стартового блока развитый метод дает, соответственно, $\varepsilon \approx -2.57t^2/U$ и $\varepsilon \approx -1.183t$, то есть еще приближается к точному решению. Построенные состояния, как и во второй главе, не являются двухподрешеточными, все узлы эквивалентны, средний спин на узле равен нулю, однако в системе сохраняются АФМ корреляции.

Во втором параграфе похожее построение проделано для одномерной невырожденной регулярной модели Андерсона [20, 21] (с учетом внутриузельного $s - f$ обмена). Для блочной задачи вычисления абсолютно аналогичны предыдущему случаю (только более громоздкие). Однако на следующем этапе используется альтернативный подход – пробная вариационная функция вида

$$|\Psi\rangle = \hat{P}_N \prod_m \hat{A}_m |0\rangle; \quad \hat{A}_m = 1 + \hat{Z}_m^{(2)} + \sum_{i,j} \sum_{m\pm 1} \delta_{ij}^{mn} Z_{mi}^{(1)} Z_{nj}^{(3)} \quad (33)$$

$$\hat{Z}_m^{(2)} |0\rangle = |2_m\rangle; \quad Z_{mi}^{(1)} |0\rangle = |1_{mi}\rangle; \quad Z_{nj}^{(3)} |0\rangle = |3_{mj}\rangle$$

здесь m, n нумеруют блоки, $|0\rangle$ – вакуум, δ_{ij}^{mn} – вариационные параметры, \hat{P}_N – проекционный оператор на подпространство с числом электронов, равным числу узлов N . Эта функция учитывает для каждого двухузельного блока: основное состояние $|2_m\rangle$ с двумя электронами и все состояния $|1_{mi}\rangle$ с одним и $|3_{mj}\rangle$ с тремя электронами. Вариационная энергия вычисляется с помощью развитой автором графической процедуры. Эта процедура существенно использует одномерность, но позволяет произвести в числителе и знаменателе вариационного выражения точное сокращение макроскопических величин.

В результате получается следующее выражение для энергии

$$\varepsilon = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \quad (34)$$

$$= \frac{\varepsilon^{(2)} + 2x \sum_{ij} (\varepsilon_i^{(1)} + \varepsilon_j^{(3)}) \delta_{ij}^2 - 4tx \sum_{ij} \delta_{ij} \langle 2 | \hat{c}_{\beta\uparrow}^+ | 1_i \rangle \langle 2 | \hat{c}_{\alpha\downarrow} | 3_j \rangle}{1 + 4x \sum_{ij} \delta_{ij}^2}$$

где x удовлетворяет уравнению $1 = x + 2x^2 \sum_{ij} \delta_{ij}^2$; $\delta_{ij} = \delta_{ij}^{m, m+1}$; $\varepsilon^{(2)}$, $\varepsilon_i^{(1)}$, $\varepsilon_j^{(3)}$ – энергии состояний $|2\rangle$, $|1_i\rangle$, $|3_j\rangle$. Состояния, как и в других разделах главы, строятся путем диагонализации гамильтониана блока

Функция $|\Psi\rangle$ и энергия основного состояния ε (а, следовательно, и состояния $|2\rangle$, $|1_i\rangle$, $|3_j\rangle$) находились для ФМ и АФМ упорядочений (локализованных f -электронов). В ФМ случае число состояний $|1_i\rangle$ – 4, $|3_j\rangle$ – тоже 4, в АФМ случае их число, соответственно, 8 и 18.

В приближении $(g/\Delta)^4$ полное выражение (34) можно аналитически проварьировать по δ_{ij} и сравнить энергии ε_F ε_A для ФМ и АФМ порядка. Результат: при $J < J_0 \approx \frac{4g^2\Delta}{\Delta^2-t^2}$ основное состояние системы антиферромагнитно с $\Delta\varepsilon = \varepsilon_A - \varepsilon_F \approx \frac{2g^2t^2}{(\Delta^2-t^2)^2}(J - J_0)$, при $J > J_0$ – ферромагнитно. Анализ волновой функции (33) показывает:

i. в ФМ фазе среднее число f -электронов на узле в порядке $(g/\Delta)^4$ меньше, чем в АФМ, то есть переход ФМ→АФМ должен происходить с увеличением объема

ii. в АФМ состоянии квадрат полного момента на узле меньше $3/4$, а в ФМ – больше $3/4$.

iii. для построенного АФМ состояния характерно равенство нулю среднего значения проекции полного спина на узле при ненулевых АФМ спиновом корреляторе $\langle \hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_j^\downarrow \rangle - \langle \hat{n}_i^\uparrow \rangle \langle \hat{n}_j^\downarrow \rangle$ и зарядовом корреляторе $\langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle - \langle \hat{n}_i \rangle \langle \hat{n}_j \rangle$.

Пробная функция (33) дает правильное значение диэлектрической щели, равное $\Delta - 2t$.

Следующая модель, рассмотренная в *третьем параграфе* главы – $S = 1/2$ гейзенберговский антиферромагнетик на 2D треугольной решетке (с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей)

$$\hat{H} = J_1 \sum_{NN} \vec{\mathbf{S}}_i \vec{\mathbf{S}}_j + J_2 \sum_{NNN} \vec{\mathbf{S}}_i \vec{\mathbf{S}}_j \quad (35)$$

здесь J_1 и J_2 – (антиферромагнитные) обменные константы $J_2 = \alpha J_1$.

Модель интересна не только из-за нередко встречающихся на эксперименте треугольных структур, но и потому, что это минимально возможная реализация геометрической фрустрации – в треугольной решетке неелевское состояние невозможно в принципе. Хотя треугольная решетка – "родина" RVB (имено для нее в пионерской работе [22] было предположено существование беспорядочного антиферромагнетика) в последние годы появляется все больше аргументов в пользу того, что классическая трехподрешеточная 120° -структура сохраняется и в квантовом случае (см., например, обзор [23]). К аналогичному выводу приводит и развиваемый в настоящей работе блочный метод.

