

## ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Сильно коррелированные электроны:  $t$ – $J$ -модель

Ю.А. Изюмов

*Последовательно изложено современное состояние исследований  $t$ – $J$ -модели, являющейся рабочей моделью для высокотемпературных сверхпроводников медно-оксидной группы. Основное внимание уделяется области вблизи половинного заполнения зоны (малых концентраций дырок), актуальной для этих материалов. В единой схеме излагается теория магнитного полярона — носителя заряда, движущегося в антиферромагнитной матрице, и теория антиферромагнитного состояния системы. Исследуется также состояние спиновой жидкости, возникающее за пределами антиферромагнитной фазы. Описывается фазовая диаграмма модели на плоскости "параметры гамильтониана — концентрация дырок" и сравнивается с фазовой диаграммой для модели Хаббарда в пределе сильных корреляций. Рассматриваются некоторые расширения  $t$ – $J$ -модели, а именно,  $t$ – $t'$ – $J$ -модель и модель, учитывающая трехцентровые взаимодействия. В обзоре, главным образом, используются аналитические методы исследования проблемы сильно коррелированных электронных систем.*

PACS numbers: 71.27. + a, 74.90. + n, 75.10.Lp

## Содержание

1. Введение (465).
  - 1.1. Две фундаментальные модели в теории сильно коррелированных систем. 1.2.  $t$ – $J$ -модель — основная электронная модель для высокотемпературных сверхпроводников медно-оксидной группы. 1.3. Трудности теоретического исследования  $t$ – $J$ -модели.
2. Формулировка модели (468).
  - 2.1. Вывод гамильтониана  $t$ – $J$ -модели из гамильтониана модели Хаббарда. 2.2. Представление через вспомогательные частицы.
3. Дырка в антиферромагнитной матрице (471).
  - 3.1. Приближение возвратных путей. 3.2. Предел бесконечной размерности пространства.
4. Магнитный полярон (474).
  - 4.1. Эффективный гамильтониан для дырки, движущейся в антиферромагнитной матрице. 4.2. Функция Грина для дырок. 4.3. Результаты численных расчетов. 4.4. Неферми-жидкостное поведение дырок. 4.5. Ферроны. 4.6. Каноническая форма теории магнитного полярона. 4.7.  $t$ – $t'$ – $J$ -модель.
5. Спиновая динамика квантового антиферромагнетика (484).
  - 5.1. Спин-волновой спектр и затухание. 5.2. Антиферромагнетик при конечной температуре. 5.3. Температура Нееля.
6. Калибровочные поля для двумерной  $t$ – $J$ -модели (488).
  - 6.1. Слэив-бозонное представление для спиновой жидкости. 6.2. Коллективная мода. 6.3. Магнитная восприимчивость.

## 7. Фазовая диаграмма (493).

7.1. Фазовое расслоение. 7.2. От модели Хаббарда к  $t$ – $J$ -модели.

## 8. Заключение (495).

Список литературы (496).

## 1. Введение

## 1.1. Две фундаментальные модели в теории сильно коррелированных систем

В течение уже тридцати с лишним лет основной моделью в теории металлических магнетиков является модель Хаббарда [1]. Она была предложена первоначально для описания магнетизма в переходных d-металлах и их соединениях с целью преодолеть противоречия между коллективизированным (зонным) характером d-электронов и наличием в этих системах локализованных магнитных моментов. Фактически, как было показано [2], область применимости модели оказалась много шире, в частности, она давала возможность описать фазовый переход металл–диэлектрик при изменении параметров гамильтониана. В простейшей однозонной модели Хаббарда таких параметров всего два: ширина исходной зоны  $W$  и величина кулоновского отталкивания  $U$  двух электронов на одном узле. Оказалось, что при достаточно большом  $U \geq U_c \sim W$  основное состояние системы диэлектрическое, а при  $U < U_c$  — металлическое. Это связано с тем, что при большом  $U$  появление двух электронов на одном узле становится энергетически невыгодным, и исходная зона расщепляется на две хаббардовские подзоны с щелью в центре полосы. Таким образом, при половинном заполнении зоны уровень Ферми попадает в энергетическую щель, и основное состояние становится диэлектрическим. Электроны локализуются в узлах решетки и ведут себя как

Ю.А. Изюмов. Институт физики металлов УрО РАН,  
620219 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской 18, Россия  
Тел. (3432) 44-41-93  
Факс (3432) 44-52-44  
E-mail: izyumov@ifn.e-burg.su

Статья поступила 30 сентября 1996 г.

локализованные магнитные моменты со спином  $S = 1/2$ . Между ними возникает косвенная обменная связь, так что в диэлектрическом состоянии система является антиферромагнетиком.

Разумеется, при отклонении от половинного заполнения в системе появляется конечная проводимость, но ясно, что имеет место сильное взаимодействие носителей заряда с магнитным порядком, в результате чего могут возникнуть отклонения в поведении электронной системы от ферми-жидкостного. Все перечисленные эффекты — фазовый переход металл–диэлектрик, появление локализованных магнитных моментов, нарушение ферми-жидкостной картины — являются проявлением сильных корреляций в системе, т.е. тенденцией электронов избегать друг друга. Системы, в которых  $U \gtrsim W$ , получили название сильно коррелированных электронных систем (СКЭС). Описанный сценарий поведения системы при изменении величины кулоновского отталкивания хорошо подтверждается в теоретических работах по модели Хаббарда (см. обзор [3]), а анализ свойств узкозонных магнетиков на основе этой модели читатель может найти во многих источниках (см., например, [4]).

Успех модели Хаббарда обусловлен ее простотой и одновременно содержательностью. Гамильтониан модели можно оценить по критерию для классических произведений искусства: "В нем все есть и ничего лишнего". Действительно, гамильтониан

$$H = -t \sum_{ij\sigma} C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1.1)$$

содержит кинетический член, описывающий движение электронов по узлам решетки, и энергию отталкивания на одном узле. Здесь  $C_{i\sigma} (C_{i\sigma}^\dagger)$  — ферми-операторы уничтожения (рождения) электрона на узле  $i$  со спином  $\sigma$ , а  $n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^\dagger C_{i\sigma}$  — число электронов на узле с заданным спином. Кинетический член записан в приближении ближайших соседей для матричного элемента переноса, так что в этом случае ширина затравочной зоны  $W = 2zt$ , где  $z$  — число ближайших соседей.

В пределе  $U \gg W$  во втором порядке теории возмущений по параметру  $W/U$  можно прийти к эффективному гамильтониану (см. раздел 2.1):

$$H = -t \sum_{ij\sigma} (1 - n_{i\bar{\sigma}}) C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma} (1 - n_{j\bar{\sigma}}) + J \sum_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (1.2)$$

где  $J = 2t^2/U$  — косвенный обменный интеграл [5], а  $n_i = \sum_\sigma n_{i\sigma}$  — число электронов на узле  $i$ . Факторы  $1 - n_{i\bar{\sigma}}$  описывают запрет для электрона со спином  $\sigma$  находиться на узле, где уже есть электрон (со спином  $\bar{\sigma} \equiv -\sigma$ ). Таким образом, модель Хаббарда в пределе  $U \gg W$  описывает движение электронов по незанятым узлам решетки. Исключение состояний с парой электронов на узле ("двоек") эффективно эквивалентно появлению косвенного обменного взаимодействия электронов на соседних узлах с обменным интегралом антиферромагнитного знака.

Модель с гамильтонианом (1.2) и есть знаменитая  $t$ – $J$ -модель. Она представляет собой предельный случай модели Хаббарда при  $U \gg W$ , но иногда рассматривается (без члена  $-n_i n_i/4$ ) как самостоятельная феноменологическая модель, в которой параметры  $t$  и  $J$  незави-

симы. Она призвана описывать движение зарядов в антиферромагнитной матрице. Исключительная популярность в последние годы  $t$ – $J$ -модель приобрела после идеи Андерсона [6] о том, что электронные свойства высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) медно-оксидной группы должны описываться гамильтонианом (1.2). Чтобы увидеть это, мы должны обсудить особенности электронной структуры ВТСП-соединений.

## 1.2. $t$ – $J$ -модель — основная электронная модель для высокотемпературных сверхпроводников медно-оксидной группы

Важнейшим структурным элементом всех ВТСП-соединений медно-оксидной группы являются  $\text{CuO}_2$ -плоскости, с которыми связывают сверхпроводящие свойства. В зависимости от состава элементарная ячейка ВТСП-соединения может содержать одну, две или три таких плоскости, причем температура сверхпроводящего перехода (максимальная  $T_c$  для данного класса соединений) возрастает с увеличением этого числа. Расстояние между соседними плоскостями значительно превышает расстояние между атомами Cu в плоскости, это обуславливает большую анизотропию свойств, в том числе и сверхпроводящих. В частности, корреляционная длина  $\xi$  (размер куперовской пары) в плоскости в несколько раз превышает таковую для направления, перпендикулярного к плоскостям (см., например, [7]). Уникальной особенностью этих материалов является очень малое значение  $\xi$ . Так, внутри плоскости  $\xi$  составляет 3–4 величины параметра решетки, а в перпендикулярном направлении она меньше расстояния между плоскостями. Это указывает на то, что носители заряда в пределах одной плоскости сильно изолированы от других плоскостей и электронные состояния в них имеют двумерный характер.

Все электронные свойства сильно зависят от допирования. Для двух классов соединений — лантановой системы  $(\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4)$  и иттрий-бариевой системы  $(\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x})$  —  $T_c$ , как и другие физические характеристики, определяется содержанием стронция или кислорода. Замечательно, что исходные системы без допирования  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$  являются диэлектриками и антиферромагнетиками. С увеличением концентрации  $x$  температура Нееля  $T_N$  резко падает, и вещества становятся металлами, хотя и с плохой проводимостью. Сверхпроводимость возникает при больших  $x$ , уже за пределами магнитно-упорядоченной фазы (рис. 1 и 2). Измерение постоянной Холла показывает, что носители заряда имеют дырочный характер во всех классах ВТСП-соединений, за исключением неодимовой системы, где заряд переносится электронами. Установлено, что дырки, возникающие при допировании, формируются в  $\text{CuO}_2$ -плоскостях на атомах Cu и O; они и являются носителями заряда.

В последнее время достигнуто понимание важного вопроса: высокотемпературная сверхпроводимость соединений медно-оксидной группы связана с особенностями поведения этих систем в нормальной фазе. Эти особенности заключаются в отклонении поведения их электронных свойств от поведения ферми-жидкости. Так, оказывается, что магнитная восприимчивость и константа Холла зависят от температуры вопреки предсказаниям теории обычной ферми-жидкости. Далее, во всех классах ВТСП-материалов с дырочной проводимо-

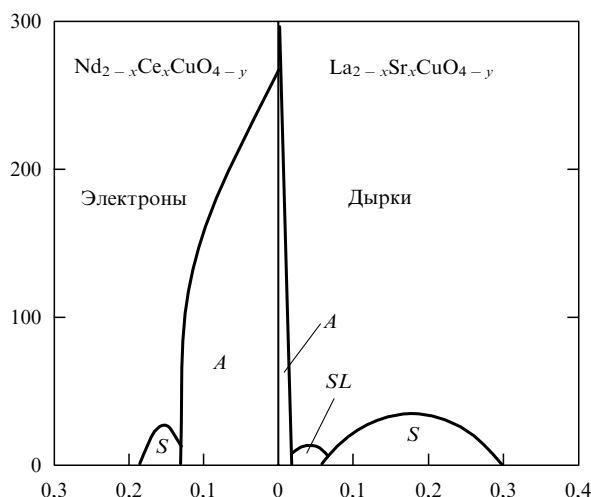


Рис. 1. Фазовая диаграмма для лантановой и неодимовой систем в ВТСП-материалах. Фазы:  $A$  — антиферромагнетик,  $S$  — сверхпроводник,  $SL$  — спиновая жидкость.

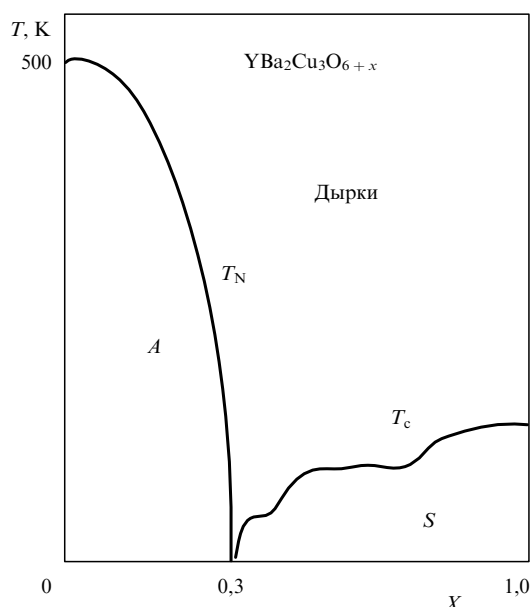


Рис. 2. Фазовая диаграмма для иттрий-бариевой системы.

стью при составах, в которых имеется сверхпроводящее состояние, наблюдается линейный по  $T$  рост электросопротивления в широком интервале температур выше  $T_c$ .

Как видно из фазовых диаграмм (см. рис. 1 и 2), сверхпроводящее состояние возникает вблизи антиферромагнитной фазы. В иттрий-бариевой системе области антиферромагнетизма и сверхпроводимости примыкают друг к другу, а в лантановой системе они разделены областью, в которой нет дальнего магнитного порядка, но есть сильные квантовые флуктуации. Эта область получила название спиновой жидкости. Мы видим, таким образом, обычное проявление взаимоотношений магнитного упорядочения и сверхпроводимости: они избегают друг друга. В то же время, эксперименты по неупругому магнитному рассеянию нейтронов в лантановой и иттрий-бариевой системах показывают наличие сильных магнитных флуктуаций в широкой

области допинга за пределами антиферромагнитной фазы, заходящей даже внутрь сверхпроводящей связи. Это, разумеется, указывает на важную роль антиферромагнитных флуктуаций в механизме высокотемпературной сверхпроводимости.

Сравнивая указанные особенности ВТСП-материалов с тем, что было сказано в предыдущем разделе о модели Хаббарда, видим, что последняя содержит в себе потенциальную возможность описать основные электронные свойства ВТСП-соединений. Извлеченные из экспериментальных данных по ВТСП-соединениям оценки параметров  $U$  и  $W$  показывают, что здесь мы имеем случай сильных корреляций:  $U \gg W$ , поэтому для этих материалов должна быть применена  $t$ - $J$ -модель с гамильтонианом (1.2), что и было впервые указано Андерсоном. Актуальным для понимания свойств ВТСП-материалов становится исследование двумерной  $t$ - $J$ -модели вблизи половинного заполнения. Этим и объясняется огромный поток теоретических работ, насчитывающий не одну сотню, который идет начиная с 1987 г.

Половинное заполнение зоны (имеется в виду зона, отвечающая модельному гамильтониану (1.2)) приводит к диэлектрическому состоянию с локализованными магнитными моментами  $S = 1/2$ , соответствующими состоянию  $d^9$  атомов Cu в  $\text{CuO}_2$ -плоскостях. При допировании часть атомов Cu теряет по одному электрону, и возникают, таким образом, носители заряда дырочного типа. Строго говоря, при допировании дырки возникают не только на атомах меди, но и кислорода. Из них формируются так называемые синглеты Жанга – Райса [8], центрированные на узлах меди, к которым и следует относить гамильтониан (1.2)  $t$ - $J$ -модели, считая, что операторы  $C_{i\sigma}$  и  $C_{i\sigma}^\dagger$  уничтожают и порождают такой синглет на узле  $i$ .

### 1.3. Трудности теоретического исследования $t$ - $J$ -модели

Несмотря на простоту записи гамильтониана (1.2), работа с ним оказывается очень сложной из-за необходимости учитывать факторы  $1 - n_{i\bar{\sigma}}$  в кинетическом члене, исключающие появление "двоек". Хотя обменный член мал по сравнению с кинетическим в силу условия  $J/t \sim t/U \ll 1$ , последний трудно использовать в качестве нулевого приближения, поскольку даже в пределе  $U \rightarrow \infty$  нет стандартных подходов к решению задачи. По этой причине в литературе имеется большое число различных приемов сведения задачи к некоторым упрощенным моделям, законность которых сомнительна или, по крайней мере, не очевидна. Кинетический член в (1.2) можно записать в терминах операторов  $X_i^{\sigma 0} \equiv C_{i\sigma}^\dagger(1 - n_{i\bar{\sigma}})$  и  $X_i^{0\sigma} \equiv C_{i\sigma}(1 - n_{i\bar{\sigma}})$ , которые совпадают с обычными фермиевскими операторами только на тех узлах, где нет второго электрона. Множество попыток вычисления физических величин для  $t$ - $J$ -модели, таких как спектр элементарных возбуждений, плотность состояний, характеристики магнитных состояний системы, связаны с представлением  $X$ -операторов со сложными перестановочными соотношениями произведением некоторых ферми- или бозе-операторов, перестановочные соотношения для которых просты. Такой прием получил название в литературе — метод вспомогательных бозонов или фермионов. Плата за введение хорошо известных ферми- и бозе-операторов

вторичного квантования достаточно высока: необходимо учитывать некоторые дополнительные условия (констрейны), исключающие неизбежное появление нефизических состояний. По физическому смыслу констрейны эквивалентны исходному условию исключения состояний с "двойками" на узле. Таким образом, метод вспомогательных частиц переносит первоначальные трудности задачи в другое место, но иногда это бывает полезным. Поскольку подобное представление  $X$ -операторов неоднозначно, трудно сравнивать получаемые результаты и оценивать используемое приближение.

По этой причине для решения тех же самых физических задач используют и другие подходы, в частности, приближения типа среднего поля, хотя для  $t$ - $J$ -модели, в силу специфики гамильтониана, формулировка такого приближения не так тривиальна, как для обычных ферми-систем со слабым кулоновским взаимодействием. В этой ситуации большое значение приобретают численные методы типа квантового метода Монте-Карло или точной диагонализации малых кластеров. В наиболее актуальном двумерном случае такие вычисления вполне выполнимы на современных компьютерах. Оказывается, что кластеры небольшого размера (например,  $4 \times 4$ ) дают результаты, устойчивые к увеличению числа узлов в кластере, поэтому они отражают физику бесконечной решетки. Численные методы при исследовании  $t$ - $J$ -модели оказываются очень информативными, с одной стороны, и позволяют контролировать приближения в аналитических расчетах, с другой. В результате, в последнее время достигнут большой прогресс в понимании физики систем, описываемых  $t$ - $J$ -моделью.