Как и в предыдущих параграфах, сначала строятся точные собственные состояния для треугольника. Всего их восемь: два вырожденных дублета с полным спином блока $I = 1/2$ и энергией $\varepsilon = -3/4$ и кваттет с $I = 3/2$, $\varepsilon = 3/4$. Процедура построения вариационного состояния всей системы проста – классическая 120° -структура записывается в полученном полном базисе состояний блока, далее коэффициенты в линейных комбинациях отпускаются, становясь вариационными параметрами. Аналогичное построение проделано и для страйп-фазы, которая в классическом пределе реализуется при $\alpha > 0.125$.

Полученное состояние не несет черты RVB – узлы не эквивалентны, и хотя состояние не является собственным для оператора узельного спина, средние спины узлов образуют 120° картинку (длина узельных спинов $S = \sqrt{\langle S_i \rangle^2} \cong 0.48$). Энергия такого состояния значительно ниже энергии полуклассической 120° -структуры. То же можно сказать и для страйп-фазы, которая реализуется при достаточно большом параметре α . Точка перехода в страйп-фазу также заметно сдвигается – с $\alpha = 0.125$ до $\alpha \simeq 0.1$. Рассмотрение спиновых возбуждений показывает, что спиновые флуктуации не разрушают состояние в точке перехода, то есть переход – первого рода.

Следующий параграф четвертой главы посвящен модели с двумя спиновыми степенями свободы на каждом узле, с гамильтонианом

$$\hat{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j + I \sum_{\langle ij \rangle} \tau_i \tau_j + K \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j) (\tau_i \tau_j) \quad (36)$$

\mathbf{s} , и τ – операторы со спиновыми коммутационными соотношениями.

Модель представляет собой обобщение модели изинговского типа Ашкина-Теллера (Ashkin-Teller) на изотропный случай. Такой же гамильтониан возникает в рассмотренном выше блочном методе, когда нижние энергетические уровни блока образуют два дублета, встречается он и в других задачах. Модель интересна тем, что фрустрация здесь имеет не геометрическое происхождение и возникает не благодаря взаимодействию дальних соседей – ее источником служит взаимодействие между подсистемами.

Сначала строится классическая и простейшая среднеполевая (когда член взаимодействия распадается на произведение средних по подпространствам) фазовые диаграммы. Далее задача для АФМ части фазовой диаграммы решается в сферически-симметричном подходе,

подробно изложенном в третьей главе. То есть в обоих подпространствах предполагается равенство нулю среднего спина на узле и сферическая симметричность спин-спиновых корреляторов (а дальний порядок определяется по поведению этих корреляторов на бесконечности). Существенно, что спиновый констрейнт при этом учитывается точно. Задача сводится к системе восьми самосогласованных уравнений с восемью неизвестными, которая решается численно.

Полученная фазовая диаграмма сильно отличается от классической и стандартной среднеполевой. Между областями с дальним магнитным порядком возникает полоса, в которой дальний порядок в обеих подсистемах отсутствует, то есть область возможного существования спиновой жидкости. Возможна и ситуация, когда в одной из подсистем дальний порядок разрушен, а в другой сохраняется.

И, наконец, в *последнем, пятом параграфе* главы рассматривается задача, прямого отношения к сильно коррелированным системам не имеющая – вигнеровский кристалл с дефектами. Аналогия, однако, существует, так как и здесь учет уже в простейшем приближении взаимодействия "возбуждений" (в данном случае дефектов) с "фоном" (идеальной частью решетки) может приводить к существенным физическим выводам. Для вигнеровского кристалла это касается качественного изменения возможной картины фазового перехода.

Причиной неустойчивости вигнеровского кристалла в области малых плотностей $r_0 \sim 10$ (r_0 – радиус круга, приходящегося на один электрон), считается образование точечных дефектов: вакансий или дефектов внедрения. В работе на основе известных данных об энергии идеального вигнеровского кристалла и энергии одиночного дефекта вычисляется энергия кристалла с конечной концентрацией дефектов. Оказывается, что при малой концентрации дефектов ведущим является косвенное взаимодействие между ними через сжатие (растяжение) решетки. Полученная зависимость энергии от концентрации дефектов может приводить к переходу первого рода в состояние с сразу конечной концентрацией дефектов (причем в области плотностей, где одиночный дефект энергетически невыгоден).

В конце параграфа обсуждается возможность реализации физически чрезвычайно интересного однородного проводящего состояния с делокализованными точечными дефектами.

В пятой главе рассматриваются некоторые особенности кине-

тических коэффициентов в квазидвумерных системах с характерным для плоскости CuO_2 спектром зарядовых возбуждений. Глава посвящена обоснованию двух утверждений.

1. В системах с характерным для многих моделей ВТСП спектром в виде квазиодномерного желоба

$$\varepsilon = t[\cos(p_x a) + \cos(p_y a)]^2, \quad t > 0 \quad (37)$$

затягивание линейного хода сопротивления вниз по температуре в значительной мере может объясняться просто геометрией поверхности Ферми. Наличие в системе малого управляющего импульса (в данном случае это импульсная ширина желоба) приводит к тому, что в стандартном законе Блоха-Грюнайзена переключение с высокотемпературного (линейного) на низкотемпературный закон сопротивления происходит не при дебаевской, а при гораздо меньшей температуре.

2. Сильная анизотропия процессов рассеяния приводит к необходимости решать кинетическое уравнение не в τ -приближении, а как минимум в следующем – двухмоментном приближении. А тогда без каких-либо дополнительных предположений возникает температурная зависимость коэффициента Холла (при постоянном числе носителей).