Какие, собственно, величины требуется вычислить в  $t$ - $J$ -модели и какие проблемы решить в рамках этой модели? Центральная проблема — спектр квазичастиц. Поскольку актуальна область малых концентраций дырок, задача сводится к проблеме одной дырки, движущейся в антиферромагнитной матрице. В силу отмеченного выше сильного взаимодействия зарядовых и спиновых степеней свободы, дырка должна деформировать антиферромагнитную структуру в некоторой окрестности размера  $R_p$ . Дальний магнитный порядок исчезнет, если области деформации от разных дырок будут перекрываться. Легко оценить критическую концентрацию дырок  $\delta_c$ : для двумерной решетки, очевидно,  $\delta_c \sim a^2/R_p^2$ , где  $a$  — параметр решетки. Для ВТСП-материалов, как видно из рис. 1 и 2, область существования антиферромагнитной фазы мала, поэтому  $\delta_c \ll 1$ , откуда следует, что  $R_p$  составляет несколько параметров решетки. Из приведенных рассуждений вытекает, что носителем заряда в  $t$ - $J$ -модели вблизи половинного заполнения должна быть сложная частица — дырка, окруженная областью разрушенного антиферромагнитного порядка — магнитный полярон. Детальный теоретический анализ, проведенный в обзоре (разделы 3, 4), подтверждает эту картину и определяет все характеристики квазичастицы: закон дисперсии, затухание и ее пространственный размер  $R_p$ . Мы увидим также, что структура квазичастичных состояний тесно связана со структурой антиферромагнитной фазы при заданной концентрации дырок. Задачей теории является вычисление критической концентрации  $\delta_c$  и температуры Нееля  $T_N$  как функции концентрации дырок. Изложение этой проблемы составляет другую часть обзора (раздел 5). Трудная для теоретического анализа область  $\delta > \delta_c$ , где отсутствуют

даже антиферромагнитные корреляции и реализуется состояние спиновой жидкости. Это требует подхода на основе теории калибровочных полей (раздел 6). Наконец, общая структура фазовой диаграммы для  $t$ - $J$ -модели и сравнение с фазовой диаграммой модели Хаббарда в пределе  $U \gg W$  кратко обсуждается в разделе 7. Такова структура данного обзора.

Мы совершенно не касались проблемы сверхпроводимости модели. Изложение ранних подходов к проблеме содержится в нашем обзоре [9], однако с тех пор достигнут большой прогресс в понимании этого вопроса и той роли, которую играют спиновые флуктуации в формировании высокотемпературной сверхпроводимости. Это направление само по себе требует самостоятельного обзора. Следует иметь в виду, что работы, посвященные проблеме сверхпроводимости, опираются на исследования свойств  $t$ - $J$ -модели в нормальной фазе, обобщению которых и посвящен данный обзор.

Необходимо отметить, что мы опустили изложение подходов, основанных на численных методах, поскольку недавно появился большой обзор [7], специально посвященный этой теме. В нем также дается детальное сравнение теории с экспериментальными данными по ВТСП-соединениям, и заинтересованного читателя мы отсылаем к этому обзору. Подчеркнем еще раз, что мы ставили задачу изложения исследований  $t$ - $J$ -модели аналитическими методами, подобно тому, как это было сделано нами для модели Хаббарда в обзоре [3]. Оба обзора в своей совокупности дают современный статус исследований проблемы сильно коррелированных систем.

## 2. Формулировка модели

### 2.1. Вывод гамильтониана $t$ - $J$ -модели из гамильтониана модели Хаббарда

$t$ - $J$ -модель была предложена в работах [10–12], а эффективный гамильтониан (2.1) выведен рядом авторов [11, 12] из гамильтониана Хаббарда в пределе  $U \gg W$ . Таким образом, между двумя энергетическими параметрами  $t$ - $J$ -модели имеет место неравенство  $J \ll t$ . Ниже мы приведем новый вывод гамильтониана  $t$ - $J$ -модели, уточняющий ее положение в иерархии моделей теории СКЭС.

В пределе больших  $U \gg W$  удобным является формализм  $X$ -операторов Хаббарда [13]. Оператор  $X_i^{pq}$  задается на каждом узле и описывает переходы между четырьмя возможными состояниями  $|\sigma\rangle$ ,  $|2\rangle$ ,  $|0\rangle$  с одним электроном на узле (со спином  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ), двумя электронами и без электронов. Обычные электронные операторы являются линейными комбинациями двух фермиевских  $X$ -операторов:

$$C_{i\sigma}^\dagger = X_i^{\sigma 0} + \sigma X_i^{2\sigma}, \quad C_{i\sigma} = X_i^{0\sigma} + \sigma X_i^{\bar{\sigma} 2}. \quad (2.1)$$

Эти формулы показывают, что одночастичное состояние возникает путем порождения электрона из вакуума, либо за счет появления второго электрона на узле, где уже один электрон присутствует. Операторы  $X_i^{\sigma 0}$  и  $X_i^{2\sigma}$  порождают одноэлектронные и двухэлектронные состояния, образующие, соответственно, верхнюю и нижнюю хаббардовские подзоны.  $X$ -операторы могут быть выражены через электронные операторы посред-

ством формул

$$\begin{aligned} X_i^{\sigma 0} &= C_{i\sigma}^\dagger (1 - n_{i\bar{\sigma}}), & X_i^{2\sigma} &= \sigma C_{i\sigma}^\dagger n_{i\sigma}, \\ X_i^{\sigma\bar{\sigma}} &= C_{i\sigma}^\dagger C_{i\bar{\sigma}}, & X_i^{20} &= \sigma C_{i\sigma}^\dagger C_{i\sigma}, \\ X_i^{00} &= (1 - n_{i\uparrow})(1 - n_{i\downarrow}), \\ X_i^{\sigma\sigma} &= n_{i\sigma}(1 - n_{i\bar{\sigma}}), & X_i^{22} &= n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Приведенные формулы позволяют вывести эффективный гамильтониан модели в пределе  $U \gg W$ , когда в качестве гамильтониана нулевого приближения берется кулоновский член, а кинетический член рассматривается в качестве возмущения. В терминах  $X$ -операторов гамильтониан модели Хаббарда (1.1) записывается в виде суммы трех членов:

$$\begin{aligned} H &= H_1 + H_1' + H_0 \equiv -t \sum_{ij\sigma} (X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + X_i^{2\sigma} X_j^{\bar{\sigma} 2}) - \\ &- t \sum_{ij\sigma} \sigma (X_i^{\sigma 0} X_j^{\bar{\sigma} 2} + X_i^{2\sigma} X_j^{0\sigma}) + U \sum_i X_i^{22}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Проведем каноническое преобразование гамильтониана

$$H \rightarrow \tilde{H} = e^S H e^{-S} = H + [S, H] + \frac{1}{2} [S, [S, H]] + \dots$$

с оператором

$$S = \xi \sum_{ijs} s (X_i^{\sigma 0} X_j^{\bar{\sigma} 2} - X_i^{2\bar{\sigma}} X_j^{0s}),$$

содержащим произвольный параметр  $\xi$ . Подберем его из условия

$$H_1' + [S, H_0] = 0,$$

исключающего межзонные члены в гамильтониане, при этом оказывается, что  $\xi = -t/U$ . В силу принятого условия  $U \gg W$ , в эффективном гамильтониане достаточно ограничиться членами второго порядка по  $t/U$ , поэтому

$$\tilde{H} = H_0 + H_1 + [S, H_1] + \frac{1}{2} [S, H_1'].$$

Вычисляя коммутаторы, видим, что член  $[S, H_1]$  учитывает межзонные переходы только во втором порядке по  $t/U$ , поэтому может быть отброшен. Таким образом, приходим к следующему эффективному гамильтониану:

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= -t \sum_{ij\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \frac{t^2}{U} \sum_{ij\sigma} (X_i^{\sigma\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma}\sigma} - X_i^{\sigma\sigma} X_j^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) + \\ &+ \frac{t^2}{U} \sum_{ij\sigma} (X_i^{\bar{\sigma} 0} X_j^{\sigma\sigma} - X_i^{0\bar{\sigma}} X_j^{\sigma\sigma}) + H_2, \end{aligned} \quad (2.4)$$

где  $H_2$  — часть гамильтониана, учитывающая состояния с двумя электронами на узле:

$$H_2 = U \sum_i X_i^{22} - t \sum_{ij\sigma} X_i^{2\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma} 2}. \quad (2.5)$$

Второй член в выражении (2.4) можно записать через оператор спина  $S_i$ :

$$S_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} C_{i\sigma}^\dagger \tau_{\sigma\sigma'} C_{i\sigma'}, \quad (2.6)$$

где  $\tau$  — вектор, составленный из матриц Паули. В частности, для круговых  $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$  и продольной  $S_i^z$  проекций вектора спина имеем

$$\begin{aligned} S_i^+ &= C_{i\uparrow}^\dagger C_{i\downarrow} = X_i^{+-}, & S_i^- &= C_{i\downarrow}^\dagger C_{i\uparrow} = X_i^{-+}, \\ S_i^z &= \frac{1}{2} (C_{i\uparrow}^\dagger C_{i\uparrow} - C_{i\downarrow}^\dagger C_{i\downarrow}) = \frac{1}{2} (X_i^{++} - X_i^{--}). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Таким образом, эффективный гамильтониан (2.4) переписывается в виде

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= -t \sum_{ij\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + J \sum_{ij} \left( S_i S_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) + \\ &+ \frac{1}{2} J \sum_{ij\sigma} (X_i^{\bar{\sigma} 0} X_j^{\sigma\sigma} - X_i^{0\bar{\sigma}} X_j^{\sigma\sigma}) + H_2, \end{aligned} \quad (2.8)$$

где величина  $J = 2t^2/U$  является эффективным обменным интегралом, а  $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$  — оператор числа электронов на узле  $i$ .

Первая строка этого выражения представляет собой как раз гамильтониан  $t$ - $J$ -модели. Таким образом, чтобы перейти от эффективного гамильтониана (2.8) к  $t$ - $J$ -модели, необходимо в нем отбросить член  $H_2$  (т.е. взять проекцию гамильтониана на нижнюю хаббардовскую подзону) и пренебречь членом, зависящим от трех узлов. Отметим, что в тройном члене узлы  $i$  и  $j$  являются ближайшими соседями к третьему узлу  $l$ , но они не обязаны быть ближайшими соседями по отношению друг к другу. Этот тройной член описывает переход с узла  $i$  на узел  $j$ , с переворотом или с сохранением электронного спина, при этом на третьем узле  $l$  происходит переворот имеющегося там спина (в первом случае), либо сохраняется спиновое состояние электрона (во втором случае). При этих переходах матричным элементом является не  $t$ , а много меньшая величина порядка  $t^2/U$ .

Таким образом, проецируя эффективный гамильтониан (2.8) на пространство состояний, описывающих нижнюю хаббардовскую подзону, и отбрасывая тройной член, мы приходим к гамильтониану

$$H = -t \sum_{ij\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + J \sum_{ij} \left( S_i S_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right). \quad (2.9)$$

При выводе этого гамильтониана мы не накладывали никаких ограничений на электронную концентрацию. Вблизи половинного заполнения  $\langle n_i \rangle \approx 1$  и в выражении (2.9) член, содержащий  $n_i n_j$ , часто опускают. Можно записать и другое выражение для гамильтониана (2.9), не вводя спиновые операторы, а используя только  $X$ -операторы:

$$H = -t \sum_{ij\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \frac{1}{2} J \sum_{ij\sigma} (X_i^{\sigma\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma}\sigma} - X_i^{\sigma\sigma} X_j^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}). \quad (2.10)$$

Это и есть, как раз, первая строка в выражении (2.4) для эффективного гамильтониана.

## 2.2. Представление через вспомогательные частицы

Поскольку  $X$ -операторы подчиняются сложным перестановочным соотношениям, имеется много попыток представить их в виде произведения обычных фермиевских и бозевских операторов рождения и уничтожения (например,  $X_i^{0\sigma} = f_i b_{i\sigma}$ ). Это дает ряд технических преимуществ, но и вносит значительную трудность: необходимость учитывать констрейны — условия, исключающие нефизические состояния, с неизбежностью вносимые этими представлениями. Такие представления неоднозначны и разделяются прежде всего по тому оператору, на который навешивается спиновый индекс  $X$ -оператора, представляющего рождение или уничтожение физического электрона. Если спиновый индекс придается бозе-оператору, соответствующее представление называется слэив-фермионным (от англ. slave — раб), если же он приписывается ферми-оператору, представление называется слэив-бозонным.

Заметим для справки, что наряду с упомянутыми слэив-фермионными [14–17] и слэив-бозонными [15–19] представлениями для  $t$ – $J$ -модели в последнее время предложен ряд новых представлений [20–27]. Например, в работе [25] вводится представление, использующее одновременно со слэив-фермионными и слэив-бозонными операторами обобщение известного в теории магнетизма представления Гольдштейна–Примакова. В работе [26] специально исследуется вопрос о выполнении правил сумм при различных видах представлений. Используется также ряд других представлений, которые мы рассмотрим далее. Неоднозначность представления  $X$ -операторов ферми- и бозе-операторами отражает множественность представлений алгебры  $X$ -операторов и является часто причиной трудности контроля используемых приближений.

Особенно интересным является слэив-фермионное представление, в котором вместо бозевских операторов используется оператор спина для  $S = 1/2$ . Впервые оно было предложено в работе [20], а в последующем было усовершенствовано в работах [21–24], где дается строгий вывод гамильтониана  $t$ – $J$ -модели в этом новом представлении. Поскольку мы будем его использовать при анализе магнитного полярона, остановимся на нем более подробно. Идея состоит в следующем. При половинном заполнении зоны на всех узлах имеются локализованные электроны со спином  $S = 1/2$ , однако при наличии дырок можно ожидать, что на части узлов спин  $S = 0$ . Таким образом, мы имеем решетку, заполненную спинами разной величины. Этот факт можно выразить следующим равенством для числа электронов на одном узле, которое равно либо 0, либо 1:

$$C_{i\uparrow}^\dagger C_{i\uparrow} + C_{i\downarrow}^\dagger C_{i\downarrow} = 1 - h_i^\dagger h_i, \quad (2.11)$$

где  $h_i^\dagger h_i$  — оператор числа дырок (незанятых узлов), собственные значения которого 0 и 1. Ведь на самом деле в соотношениях (2.7) операторы  $S_i^\pm$  и  $S_i^z$  не являются операторами спина — хотя они сохраняют перестановочные соотношения для спиновых операторов

$$[S_i^+, S_j^-] = 2S_i^z \delta_{ij}, \quad [S_i^z, S_j^\pm] = \pm S_i^\pm \delta_{ij}, \quad (2.12)$$

но не дают правильного выражения для квадратов спина

$$\mathbf{S}_i \mathbf{S}_i = \frac{3}{4}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}) \approx \frac{3}{4}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) = \frac{3}{4}(1 - h_i^\dagger h_i).$$

Последнее выражение равно  $3/4$  для узла, заполненного одним электроном, и равно 0 для узла, на котором имеется дырка. Иначе говоря, соотношения (2.7) определяют операторы спина с переменным значением величины спина  $S$ , равным  $1/2$  или 0. В то же время можно ввести операторы спина  $s_i$  величины  $s = 1/2$  для каждого узла (назовем их операторами псевдоспина). Поскольку для них всегда  $s_i s_i = 3/4$ , имеет место следующая связь между операторами физического спина  $S_i$  и псевдоспина  $s_i$ :

$$\mathbf{S}_i = s_i(1 - h_i^\dagger h_i), \quad (2.13)$$

где фермиевские операторы  $h_i$  и  $h_i^\dagger$  коммутируют с операторами  $s_i$ . В силу проекционных свойств оператора  $(1 - h_i^\dagger h_i)^2 = 1 - h_i^\dagger h_i$ , перестановочные соотношения (2.12) для спина при этом также удовлетворяются.

Кинетический член в гамильтониане (2.9) также можно выразить через фермионные операторы дырок и операторы псевдоспина. В итоге, гамильтониан  $t$ – $J$ -модели (1.2) или (2.9) в новом представлении приобретает форму

$$H = t \sum_{ij} 2h_i^\dagger h_j \left( s_i s_j + \frac{1}{4} \right) + J \sum_{ij} (1 - h_i^\dagger h_i) \left( s_i s_j - \frac{1}{4} \right) (1 - h_j^\dagger h_j). \quad (2.14)$$

Он описывает взаимодействие дырок и псевдоспинов. В отличие от исходного гамильтониана (1.2) теперь в каждый узел помещен псевдоспин  $s = 1/2$ . В представлении (2.14) спиновые и зарядовые степени свободы разделены. Это представление удобно для обсуждения вопросов взаимодействия заряженных носителей модели с различными состояниями спиновой системы. Отметим, что гамильтониан (2.14) был выведен в работе [21], а еще ранее был постулирован в [22].

Гамильтониан (2.14) описывает  $t$ – $J$ -модель при  $n < 1$ , когда нижняя хаббардовская подзона заполнена менее чем наполовину и носителями являются дырки. В случае  $n > 1$  происходит заполнение верхней подзоны, и носителями служат электроны, начинающие заполнять верхнюю подзону. Число электронов на узле определяется соотношениями

$$C_{i\uparrow}^\dagger C_{i\uparrow} + C_{i\downarrow}^\dagger C_{i\downarrow} = 1 + d_i^\dagger d_i, \quad (2.15)$$

где  $d_i$  — ферми-оператор, который порождает состояние с двумя электронами на узле. В этом случае физический спин  $S_i$  связан с псевдоспином  $s_i$  соотношением  $\mathbf{S}_i = (1 - d_i^\dagger d_i) \mathbf{s}_i$ . Для этой ситуации вместо (2.14) имеем гамильтониан

$$H = -t \sum_{ij} 2d_i^\dagger d_j \left( s_i s_j + \frac{1}{4} \right) + J \sum_{ij} (1 - d_i^\dagger d_i) \left( s_i s_j - \frac{1}{4} \right) (1 - d_j^\dagger d_j). \quad (2.16)$$

Различие в знаке перед первым членом в (2.14) и (2.16) отражает электрон-дырочную симметрию модели Хаббарда.