В работе кинетическое уравнение для носителей со спектром (37) последовательно решается в τ -приближении (одномоментном) и двухмоментном приближении с учетом рассеяния на акустических бозонах: трехмерных (фононах) либо квазидвумерных (что характерно для магнонов в ВТСП-купратах). Продемонстрировано затягивание линейного хода сопротивления до $T \sim 10K$ и появление температурной зависимости у коэффициента Холла.

Попутно стандартное выражение для константы Холла в металлах (в τ -приближении) представлено в виде, имеющем ясный геометрический смысл – константа Холла пропорциональна взвешенному среднему от суммы главных кривизн поверхности Ферми.

Конкретнее, оказывается, что в двумерном случае антисимметричную часть тензора проводимости можно представить в виде

$$\sigma_{yxz}^{(-)} = -\frac{\tau^2 e^3}{2c} \langle v_{\parallel}^3 k_z \rangle, \quad v_{\parallel}^2 = v_x^2 + v_y^2 \quad (38)$$

где k_z – кривизна поверхности (в данном случае линии) Ферми. Символ среднего здесь означает интегрирование по поверхности Ферми.

Для кубического кристалла можно написать еще более симметрично

$$\sigma_{yxz}^{(-)} = -\frac{\tau^2 e^3}{6c} \langle v^3 k_z \rangle \quad (39)$$

где $k_z = 2H$ есть сумма главных кривизн трехмерной поверхности. Коэффициент Холла просто связан с $\sigma_{yxz}^{(-)}$, например, в 2D случае

$$R = \frac{\sigma_{yxz}^{(-)}}{\sigma_{\parallel}^2} = -\frac{2}{ec \langle v_{\parallel}^2 \rangle} \langle v_{\parallel}^3 k_z \rangle \quad (40)$$

Далее в работе рассмотрены несколько простых моделей, когда поведение коэффициента Холла качественно можно анализировать из представленных простых геометрических соображений.

В шестой главе для двумерной системы с сильной корреляцией между подсистемой носителей и подсистемой локализованных спинов рассматривается сверхпроводящее спаривание. Показано, что для появления спаривания недостаточно учета аномальных функций Грина только для голых дырок – оно возникает лишь при введении аномальной функции Грина для спин-поляронных операторов. Это означает, что механизмом спаривания в данной модели является сильное взаимодействие электронов с возбуждениями спиновой подсистемы.

Рассматривается гамильтониан решетки Кондо

$$H = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} t_{\mathbf{g}} a_{\mathbf{r}+\mathbf{g}, \sigma}^+ a_{\mathbf{r}, \sigma} + J \sum_{\mathbf{r}, \sigma_1, \sigma_2} a_{\mathbf{r}, \sigma_1}^+ S_{\mathbf{r}}^{\alpha} \hat{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2}^{\alpha} a_{\mathbf{r}, \sigma_2} + \frac{1}{2} I \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^{\alpha} S_{\mathbf{r}}^{\alpha} \quad (41)$$

узлы \mathbf{r} образуют 2D квадратную решетку, \mathbf{g} – радиус-векторы ближайших соседей. $a_{\mathbf{r}\sigma}^+$ – оператор рождения дырки. Здесь, кроме перескоккового движения носителей ($t_{\mathbf{g}} = -t$) и внутриузельного кондовского взаимодействия ($\hat{\sigma}^{\alpha}$ – матрицы Паули), учтено АФМ взаимодействие локализованных $S = 1/2$ спинов с ближайшими соседями.

Первые два уравнения бесконечной цепочки уравнений для дырочной функции Грина имеют вид

$$\omega \langle a_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1, \sigma}^+ \rangle = \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}_1} + \sum_{\mathbf{g}} t_{\mathbf{g}} \langle a_{\mathbf{r}+\mathbf{g}, \sigma} | a_{\mathbf{r}_1, \sigma}^+ \rangle + J \langle b_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1, \sigma}^+ \rangle \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \omega \langle b_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1, \sigma}^+ \rangle &= \sum_{\mathbf{g}, \sigma_1} t_{\mathbf{g}} \langle S_{\mathbf{r}}^{\alpha} \hat{\sigma}_{\sigma, \sigma_1}^{\alpha} a_{\mathbf{r}+\mathbf{g}, \sigma_1} | a_{\mathbf{r}_1, \sigma}^+ \rangle \\ &+ iI e_{\alpha\beta\gamma} \sum_{\mathbf{g}, \sigma_1} \hat{\sigma}_{\sigma, \sigma_1}^{\alpha} \langle S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^{\beta} S_{\mathbf{r}}^{\gamma} a_{\mathbf{r}, \sigma_1} | a_{\mathbf{r}_1, \sigma}^+ \rangle + J \frac{3}{4} \langle a_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1, \sigma}^+ \rangle \\ &- J \langle b_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1, \sigma}^+ \rangle + J \sigma \langle 2b_{\mathbf{r}, -\sigma}^+ \sum_{\sigma_1} (\sigma_1 a_{\mathbf{r}, \sigma_1} a_{\mathbf{r}, -\sigma_1}) | a_{\mathbf{r}_1, \sigma}^+ \rangle \end{aligned} \quad (43)$$

где $b_{\mathbf{r}\sigma} = S_{\mathbf{r}}^{\alpha} \hat{\sigma}_{\sigma, \sigma_1}^{\alpha} a_{\mathbf{r}, \sigma_1}$. В качестве основного состояния спиновой подсистемы принято (как и в Главе 2) сферически симметричное синглетное состояние. Последнее слагаемое в (43) пропорционально концентрации носителей x , которая является малым параметром задачи.

Сначала рассматривается несверхпроводящее состояние. Система уравнений (42), (43) для функций Грина $\langle a_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1, \sigma}^+ \rangle$, $\langle b_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1, \sigma}^+ \rangle$ незамкнута. Для замыкания используется проекционная техника Цванцига-Мори [24], то есть в правой части (43) первые два члена аппроксимируются их проекциями на выбранный операторный базис, а последним членом в пределе малого допирования можно пренебречь.