Недавно слэив-фермионное псевдоспиновое представление было дано для полного гамильтониана Хаббарда

(1.1) [23]. В этом случае, наряду с операторами рождения дырок  $h_i^\dagger$ , необходимо ввести операторы рождения двоек  $d_i^\dagger$ . Гамильтониан имеет вид [23]

$$\begin{aligned} H = & t \sum_{ij} 2h_i^\dagger h_j (1 - d_i^\dagger d_i) (1 - d_j^\dagger d_j) \left( \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j + \frac{1}{4} \right) - \\ & - t \sum_{ij} 2d_i^\dagger d_j (1 - h_i^\dagger h_i) (1 - h_j^\dagger h_j) \left( \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j + \frac{1}{4} \right) + \\ & + U \sum_i d_i^\dagger d_i - t \sum_{ij} (1 - d_i^\dagger d_i) (1 - h_j^\dagger h_j) \times \\ & \times (e_i d_j P_{ij} + d_j^\dagger e_i^\dagger P_{ij}^\dagger), \end{aligned} \quad (2.17)$$

где

$$P_{ij} = \left( \frac{1}{2} + s_i^z \right) s_j^- + \left( \frac{1}{2} - s_i^z \right) s_i^+ - \left( \frac{1}{2} + s_j^z \right) s_i^- - \left( \frac{1}{2} - s_j^z \right) s_j^+. \quad (2.18)$$

Отметим, что выражение (2.17) инвариантно при обращении знака времени, поскольку при этом  $s_i^z \rightarrow -s_i^z$  и  $s_i^\pm \rightarrow -s_i^\mp$ .

В отличие от других слэив-фермионных [14–17] или слэив-бозонных [18–23] представлений, требующих учета нескольких сложных констрейнов, представление (2.17), содержит только один локальный констрейн  $h_i^\dagger h_i d_i^\dagger d_i = 0$ , к тому же в пределе больших  $U \gg W$  он автоматически выполняется. Кроме того, в (2.17) нет констрейна между зарядовыми и спиновыми степенями свободы. В пределе  $U \gg W$  путем канонического преобразования легко перейти к эффективному гамильтониану. В случае  $n < 1$  мы приходим к гамильтониану (2.14)  $t$ - $J$ -модели с дополнительным слагаемым

$$-\frac{1}{4} J \sum_{ijl} h_i h_j^\dagger (1 - h_l^\dagger h_l) P_{il} P_{jl}^\dagger, \quad (2.19)$$

где  $i$  и  $j$  — различные узлы, являющиеся ближайшими соседями узла  $l$ . Легко показать, что

$$\begin{aligned} P_{il} P_{jl}^\dagger = & \frac{1}{4} + \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j - \mathbf{s}_i \mathbf{s}_l - \mathbf{s}_j \mathbf{s}_l + s_i^z (s_j^+ s_l^- - s_i^- s_l^+) + \\ & + s_i^z (s_l^+ s_j^- - s_l^- s_j^+) - s_l^z (s_i^+ s_j^- - s_i^- s_j^+). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Дополнительный трехчастичный член в (2.20) соответствует трехчастичному члену в эффективном гамильтониане (2.8), записанном в  $X$ -операторах. Этот член описывает перенос дырки по следующим за ближайшими соседями. Хотя соответствующий ему матричный элемент  $\propto J \ll t$ , роль тройного члена, очевидно, быстро возрастает с ростом концентрации дырок. В разделе 4 псевдоспиновое представление  $t$ - $J$ -модели будет использовано при исследовании проблемы магнитного полярона.

### 3. Дырка в антиферромагнитной матрице

#### 3.1. Приближение возвратных путей

Проблема описания изолированной дырки в квантовом антиферромагнетике была поставлена задолго до открытия ВТСП-соединений [28–30]. В этих работах были

заложены основы теории квантовой многочастичной задачи (дырка + неелевское состояние матрицы), получившей интенсивное развитие в последние несколько лет. Предложенные в работах [28–30] подходы позволяют в простых терминах понять физическое содержание проблемы.

Рассмотрим рис. 3, где показано состояние системы при двух положениях дырки: начальном (а) и конечном (б). При движении дырки на некоторое целое число  $l$  параметров решетки в антиферромагнитной матрице возникает неправильное (по отношению к неелевскому состоянию) расположение спинов, увеличивающее обменную энергию системы на величину порядка  $lJ$ . Это делает уход дырки из начального положения, в котором всюду сохраняется неелевский порядок, энергетически невыгодным, что приводит к автолокализации дырки. Из рисунка ясно, что дырку можно рассматривать как частицу, находящуюся в линейном потенциале. В континуальном пределе эта задача, очевидно, сводится к уравнению Шрёдингера для частицы в линейном потенциале, которое представляет собой уравнение Эйри. Спектр собственных значений его известен: система дискретных уровней, расстояние между которыми порядка  $(J/t)^{2/3} t$  [29]. Наинизший уровень расположен вблизи дна затравочной зоны, и ему соответствует основное состояние локализованной дырки, названное в работе [28] квазиосциллятором. Следует иметь в виду, что в наших рассуждениях мы предполагаем изинговскую аппроксимацию обменного взаимодействия:  $J(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j) \rightarrow JS_i^z S_j^z$ , для которого основное состояние всей матрицы неелевское. Поперечная часть обменного гамильтониана  $J(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)$  будет производить спиновые отклонения, позволяющие дырке перемещаться. Таким образом, дискретный уровень квазиосциллятора должен размыться в некоторую зону. Определение положения и ширины зоны, точнее, закона дисперсии и затухания одночастичного состояния и составляет основную задачу.

Рассмотрим функцию Грина дырки, движущейся в матрице с некоторой конфигурацией спинов  $s$  (это

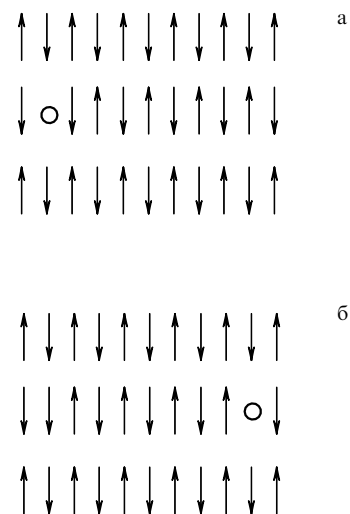


Рис. 3. Перемещение дырки в антиферромагнитной матрице, сопровождающееся нарушением спинового порядка.

совокупность спинов на всех узлах решетки) [30]:

$$G_{ij}^s(\omega) = \sum_{\sigma} \left\langle s \left| C_{i\sigma}^{\dagger} \frac{1}{\omega - H} C_{j\sigma} \right| s \right\rangle. \quad (3.1)$$

Диагональные элементы позволяют вычислить плотность одночастичных состояний:

$$\rho^s(\omega) = -\frac{1}{\pi} \sum_i \text{Im} G_{ii}^s(\omega). \quad (3.2)$$

Воспользовавшись тождеством

$$\frac{1}{\omega - H} = \frac{1}{\omega} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{H}{\omega} \right)^n, \quad (3.3)$$

можем представить  $G_{ii}^s(\omega)$  в виде ряда

$$G_{ii}^s(\omega) = \frac{1}{\omega} + \frac{1}{\omega} \sum_{n=2}^{\infty} A_{in}^s \left( \frac{t}{\omega} \right)^n. \quad (3.4)$$

Коэффициенты  $A_{in}^s$  представляют собой число путей, которыми дырка может пройти, стартуя из узла  $i$ , в результате  $n$  прыжков так, чтобы после возвращения на исходный узел спиновая конфигурация матрицы осталась бы неизменной.

При записи выражения (3.4) мы учли только кинетический член в гамильтониане; это соответствует пределу  $U \rightarrow \infty$ . Вычисление функции Грина, таким образом, сводится к перечислению всех возможных путей и нахождению коэффициентов  $A_{in}^s$ . Величины  $A_{in}^s$  давно табулированы для различных типов решеток в связи с проблемой фазовых переходов в моделях Изинга и Гайзенберга. Из анализа этих результатов можно увидеть, что, например, для кубической решетки доминирует вклад от путей без пересечения, при которых дырка уходит на некоторый узел и возвращается назад тем же путем (retraceable path), причем это остается справедливым для любых спиновых конфигураций  $s$ . Вклады от всех таких путей для гиперкубической решетки с  $z$  ближайшими соседями в выражение (3.4) приводит к результату [30]:

$$G_{ii}(\omega) = \frac{1}{\omega} \left\{ 1 - \frac{z}{2(z-1)} \left[ 1 - \sqrt{1 - \frac{4(z-1)t^2}{\omega^2}} \right] \right\}^{-1}. \quad (3.5)$$

Это выражение вещественно для частот  $|\omega| > 2\sqrt{z-1} t \equiv \eta z t$ , но в интервале

$$-z t \eta < \omega < z t \eta \quad (3.6)$$

имеется отличная от нуля плотность состояний, соответствующая сплошному спектру. Поскольку интервал частот оказывается уже, чем для свободных электронов, имеет место корреляционное сужение зоны. Эффект, безусловно, интересный, однако соответствующее приближение (возвратных путей) пока носит чисто эвристический характер. Физическое обоснование этого приближения было недавно дано в [31] при рассмотрении пространства, имеющего в пределе бесконечную размерность.

### 3.2. Предел бесконечной размерности пространства

В теории СКЭС большую ценность имеет рассмотрение предела  $d \rightarrow \infty$ , в котором уравнения теории выглядят максимально просто и могут рассматриваться как истинное приближение среднего поля для таких систем (см. обзор [3]). Разработаны также методы получения систематических поправок порядка  $1/d$ , позволяющие рассматривать системы с конечной размерностью пространства  $d$ . При работе с пределом  $d \rightarrow \infty$  необходимо предварительно масштабировать параметры системы. В частности, для гамильтониана (1.2)  $t-J$ -модели необходимо положить

$$t = \frac{t^*}{\sqrt{z}}, \quad J = \frac{J^*}{z}, \quad (3.7)$$

где  $t^* = \text{const}$  и  $J^* = \text{const}$  [31]. Для гиперкубической решетки  $z = 2d$  стремится к бесконечности при  $d \rightarrow \infty$ . Указанное масштабирование позволяет получить среднюю кинетическую и обменную энергии, приходящиеся на один узел решетки, конечной при  $d \rightarrow \infty$ . Затравочный спектр электронов при этом, как хорошо известно [32], становится в этом пределе гауссовым, т.е.

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}t^*} \exp\left(-\frac{\omega^2}{2t^{*2}}\right). \quad (3.8)$$

Величины  $t^*$  и  $J^*$  являются естественными масштабами кинетической и обменной энергий в системе.

В работах [31, 33] предел  $d \rightarrow \infty$  был использован для  $t-J$ -модели. Основная задача остается прежней: вычислить функцию Грина дырки, используя представление (3.4). По-прежнему проблема сводится к вычислению вкладов от разных путей частицы по решетке. В пределе  $d \gg 1$  различные пути могут быть классифицированы по степеням  $1/d$ . В итоге оказывается, что в пределе  $d \rightarrow \infty$  могут выжить лишь графики типа деревьев из петель (loop trees), проходимых частицей только один раз.

Согласно представлению (3.4), пути, проходимые частицей, должны быть такими, чтобы после возврата ее в исходную точку в матрице не менялась бы спиновая конфигурация. Можно показать, что для неелевского основного состояния замкнутые петли, проходимые только один раз, меняют спиновую конфигурацию матрицы, поэтому они не дают вклада в  $G_{ii}(\omega)$ . Остаются лишь вклады от возвратных путей. Сумма всех таких вкладов записывается в виде (подробности см. в работе [33])

$$G_{ii}(\omega) = \frac{1}{\omega - t^{*2} \frac{1}{\omega - \frac{J^*}{2} - t^{*2} \frac{1}{\omega - 2\frac{J^*}{2} - t^{*2} \frac{1}{\omega - 3\frac{J^*}{2} - t^{*2} \dots}}}}. \quad (3.9)$$

Эта бесконечная дробь эквивалентна функциональному уравнению

$$G_{ii}(\omega) = \frac{1}{\omega - t^{*2} G_{ii}(\omega - J^*/2)}. \quad (3.10)$$



При  $J^* = 0$  уравнение становится квадратным и приводит к результату

$$G_{ii}(\omega) = \frac{\omega}{2t^{*2}} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{4t^{*2}}{\omega^2}} \right), \quad (3.11)$$

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2\pi t^{*2}} \sqrt{4t^{*2} - \omega^2}, \quad |\omega| < 2t^*. \quad (3.12)$$

Уравнение (3.11) совпадает с уравнением (3.5) в пределе  $z \rightarrow \infty$ , если подставить в него  $t = \sqrt{z} t^*$ . Таким образом, результат, полученный в приближении возвратных путей, является точным в пределе  $d \rightarrow \infty$ . Найденное соответствие устанавливает физический смысл этого приближения.

Рассмотрим теперь общий случай, когда  $J^* \neq 0$ . Решение уравнения (3.10) выражается через функции Бесселя первого рода  $J_\nu(x)$ , при этом [34]

$$G_{ii}(\omega) = \frac{1}{t^*} \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{1}{x - j_{v-1,n}} + \frac{1}{x + j_{v-1,n}} \right], \quad (3.13)$$

где  $x = 4t^*/J^*$  и  $v = -2\omega/J^*$ , а  $j_{v,n}$  — нули функции  $x^v J_\nu(x)$ . Таким образом, полюса функции Грина определяются уравнениями  $x \pm j_{v-1,n} = 0$ . Для больших  $v$  эти уравнения могут быть решены точно, причем вблизи нижнего края зоны положение полюсов дается выражением

$$\omega_n = -2t^* - \frac{J^*}{2} - a_n t^* \left( \frac{J^*}{2t^*} \right)^{2/3}, \quad (3.14)$$

где  $a_n$  — нули функции Эйри. Для первых значений  $n$

$$a_1 = -2,33, \quad a_2 = -4,08, \quad a_3 = -5,52, \dots \quad (3.15)$$

Формула (3.14) показывает, что вблизи дна ( $\omega = -2t^*$ ) затравочной полосы имеются дискретные уровни, расстояние между которыми порядка  $(J^*/t^*)^{2/3} t^*$ . Вычисленная по формуле (3.2) плотность состояний представлена на рис. 4. Мы видим, что при конечном  $J^*$

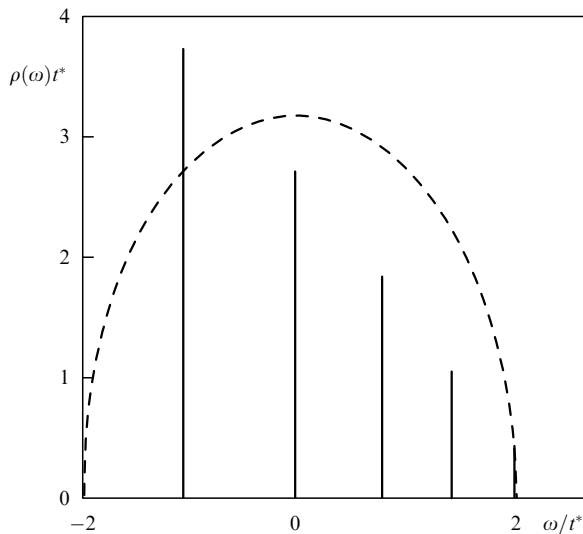


Рис. 4. Плотность состояний для дырки в антиферромагнитной матрице в пределе  $d = \infty$ :  $J^*/t^* = 0$  (штрих),  $J^*/t^* = 0,1$  (сплошная линия) [33].

действительно имеет место система дискретных пиков; при  $J^* = 0$  они должны сливаться, и их огибающая изображена на рисунке штриховой кривой.

Зависимость  $(J^*/t^*)^{2/3}$  положений дискретных уровней была получена ранее [29] в приближении континуальной среды, в котором задача о дырке в антиферромагнитной матрице в трехмерном случае сводится к уравнению Шрёдингера с линейным потенциалом:

$$t\Delta\psi + \frac{J^*}{2} r\psi = \left( E + 2t^* + \frac{J^*}{2} \right) \psi. \quad (3.16)$$

Здесь  $r$  — расстояние от дырки до точки  $\mathbf{r}$ , величина  $2t^* + J^*/2$  определяет начало отсчета энергии (дно непрерывной полосы). Для орбитального момента  $l = 0$  уравнение Эйри (3.16) имеет собственными значениями как раз величины (3.14), полученные в пределе  $d \rightarrow \infty$ . Таким образом, континуальное приближение [29] является точным в пределе бесконечной размерности пространства для больших значений  $\omega/J^*$ .

В континуальном приближении используется только изинговская часть обменного гамильтониана. Казалось бы, что поперечная часть его должна размывать дискретные уровни (3.14). Однако, как было показано методами точной диагонализации малых кластеров на квадратной решетке [35], это не так: дискретный характер спектра дырки сохраняется. С другой стороны, результаты рассмотрения предела  $d \rightarrow \infty$  в теории [33] с полным обменным гамильтонианом приводят тоже к дискретному спектру (3.14). Это означает, что в этом пределе поперечная часть обменного взаимодействия является irrelevantной. Получается так, что даже в случае  $d = 2$  в рассматриваемой модели сохраняются основные черты предела  $d \rightarrow \infty$ , а именно, дискретный характер спектра дырки в антиферромагнитной матрице. Для окончательной связки результатов предела  $d \rightarrow \infty$  с результатами для конечных  $d$  следовало бы разработать метод систематического учета поправок по степеням параметра  $1/d$ .

Учет первых порядков приводит часто к нефизическим результатам (отрицательная плотность состояний) [36], свидетельствуя о том, что необходимо учитывать бесконечные ряды по  $1/d$ . Одним из таких подходов является получение самосогласованных уравнений для функции Грина. Для частного случая  $J^* = 0$  в работе [30] таким способом было получено следующее выражение для функции Грина

$$G_{ii}(\omega) = \frac{\omega(1 - 1/d) - \sqrt{\omega^2 - 4t^{*2}(1 - 1/2d)}}{2t^{*2} - \omega^2/d}, \quad (3.17)$$

включающее поправки порядка  $1/d$  к отдельным членам его в числителе и знаменателе. Если положить в нем  $t^* = \sqrt{2d}t$ , можно увидеть, что формула (3.17) совпадает с формулой (3.5), полученной в приближении возвратных путей. Отсюда следует вывод, что это приближение в случае конечной размерности пространства эквивалентно самосогласованному подходу с  $1/d$ -поправками в теории с  $d = \infty$ . Этим самым определяется статус эвристического приближения, учитывающего только возвратные пути. Выйти за рамки этого самосогласованного подхода было бы интересно, в частности, при рассмотрении спин-волновых возбуждений квантового антиферромагнетика с внедренными дырками.

Мы изложили результаты исследования поведения дырки в антиферромагнитной матрице. Для других

спиновых конфигураций аналогичные исследования в пределе  $d \rightarrow \infty$  были проведены в работе [31]. Оказывается, что в ферромагнитной матрице частица движется свободно и соответствующая ей плотность состояний является гауссовой функцией (3.8). Это означает, что приближение  $d = \infty$  не учитывает вклада от больших ферромагнитных кластеров, приводящих к лифшицевским хвостам в плотности состояний [37]. Отметим, тем не менее, что функции Грина, полученные в приближении  $d = \infty$ , удовлетворяют необходимым правилам сумм, как и вычисленная в этом приближении проводимость  $\sigma(\omega)$  [36].