Простейший базис образуется двумя операторами, которые возникают в уравнении (42). Это оператор уничтожения "голого" электрона $a_{\mathbf{r}\sigma}$ и внутриузельный спиновый поляронный оператор $b_{\mathbf{r}\sigma}$. Этот выбор означает, что спиновый полярон будет строиться как когерентная суперпозиция оператора $a_{\mathbf{k}\sigma}$ голой дырки и оператора $b_{\mathbf{k}\sigma}$ дырки, связанной с локальным спином. Такой локальный полярон является аналогом синглета Занга-Райса в трехзонной модели Хаббарда.

Тогда система (42), (43) в \mathbf{k} -представлении приобретает вид:

$$(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})G_{\mathbf{k}}^1 = 1 + JG_{\mathbf{k}}^2, \quad (\omega - e_{\mathbf{k}})G_{\mathbf{k}}^2 = \frac{3}{4}JG_{\mathbf{k}}^1 \quad (44)$$

$$G_{\mathbf{k}}^1 = \langle a_{\mathbf{k}, \sigma} | a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \rangle; \quad G_{\mathbf{k}}^2 = \langle b_{\mathbf{k}, \sigma} | a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \rangle; \quad (45)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu; \quad e_{\mathbf{k}} = \left(\frac{4}{3}c_{\mathbf{g}}\varepsilon_{\mathbf{k}} - J - \frac{16}{3}Ic_{\mathbf{g}}\right) - \mu \quad (46)$$

где $c_{\mathbf{g}} = \langle \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{g}} \rangle$ – спин-спиновая корреляционная функция. Ее решение приводит к спектру возбуждений для нормального состояния:

$$\omega_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon_{\mathbf{k}} + e_{\mathbf{k}} \mp \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - e_{\mathbf{k}})^2 + \frac{3}{4}J^2} \right\} \quad (47)$$

Химпотенциал предполагается лежащим в нижней зоне ω_1

Для описания сверхпроводимости необходимо при проектировании расширить операторный базис, добавив операторы $a_{\mathbf{r}}^+$, $b_{\mathbf{r}}^+$. Единственный член, имеющий ненулевую проекцию на добавочное подпространство – последнее слагаемое в правой части (43). Его проекция на $a_{\mathbf{r}}^+$ равна нулю, а проекция на $b_{\mathbf{r}}^+$ имеет следующий вид:

$$\langle J\sigma 2b_{\mathbf{r}, -\sigma}^+ \sum_{\sigma_1} (\sigma_1 a_{\mathbf{r}, \sigma_1} a_{\mathbf{r}, -\sigma_1}) | a_{\mathbf{r}_1}^+ \rangle \approx J\eta^* \langle \sigma b_{\mathbf{r}, -\sigma}^+ | a_{\mathbf{r}_1}^+ \rangle \quad (48)$$

$$\eta^* = \left\langle \sum_{\sigma_1} (\sigma_1 a_{\mathbf{r},\sigma_1} a_{\mathbf{r},-\sigma_1}) \right\rangle \quad (49)$$

Тогда в правой части (43) возникает аномальная функция Грина $F^2 = \sigma \left\langle b_{-\mathbf{k},-\sigma}^+ | a_{\mathbf{k},\sigma}^+ \right\rangle$ и аномальное среднее η^* . В результате стандартных вычислений в рамках описанной проекционной техники получим замкнутую систему уравнений для сверхпроводящего случая:

$$\begin{aligned} (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}}^1 &= 1 + J G_{\mathbf{k}}^2 \\ (\omega - e_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{3}{4} J G_{\mathbf{k}}^1 + J \eta^* F_{\mathbf{k}}^2 \\ (\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}) F_{\mathbf{k}}^1 &= -J F_{\mathbf{k}}^2 \\ (\omega + e_{\mathbf{k}}) F_{\mathbf{k}}^2 &= -\frac{3}{4} J F_{\mathbf{k}}^1 + J \eta G_{\mathbf{k}}^2 \end{aligned} \quad (50)$$

$$F^1 = \sigma \left\langle a_{-\mathbf{k},-\sigma}^+ | a_{\mathbf{k},\sigma}^+ \right\rangle; \quad F^2 = \sigma \left\langle b_{-\mathbf{k},-\sigma}^+ | a_{\mathbf{k},\sigma}^+ \right\rangle \quad (51)$$

Отметим важнейшую роль, которую играет проектирование правой части на спин-поляронный оператор b^+ – именно возникающий в результате член (48) приводит к сверхпроводящему спариванию.

Решение системы (50) позволяет получить выражения для нормальных функций Грина, перенормированных спектра и вычетов $Z_{\mathbf{k}}$. Нам же интересует только аномальная функция Грина F^1 . Она имеет вид

$$F_{\mathbf{k}}^1 = -\left(\frac{3}{4}\right)^2 \eta J^3 D_{\mathbf{k}}^{-1} \quad (52)$$

$$D_{\mathbf{k}} \equiv [(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})(\omega - e_{\mathbf{k}}) - \frac{3}{4} J^2] * [(\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}})(\omega + e_{\mathbf{k}}) - \frac{3}{4} J^2] - |\eta|^2 (\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}})(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) J^2 \quad (53)$$

Спектр возбуждений определяется уравнением $D_{\mathbf{k}} = 0$. Его удобно записать в виде

$$(\omega^2 - \omega_1^2)(\omega^2 - \omega_2^2) - |\eta|^2 (\omega^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2) J^2 = 0 \quad (54)$$

где $\omega_1(\mathbf{k}), \omega_2(\mathbf{k})$ – решения уравнения (47), определяющего двухзонный спектр спинового полярона.

Предполагается, что уровень Ферми расположен в нижней поляронной зоне ω_1 . J – самый большой параметр задачи, $(\omega_2^2 - \omega_1^2) \sim J^2$. Ищем решение (54), близкое к уровню Ферми, поэтому можно положить $(\omega^2 - \omega_2^2) \approx (\omega_1^2 - \omega_2^2)$. Тогда $F_{\mathbf{k}}^1$ определяется выражением

$$F_{\mathbf{k}}^1 = \left(\frac{3}{4}\right)^2 \eta J^3 \alpha_{\mathbf{k}}^{-2} [\omega^2 - E_{\mathbf{k}}^2]^{-1} \quad (55)$$

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\omega_1^2 \alpha_{\mathbf{k}}^{-2} (\omega_2^2 - \omega_1^2) + \Delta_{\mathbf{k}}^2} \quad (56)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^2 = \alpha_{\mathbf{k}}^{-2} \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 J^2 |\eta|^2; \quad \alpha_{\mathbf{k}}^2 = (\omega_2^2 - \omega_1^2) + \frac{3}{4} |\eta|^2 J^2 \quad (57)$$

Выражая аномальное среднее η (49) через мнимую часть функции Грина $F_{\mathbf{k}}^1$ (55), получаем самосогласованное уравнение для η

$$\eta = \frac{v}{(2\pi)^2} \int d\omega d\mathbf{k} n(\omega) \frac{1}{\pi} \text{Im} F^1 \quad (58)$$

где v – площадь элементарной ячейки, $n(\omega) = (\exp(\omega/T) + 1)^{-1}$. Хотя в уравнении (58) фигурирует аномальная функция Грина только голых дырок, однако эта функция связана с поляронными функциями G_2, F_2 (см. (50)).

После интегрирования по ω уравнение для η приобретает вид

$$1 = 2 \left(\frac{3}{4}\right)^2 J^3 \frac{v}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} \alpha_{\mathbf{k}}^{-2} \frac{1 - 2n(E_{\mathbf{k}})}{2E_{\mathbf{k}}} \quad (59)$$

Далее проведена оценка для сверхпроводящей щели Δ при $T = 0$ в простейшем логарифмическом приближении, пренебрегая в (59) зависимостью $\Delta_{\mathbf{k}}$ от \mathbf{k} . Т.к. $\eta^2 \ll 1$, можно положить $\alpha_{\mathbf{k}}^{-2} (\omega_2^2 - \omega_1^2) \approx 1$ (см. (57)). Уравнение (59) имеет стандартный вид теории БКШ с эффективной константой связи $g \sim J^3 \alpha_{\mathbf{k}}^{-2} \sim J$, а не J^2 , как было бы в случае слабого кондовского взаимодействия. Пусть химпотенциал расположен около центра нижней зоны. Тогда легко убедиться, что $\omega_2 \sim J$. Энергетический параметр обрезания определяется либо шириной нижней зоны W_1 , либо характерной энергией спиновых возбуждений I . В данном случае обе величины порядка t . Тогда для Δ имеет место следующая оценка

$$\Delta = W_1 \exp\left(-\frac{\pi W_1 \omega_2^2}{2 \left(\frac{3}{4}\right)^2 J^3}\right) \sim t \exp(-t/J) \quad (60)$$

Типичное значение W_1 для ВТСП $0.3 \div 0.5 \text{ eV}$ дает для щели разумную оценку $\Delta \approx 100^\circ K$.

Более точная оценка для $\Delta_{\mathbf{k}}$ дается выражением (57), содержащим зависимость Δ от \mathbf{k} . Главная часть этой зависимости определяется множителем $\varepsilon_{\mathbf{k}}^2$. В рассмотренном случае $\varepsilon_{\mathbf{k}} > 0$ для любого \mathbf{k} , то есть у щели $\Delta_{\mathbf{k}}$ нет нулей на ферми-поверхности. Возможно, это связано с

использованием простейшего вида спин-поляронного оператора – локального полярона. При рассмотрении спинового полярона важную роль играет расширение базиса – включение операторов, описывающих "одевание" локального полярона спиновыми флуктуациями. Это существенно понижает спин-поляронную зону и может привести к более сложной зависимости Δ от \mathbf{k} , в том числе и появлению нулей Δ на поверхности Ферми.

В последней, седьмой главе математический аппарат, развитый в предыдущих разделах, переносится на теорию классической жидкости. Предложена простейшая модель двумерной жидкости, основанная на фрустрированной модели Гейзенберга. Модель позволяет качественно описать поведение парной корреляционной функции в зависимости от вида двухступенчатого потенциала $U(r)$. Продемонстрирована тенденция к образованию квазисвязанного состояния при появлении локального минимума на отталкивательной части потенциала. Для случая двухступенчатого потенциала показана возможность фазового перехода в жидкости при изменении температуры.

Важным вопросом в теории жидкости является отыскание парной корреляционной функции (ПКФ). Особый интерес оно представляет, когда отталкивательная часть потенциала имеет немонотонный характер (core-softened потенциал). Считается, что подобные вычисления даже в 1D и 2D случаях вносят существенное понимание для теории фазовых переходов, например, в воде под давлением.

В работе впервые предлагается простейшая решеточная модель двумерной жидкости, основанная на антиферромагнитной 2D фрустрированной модели Гейзенберга, которая позволяет качественно описать поведение ПКФ в зависимости от вида двухступенчатого потенциала $U(r)$. Модель является развитием хорошо известной модели решеточного газа [25], эквивалентной модели Изинга и точно решаемой только для одноступенчатого потенциала. В отличие от модели Изинга, предлагаемый подход не является статическим и, кроме того, применим в случае сложных потенциалов. Модель исходит из предела, противоположного обычно рассматриваемому пределу твердых шаров – из предела однородной плотности.