Вернемся к задаче о движении дырки в антиферромагнитной матрице. В изинговском приближении для обменного взаимодействия ее спектр определяется формулой (3.14), причем сама дырка является неподвижной. Основное состояние соответствует нижнему уровню  $n = 1$ , отстоящему на величину порядка  $(J^*/t^*)^{2/3} t^*$  от дна полосы затравочного спектра. Поперечные члены в обменном взаимодействии могут порождать спиновые волны, благодаря взаимодействию с которыми дырка приобретает конечную массу и будет двигаться. Это движение по решетке можно представить как размытие первого дискретного уровня. Ширина зоны за счет рождения спиновых волн должна быть порядка обменного взаимодействия, поэтому, в силу того, что  $J^* \ll t^*$ , наличие следующих дискретных уровней не может существенно сказаться на движении дырки в нижней зоне. Из этих рассуждений можно ожидать, что дырка, движущаяся по решетке за счет деформации неелевской структуры (возбуждения спиновых волн), становится магнитным поляроном, образующим зону квазичастичных состояний с шириной порядка  $J^*$ . Более высокие дискретные уровни, размываясь за счет спиновых волн, должны образовывать некогерентный спектр в интервале энергий порядка ширины затравочной зоны. Как будет показано в следующем разделе, именно такая структура квазичастичных состояний действительно возникает при движении дырки в антиферромагнитной матрице.

## 4. Магнитный полярон

### 4.1. Эффективный гамильтониан для дырки, движущейся в антиферромагнитной матрице

Существование квазичастичного спектра для дырки в антиферромагнитной матрице было показано в ряде работ [38–45] численными методами точной диагонализации малых кластеров в пространстве размерности  $d = 2$ . Этот спектр в области низких энергий (отсчитываемых от дна дырочной зоны) характеризуется квазичастичным пиком, хорошо отделенным от широкой некогерентной части спектра с шириной  $(6 - 7)t$ . Когерентное распространение квазичастицы описывается законом дисперсии, имеющим минимум в точках  $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ , лежащих на границе зоны Бриллюэна для антиферромагнитной неелевской решетки.

В работе [47] впервые аналитическими методами была подтверждена эта картина квазичастичного спектра. Использованный в [47] метод самосогласованной теории возмущений интенсивно разрабатывался в ряде работ [48–53]. Метод основывается на выводе эффективного гамильтониана для антиферромагнитной матрицы, содержащей одну дырку. При точно половин-

ном заполнении гамильтониан  $t$ – $J$ -модели сводится к гайзенберговскому гамильтониану с антиферромагнитным обменным взаимодействием, и его слабо возбужденные состояния описываются спиновыми волнами. Вырывание одного электрона производит локальное возмущение спектра магнитной матрицы, которое должно описываться с помощью эффективного взаимодействия дырки со спиновыми волнами. Для вывода соответствующего эффективного гамильтониана используем слэив-фермионное представление [46, 54] электронных операторов в гамильтониане (1.2). Проведем несколько последовательных шагов преобразования гамильтониана.

Мы предполагаем неелевское упорядочение спинов матрицы, так что имеем две подрешетки со спином  $\uparrow$  или  $\downarrow$  на каждом узле. Удобно повернуть локальную систему координат на узлах  $\downarrow$ -подрешетки на  $180^\circ$  относительно оси  $x$ . Операторы, находящиеся на узлах  $\downarrow$ -подрешетки, преобразуются тогда следующим образом:

$$S_j^\pm \rightarrow S_j^\mp, \quad S_j^z \rightarrow -S_j^z, \quad C_{j\sigma} \rightarrow C_{j\bar{\sigma}}, \quad (4.1)$$

что приводит к преобразованию самого гамильтониана (1.2):

$$H \rightarrow -t \sum_{ij\sigma} \tilde{C}_{i\sigma}^\dagger \tilde{C}_{j\bar{\sigma}} + J \sum_{ij} \left[ \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-) - S_i^z S_j^z - \frac{1}{4} n_i n_j \right], \quad (4.2)$$

где  $\tilde{C}_{i\sigma} \equiv C_{i\sigma} (1 - n_{i\bar{\sigma}}) = X_i^{\sigma\sigma}$ . Это каноническое преобразование переводит неелевское состояние в ферромагнитное состояние со всеми спинами, направленными  $\uparrow$ , и в последующем нет необходимости различать подрешетки. Далее перейдем от электронных  $\tilde{C}_{i\sigma}$  и спиновых  $S_i$  операторов к бесспиновым ферми-операторам  $h_i$  и операторам псевдospина  $s_i$  посредством формул [50]

$$\tilde{C}_{i\uparrow} = h_i^\dagger \left( \frac{1}{2} + s_i^z \right), \quad \tilde{C}_{i\downarrow} = h_i^\dagger s_i^+, \quad S_i = s_i h_i h_i^\dagger. \quad (4.3)$$

В этом представлении гамильтониан  $t$ – $J$ -модели принимает форму

$$H = t \sum_{ij} h_i^\dagger h_j \left[ \left( \frac{1}{2} + s_i^z \right) s_j^- + \left( \frac{1}{2} + s_j^z \right) s_i^+ \right] + J \sum_{ij} h_i h_i^\dagger h_j h_j^\dagger \left[ \frac{1}{2} (s_i^+ s_j^+ + s_i^- s_j^-) - s_i^z s_j^z \right]. \quad (4.4)$$

В качестве третьего шага при выводе эффективного гамильтониана используем представление Гольдштейна–Примакова для спиновых операторов, выражающее их через бозе-операторы  $b_i^\dagger$  и  $b_i$  спиновых отклонений. Для спина  $s = 1/2$  имеем

$$s_i^+ = \sqrt{1 - b_i^\dagger b_i} b_i \approx b_i, \quad s_i^- = b_i^\dagger \sqrt{1 - b_i^\dagger b_i} \approx b_i^\dagger, \\ s_i^z = \frac{1}{2} - b_i^\dagger b_i.$$

Линейное приближение в (4.4) дает хорошее описание спиновой динамики антиферромагнетика при низких температурах, поскольку средняя величина спиновых отклонений на узле мала:  $\langle b_i^\dagger b_i \rangle \ll 1$ . Используем это

приближение и заменим во втором члене выражения (4.4) оператор числа дырок его средним значением:

$$h_i h_i^\dagger = 1 - h_i^\dagger h_i \rightarrow 1 - \langle h_i^\dagger h_i \rangle \equiv 1 - \delta,$$

где  $\delta$  — концентрация дырок. Тогда гамильтониан (4.4) представляется в виде

$$H = t \sum_{ij} h_i^\dagger h_j (b_i + b_j^\dagger) + J \sum_{ij} \left[ \frac{1}{2} (b_i^\dagger b_j^\dagger + b_i b_j) + b_i^\dagger b_i + b_j^\dagger b_j \right] \quad (4.5)$$

(мы опустили постоянный член, меняющий только начало отсчета энергии, а также, для упрощения записи, заменили  $J(1 - \delta^2) \rightarrow J$ ). После разложения операторов в ряд Фурье и использования канонического преобразования

$$b_q = u_q \beta_q + v_q \beta_{-q}^\dagger \quad (4.6)$$

к новым бозе-операторам  $\beta_q$  приходим к окончательному выражению для эффективного гамильтониана [47]:

$$H = \sum_q \omega_q^0 \beta_q^\dagger \beta_q - \mu \sum_k h_k^\dagger h_k + \sum_{kq} [\mathcal{M}_q(\mathbf{k}) h_k^\dagger h_{k-q} \beta_q + \text{к.с.}], \quad (4.7)$$

где добавлен член с химическим потенциалом. Здесь

$$\mathcal{M}_q(\mathbf{k}) = z t (u_q \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + v_q \gamma_{\mathbf{k}}) \quad (4.8)$$

— амплитуда взаимодействия дырки со спиновыми волнами,

$$u_q = \left[ \frac{1 + \sqrt{1 - \gamma_q^2}}{2\sqrt{1 - \gamma_q^2}} \right]^{1/2}, \quad v_q = -\text{sign } \gamma_q \left[ \frac{1 - \sqrt{1 - \gamma_q^2}}{2\sqrt{1 - \gamma_q^2}} \right]^{1/2},$$

$$\gamma_q = \frac{2}{z} \sum_{\alpha=1}^{z/2} \cos q_\alpha, \quad \omega_q^0 = \frac{1}{2} z J \sqrt{1 - \gamma_q^2}.$$

Мы видим, что гамильтониан  $t$ - $J$ -модели вблизи половинного заполнения свелся к гамильтониану для спиновых волн неелевского антиферромагнетика, взаимодействующего с бесспиновыми фермионами, представляющими собой дырки. Видна близкая аналогия с проблемой полярона, однако имеется и существенное отличие: в гамильтониане (4.7) отсутствует затравочный член типа  $\sum_k \epsilon_k h_k^\dagger h_k$  для дырок. Кинетический член  $t$ - $J$ -модели трансформировался в член, описывающий связь фермиона с магнонами. Поскольку амплитуда этого взаимодействия порядка  $t \gg J$ , мы имеем случай сильной связи.

Благодаря члену взаимодействия фермион должен приобрести собственную энергию. Ниже мы увидим, что она имеет дисперсию и соответствует квазичастице, которую можно назвать магнитным поляроном. Отметим, что амплитуда взаимодействия обращается в нуль при  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  и  $\mathbf{q} = (\pi, \pi, \dots)$ , но она становится большой при промежуточных значениях импульса передачи  $\mathbf{q}$ . Отсюда следует, что в задаче о магнитном полароне существенно

взаимодействие дырки с коротковолновыми спиновыми волнами. Это означает, что магнитный поларон будет хорошо пространственно локализован.