Рассматривается двумерная жидкость со средним значением плотности ρ_0 . В каждой точке i оператор плотности представляется в виде $\hat{\rho} = \rho_0 + \Delta\hat{\rho}$; $\Delta\hat{\rho} = \gamma\hat{S}_i^z$, где \hat{S}_i^z есть оператор проекции спина 1/2.

Таким образом, принято простейшее приближение для флуктуаций плотности. Необходимо вычислить корреляционную функцию плотность-плотность $\langle \Delta \hat{\rho}_i \Delta \hat{\rho}_j \rangle$. Введенный выше коэффициент γ в рамках предлагаемого подхода найден быть не может, то есть $\langle \Delta \hat{\rho}_i \Delta \hat{\rho}_j \rangle$ будет определяться с точностью до пропорциональности.

Решеточность модели состоит в том, что точки i рассматриваются на квадратной решетке. Узлы i этой квадратной решетки определяют "пробные" точки плоскости, и постоянная решетки l должна быть выбрана так, чтобы достаточно детально описывать существенную область изменения потенциала (то есть первый и второй соседи для этой решетки должны попадать на первую и вторую степень потенциала).

Если теперь разрешить движение флуктуаций плотности по системе, то можно ввести гамильтониан

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{2} J_1 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{g}} \left\{ S_{\mathbf{i}}^z S_{\mathbf{i}+\mathbf{g}}^z + \frac{1}{2} \left(S_{\mathbf{i}}^+ S_{\mathbf{i}+\mathbf{g}}^- + S_{\mathbf{i}}^- S_{\mathbf{i}+\mathbf{g}}^+ \right) \right\} + \\ & + \frac{1}{2} J_2 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{d}} \left\{ S_{\mathbf{i}}^z S_{\mathbf{i}+\mathbf{d}}^z + \frac{1}{2} \left(S_{\mathbf{i}}^+ S_{\mathbf{i}+\mathbf{d}}^- + S_{\mathbf{i}}^- S_{\mathbf{i}+\mathbf{d}}^+ \right) \right\} = \end{aligned} \quad (61)$$

Здесь продольные члены отвечают взаимодействию флуктуаций: J_1 - на первых, J_2 - на вторых ближайших соседях пробной решетки (\mathbf{g}, \mathbf{d} - векторы первых и вторых соседей). В соответствии с видом двухступенчатого потенциала, взаимодействие на всех более дальних соседях считается равным нулю.

Для характеристики высоты ступеней потенциала J_1 и J_2 используется принятая в предыдущих главах переменная p ("параметр фрустрации") $p = J_2/J$, $J_1 = (1-p)J$, $J_2 = pJ$, $J = J_1 + J_2$.

Поперечные члены гамильтониана описывают движение флуктуаций. Далее рассмотрен лишь случай, когда коэффициенты перед продольными и соответствующими поперечными членами одинаковы. Внутриузельное отталкивание флуктуаций оказывается бесконечным благодаря констрейнту в пространстве спиновых волновых функций.

Таким образом, задача вычисления флуктуационной части ПКФ сводится к вычислению спиновых корреляционных функций $c_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} = c_{\mathbf{i}-\mathbf{j}} = \langle S_{\mathbf{i}}^z S_{\mathbf{j}}^z \rangle$. Существенно, что для описания жидкости спиновую задачу следует рассматривать в подходе, когда на каждом узле средние значения и продольной, и поперечных компонент спина равны нулю,

то есть в подходе спиновой жидкости. Отметим, что узлы пробной решетки не имеют отношения к наиболее вероятным положениям частиц жидкости. Эти положения определяются после вычисления радиальной функции распределения и соответствуют ее максимумам.

Процедура вычисления спиновых корреляционных функций c_{ij} абсолютно аналогична той, что была описана в Главе 2 (в простейшем приближении, без учета перенормировок). В результате находятся спиновые корреляторы $c_{\mathbf{r}}$ для любого \mathbf{r} , то есть – с точностью до интегрирования по углам – радиальная функция распределения $h(r)$ (а это основная характеристика в теории классической жидкости).

Далее численно продемонстрированы следующие случаи.

1. Переход от двухступенчатого потенциала чистого отталкивания ($J_1 > J_2 > 0, p = 0.3$) к потенциалу с локальным минимумом на "внутренней" ступеньке ($J_1 < 0, J_2 > 0, p = 1.5$). Предложенный подход в этом случае приводит к изменению корреляторов $c(\mathbf{r})$, которое соответствует раздвоению первого максимума $h(r)$, что описывает тенденцию к образованию квазисвязанного состояния двух частиц. Отметим, что такое раздвоение возникает при решении задачи (в 2D случае) методами молекулярной динамики [26, 27].

2. Переход от того же потенциала чистого отталкивания ($J_1 > J_2 > 0, p = 0.3$) к потенциалу с меньшей высотой внешней ступеньки ($J_1 > J_2 > 0, p = 0.1$) – максимум функции $h(r)$ существенно сдвигается влево, а ее осцилляции принимают более выраженный характер. Это означает проникновение частиц в мягкую кору core-softened двухступенчатого потенциала.

3. Влияние температуры на поведение $c(\mathbf{r})$ при фиксированном потенциале. На Рис.9, приведен вид корреляторов при нескольких температурах для случая $p = 0.6$ (соответствующий потенциал приведен на вставке). С ростом температуры от $T = 0.25$ до $T = 0.75$ c_2 по модулю падает, а c_1 по модулю растет. Это отвечает увеличению заселенности второй ступеньки. В интервале $T \simeq 0.75 \div 1.0$ самосогласованного решения не существует. Однако $T \gtrsim 1.0$ решение восстанавливается, но носит качественно отличный от предыдущего характер. Резко меняются c_1 и c_2 , то есть происходит скачкообразное изменение относительных заселенностей первой и второй ступеней, указывающее на фазовый переход жидкость–жидкость. Вопрос о виде перехода – первый или второй род – в данном приближении решен быть не может и

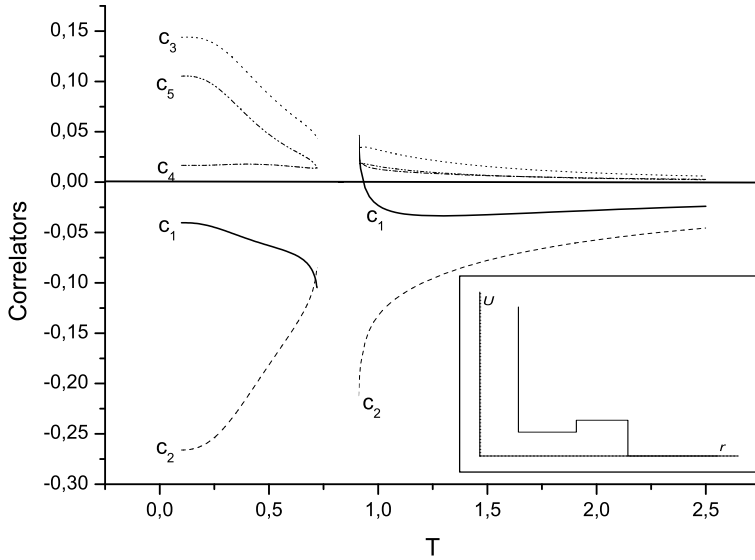


Рис. 9: Зависимость от температуры первых пяти спиновых корреляторов для $p = 0.6$ ($J_1 = 0.4$, $J_2 = 0.6$). При $T \simeq 0.75 \div 1.0$ самосогласованное решение отсутствует. На вставке приведен вид потенциала.

требует выхода за рамки самосогласованного поля.

В предложенном подходе невозможно проанализировать влияние изменения давления и плотности на поведение $c(\mathbf{r})$. Отметим, однако, что вычисления методами молекулярной динамики в 2D случае [26] указывают на то, что увеличение температуры качественно эквивалентно росту давления. В конце главы обсуждаются возможные пути дальнейшего развития метода.

В заключении сформулированы основные результаты работы:

1. Для нескольких широко распространенных моделей низкоразмерных сильно коррелированных систем – одномерной модели Хаббарда, 1D регулярной модели Андерсона, 2D треугольной фрустрированной решетки Гейзенберга, 2D обобщенной модели Ашкина-Теллера – развит метод построения основного состояния. Показано, что во многих случаях конкурентным по энергии с неелевским состоянием является синглетное беспорядочное состояние, в котором, однако, сохраняются антиферромагнитные корреляции.

2. Для двух важных сильно коррелированных моделей – двумерной модели Хаббарда и двумерной решетки Кондо – продемонстрирована возможность корреляционного спаривания зарядовых носителей, показана важность учета сложной структуры этих носителей.

3. Развита самосогласованная теория двумерной фрустрированной $S = 1/2$ модели Гейзенберга с учетом действительных и мнимых пе-

ренормировок функций Грина спиновых флуктуаций. Восстановлена величина затухания спиновых возбуждений и его температурная зависимость для недодопированных купратов в рамках развитой теории и на основе анализа нейтронного эксперимента.

4. Построен аналитический вид скейлинговой функции для спиновой восприимчивости, которая описывает экспериментальный скейлинг в недодопированных купратах.

5. Теоретически описано возникновение седловой точки вблизи $(\pi/2, \pi/2)$ в спиновом спектре лантановых купратов в диэлектрическом пределе. В рамках страйп-сценария продемонстрирована эволюция спинового спектра купратов с ростом допирования: сдвиг пика плотности состояний в область низких частот $\omega \sim 50 \text{ meV}$; возникновение седловой особенности в спектре вблизи $(\pi/2, 0)$; сильное смягчение спектра вблизи $(\pi, 0)$.

6. Проведен анализ неустойчивости двумерного вигнеровского кристалла по отношению к образованию конечного числа точечных дефектов. Показано, что косвенное взаимодействие дефектов через поджатие решетки может приводить к изменению картины перехода.

7. Для модели 2D допированного антиферромагнетика с квазиодномерным спектром зарядовых носителей (дно зоны вблизи границы АФМ зоны Бриллюэна) показано, что линейный ход сопротивления из-за квазинестинга в спектре носителей может быть существенно затянут, а коэффициент Холла может иметь сильную температурную зависимость из-за анизотропии рассеяния. Учет такого рассеяния (как на магнонах, так и на фононах) произведен в рамках многомоментного метода решения кинетического уравнения.

8. На основе развитого в работе математического аппарата предложен основанный на модели Гейзенберга решеточный спин-жидкостной подход к рассмотрению классической жидкости, который позволяет описать поведение полной корреляционной функции при изменении температуры и вида потенциала. Для модели двухступенчатого потенциала продемонстрирована возможность фазового перехода в жидкости с изменением ближнего порядка.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, Вариационный узельный метод для одномерной цепочки атомов водорода, ФТТ **27**, 2658-2664 (1985).
2. А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, Вариационный метод для ос-

новного состояния 1D модели Хаббарда, ФТТ **28**, 998-1004 (1986).

3. А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, Об основном состоянии магнитного полупроводника в рамках одномерной решетки Андерсона, ФТТ **30**, 1248-1252 (1988).

4. А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, К теории основного состояния и элементарных возбуждений в двумерной модели Хаббарда, ФТТ **30**, 2518-2520 (1988).

5. A.F. Barabanov, L.A. Maksimov, A.V. Mikheyenkov, On the bound state of holes for the square-lattice Hubbard model with resonating valence bonds, J. Phys.: Cond. Matt. **1**, 10143-10151 (1989).

6. А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, О связи эффекта Холла с кривизной поверхности Ферми. Применение к модели ВТСП с квадратированным нестингом, СФХТ **4**, 3-10, (1991).

7. A.F. Barabanov, A.V. Mikheenko, On the spin-wave spectrum of $s=1/2$ triangular lattice Heisenberg antiferromagnet, Письма в ЖЭТФ **56**, 470-473, (1992).

8. A.F. Barabanov, A.V. Mikheenko, On the ground state and phase transition for $s=1/2$ triangular lattice Heisenberg antiferromagnet with NN and NNN interactions, Z. Phys B **93**, 349 (1994).

9. A.F. Barabanov, L.A. Maksimov, A.V. Mikheyenkov, On the Wigner crystal state with point defects, Phys. Lett. **A201**, 81-84 (1995).

10. A.V. Mikheyenkov, A.F. Barabanov, Long-range order disappearance in 2D antiferromagnetic system with quantum complex spin, Physica **B262**, 267-272 (1999).

11. A.F. Barabanov, L.A. Maksimov, and A.V. Mikheyenkov, Theory of the Spin-Polaron for 2D Antiferromagnets, in *Lectures on the Physics of Highly Correlated Electron Systems IV*, Ed. F. Mancini, AIP CP, vol. **527**, p.1-117, (2000).

12. А.Ф. Барабанов, Л.А. Максимов, А.В. Михеенков, О сверхпроводимости в подходе спинового полярона, Письма в ЖЭТФ **74**, 362-365 (2001).

13. А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, А.М. Белемук, Спиновый полярон в двумерном антиферромагнетике – от локального синглета к сложной квазичастице, Письма в ЖЭТФ **75**, 118-130 (2002).

14. A.F. Barabanov, L.A. Maksimov, A.V. Mikheenko, Spin Polaron in the Cuprate Superconductor: Interpretation of the ARPES Results, in: *Spectroscopy of High- T_c Superconductors. A theoretical View*, ed. N.M.

Plakida (Taylor&Francis), p.1-96 (2006).

15. А.В. Михеенков, А.Ф. Барабанов, Л.А. Максимов, Спин-жидкостной подход в теории классической жидкости, Письма в ЖЭТФ **80**, 766-770 (2004).

16. A.V. Mikheyenkov, A.F. Barabanov, N.A. Kozlov, Self-consistent spin susceptibility in 2D frustrated antiferromagnet, Phys. Lett. **A354**, 320-324 (2006).

17. A.F. Barabanov, A.V. Mikheenko, A.M. Belemuk, Renormalized spin susceptibility in layered frustrated antiferromagnet related to cuprates, Phys. Lett. **A365**, 469-472 (2007).

18. А.В. Михеенков, А.Ф. Барабанов, Спиновая восприимчивость купратов в рамках модели двумерного фрустрированного антиферромагнетика. Роль перенормировок спиновых флуктуаций для описания нейтронных экспериментов, ЖЭТФ **132**, 392-405 (2007).

Список литературы

- [1] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).
- [2] P.W. Anderson, 1987, Science, **235**, 1196.
- [3] E.H. Lieb, F.Y. Wu, 1966, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445.
- [4] Y. Nagaoka, 1966, Phys. Rev. **147**, 392.
- [5] S.M. Hayden, G. Aeppli, *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1344 (1996); Phys. Rev. **B54**, R6905 (1996).
- [6] M.A. Kastner, R.J. Birgeneau, *et. al.*, Rev. Mod. Phys **70**, 897 (1998).
- [7] B. Keimer, R.J. Birgeneau, *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **67**, 1930 (1991); Phys. Rev. **B46**, 14034 (1992).
- [8] K. Kakurai, S. Shamoto, *et. al.*, Phys. Rev. **B48** 3485 (1993).
- [9] H. Hiraka, Y. Endoh, *et. al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **70** 8553 (2001).
- [10] C. Stock, W.J.L. Buyers, *et. al.*, Phys. Rev. B **69**, 014502 (2004).

- [11] H.F. Fong, P. Bourges, Y. Sidis *et. al.*, Phys. Rev. B **61**, 14773 (2000).
- [12] M. Inui, S. Doniach, and M. Gabay, Phys. Rev. **B38**, 6631 (1988).
- [13] E. Manousakis, Rev. Mod. Phys. **63**, 1 (1991).
- [14] Ю.А. Церковников, ТМФ **7**, 250 (1971); *ibid.* **49**, 219 (1981).
- [15] N.N. Plakida, Phys. Lett. **A43**, 481 (1973).
- [16] A.F. Barabanov, L.A. Maksimov, Phys. Lett. **A207**, 390 (1995).
- [17] R. Coldea, S.M. Hayden, *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5377 (2001).
- [18] J.F. Annet, R.M. Martin, *et. al.*, Phys. Rev. **B40**, 2620 (1989).
- [19] J.M. Tranquada, H. Woo, *et. al.*, Nature **429**, 534 (2004).
- [20] P.W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [21] D.A. Smith, J.Phys. **C1**, 1263 (1968).
- [22] P. Fazekas, P.W. Anderson, Phil. Mag. **30**, 423 (1974).
- [23] J. Richter, J.Schulenburg, A. Honecker, in *Quantum magnetism*, ed. by U. Schollwock, J. Richter, D.J.J. Farnell, R.F. Bishop, Springer, Berlin (2004).
- [24] H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
- [25] Р.Бэкстер *Точно решаемые модели в статистической механике* ("Мир", М., 1985).
- [26] M.R.Sadr-Lahijany, A.Scala, S.V.Buldyrev and H.E.Stanley, Phys. Rev. Lett. **81**, 4895 (1998).
- [27] S.V.Buldyrev *et al.*, in *New Kinds of Phase Transitions: Transformations in Disordered Substances*, Proc. of NATO Advanced Research Workshop, eds. V.V.Brazhkin, S.V.Buldyrev, V.N.Ryzhov and H.E.Stanley (Kluwer, Dordrecht, 2002), p.97.