#### 4.2. Функция Грина для дырок

Гамильтониан (4.7) для одной дырки в антиферромагнитной матрице выведен впервые в работе [47], где также вычислена функция Грина дырок для нуля температур с помощью самосогласованной теории возмущений. Аналитический результат был получен только в полном приближении, когда пренебрегается вкладами некогерентных состояний. Полученные результаты подтверждают ожидаемую структуру спектра дырочных состояний, обсуждаемую в начале раздела 4.1. Чтобы описать систему аналитически при конечных температурах и конечных (но малых) концентрациях дырок, следуя [49], введем запаздывающую функцию Грина

$$\langle\langle h_{\mathbf{k}}(t) | h_{\mathbf{k}}^\dagger(t') \rangle\rangle = -i\Theta(t - t') \langle\{h_{\mathbf{k}}(t), h_{\mathbf{k}}^\dagger(t')\}\rangle, \quad (4.9)$$

где  $\Theta(\tau)$  — ступенчатая функция, равная 0 для  $\tau < 0$  и 1 для  $\tau > 0$ , а  $\{\dots, \dots\}$  означает антикоммутатор. Ее фурье-образ по переменной  $t - t'$

$$G(\mathbf{k}, \omega) \equiv \langle\langle h_{\mathbf{k}} | h_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle\rangle_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') \exp[i\omega(t - t')] \langle\langle h_{\mathbf{k}}(t) | h_{\mathbf{k}}^\dagger(t') \rangle\rangle$$

с бесконечно малой положительной мнимой добавкой  $i\delta$  к  $\omega$  позволяет вычислить спектральную плотность дырочных состояний

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G(\mathbf{k}, \omega). \quad (4.10)$$

Легко написать уравнения движения для функции Грина, дифференцируя (4.9) по времени  $t$ , а затем по времени  $t'$  [56]. После фурье-преобразования по  $t - t'$  приходим к паре связанных уравнений

$$(\omega + \mu) G(\mathbf{k}, \omega) = 1 + \sum_q \langle\langle h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} B(\mathbf{k}, \mathbf{q}) | h_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle\rangle_\omega, \quad (4.11)$$

$$(\omega + \mu) \langle\langle h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} B(\mathbf{k}, \mathbf{q}) | h_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle\rangle_\omega = \sum_{q'} \langle\langle h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} B(\mathbf{k}, \mathbf{q}) | h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger B^\dagger(\mathbf{k}, \mathbf{q}') \rangle\rangle_\omega, \quad (4.12)$$

где

$$B(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \mathcal{M}_q(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \beta_q + \mathcal{M}'_q(\mathbf{k}) \beta_{-\mathbf{q}}^\dagger.$$

Здесь  $\mathcal{M}_q(\mathbf{k})$  определена в (4.8), а  $\mathcal{M}'_q(\mathbf{k}) = z t (u_q \gamma_{\mathbf{k}} + v_q \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})$ . Подставим (4.12) в (4.11); введя нулевую функцию Грина дырки  $G_0(\mathbf{k}, \omega) = (\omega + \mu)^{-1}$ , получим уравнение

$$G(\mathbf{k}, \omega) = G_0(\mathbf{k}, \omega) + G_0(\mathbf{k}, \omega) T(\mathbf{k}, \omega) G_0(\mathbf{k}, \omega), \quad (4.13)$$

где матрица рассеяния  $T(\mathbf{k}, \omega)$  является функцией Грина более высокого порядка:

$$T(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \langle\langle h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} B(\mathbf{k}, \mathbf{q}) | h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger B^\dagger(\mathbf{k}, \mathbf{q}') \rangle\rangle_\omega. \quad (4.14)$$

Сравнивая уравнение (4.13) с уравнением Дайсона

$$G(\mathbf{k}, \omega) = G_0(\mathbf{k}, \omega) + G_0(\mathbf{k}, \omega) \Sigma(\mathbf{k}, \omega) G(\mathbf{k}, \omega),$$

находим связь  $T$ -матрицы с собственнo-энергетической частью  $\Sigma$ :

$$T = \Sigma + \Sigma G_0 T.$$

Отсюда видно, что  $\Sigma$  является неприводимой частью матрицы рассеяния:

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = T_{\text{irr}}(\mathbf{k}, \omega). \quad (4.15)$$

Она может быть вычислена с помощью простого расщепления корреляционных функций, входящих в (4.14):

$$\begin{aligned} \langle h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger B^\dagger(\mathbf{k}, \mathbf{q}) h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) B(\mathbf{k}, \mathbf{q}; t) \rangle \approx \\ \approx \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \langle h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) \rangle \langle B^\dagger(\mathbf{k}, \mathbf{q}) B(\mathbf{k}, \mathbf{q}; t) \rangle. \end{aligned}$$

Одночастичные корреляторы фермионных и бозонных операторов выражаются с помощью спектральной теоремы через соответствующие функции Грина. В результате приходим к выражению для собственнo-энергетической части дырки:

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega_1}{\pi} \frac{d\omega_2}{\pi} \times \\ \times \frac{\exp[\beta(\omega_1 + \omega_2)] + 1}{[\exp(\beta\omega_1) + 1][\exp(\beta\omega_2) - 1]} \frac{\text{Im} \langle \langle h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} | h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \rangle \rangle_{\omega_1}}{\omega - \omega_1 - \omega_2 + i\delta} \times \\ \times \left\{ \mathcal{M}_{\mathbf{q}}^2(\mathbf{k}) \text{Im} \langle \langle \beta_{\mathbf{q}} | \beta_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle \rangle_{\omega_2} + \mathcal{M}_{\mathbf{q}}'^2(\mathbf{k}) \text{Im} \langle \langle \beta_{-\mathbf{q}}^\dagger | \beta_{-\mathbf{q}} \rangle \rangle_{\omega_2} \right\}. \quad (4.16) \end{aligned}$$

Если пренебречь собственнo-энергетическими частями в функции Грина спиновых волн  $\langle \langle \beta_{\mathbf{q}} | \beta_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle \rangle_{\omega}$ , то имеем

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle \beta_{\mathbf{q}} | \beta_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle \rangle_{\omega} &= \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}^0), \\ -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle \beta_{-\mathbf{q}}^\dagger | \beta_{-\mathbf{q}} \rangle \rangle_{\omega} &= -\delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}}^0). \end{aligned}$$

Подставим эти выражения в (4.16) и запишем собственнo-энергетическую часть дырок в следующей форме [49]:

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \\ = \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{M}_{\mathbf{q}}^2(\mathbf{k}) \int d\varepsilon \frac{A(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \varepsilon)}{\omega - \varepsilon - \omega_{\mathbf{q}}^0 + i\delta} [1 - f(\varepsilon) + N(\omega_{\mathbf{q}}^0)] + \\ + \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{M}_{\mathbf{q}}'^2(\mathbf{k}) \int d\varepsilon \frac{A(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \varepsilon)}{\omega - \varepsilon + \omega_{\mathbf{q}}^0 + i\delta} [f(\varepsilon) + N(\omega_{\mathbf{q}}^0)]. \quad (4.17) \end{aligned}$$

Здесь

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp(\beta\varepsilon) + 1}, \quad N(\omega) = \frac{1}{\exp(\beta\omega) - 1}.$$

Поскольку, согласно (4.10), спектральная плотность определяется через точную функцию Грина дырок,

последняя должна находиться самосогласованным образом из уравнения (4.17). Чтобы сделать это уравнение замкнутым, мы должны добавить к нему уравнение на химический потенциал

$$\delta = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int d\varepsilon A(\mathbf{k}, \varepsilon) f(\varepsilon). \quad (4.18)$$

Как показано в [49], при  $T = 0$  результат (4.17) переходит в соответствующий результат работ [47, 48], полученный для причинных функций Грина с помощью суммирования определенного класса диаграмм. С точки зрения теории возмущений, результаты [47, 48], равно как и уравнение (4.17), соответствуют самосогласованному борновскому приближению (SCBA). Если в правую часть уравнения (4.17) подставить спектральную плотность соответствующей затравочной функции Грина, мы имели бы борновское приближение, соответствующее второму порядку по амплитуде взаимодействия. Замена затравочной спектральной плотности на точную составляет, как раз, SCBA-приближение. Оно совершенно необходимо для нашей проблемы магнитного полярона, поскольку амплитуда взаимодействия не содержит малого параметра.

В формуле (4.17) первый и второй члены соответствуют процессам испускания и поглощения магнона дыркой.

### 4.3. Результаты численных расчетов

Численное решение системы уравнений (4.17), (4.18) с учетом соотношения (4.10) и уравнения Дайсона было выполнено для кластера квадратной решетки ( $z = 4$ ) размером  $16 \times 16$  [48, 49]. Результаты для изолированной дырки при  $T = 0$  полностью согласуются с ранее полученными в работе [48]. Ниже представлены результаты для спектральной плотности при нуле температур для двух концентраций дырок и при двух значениях волнового вектора:  $(\pi/2, \pi/2)$  и  $(0, 0)$ , — в центре и на границе магнитной зоны Бриллюэна (рис. 5).

На рисунке 6 для обоих значений  $\mathbf{k}$  виден узкий квазичастичный пик в окрестности  $\omega = 0$  и широкий некогерентный фон, простирающийся вплоть до энер-

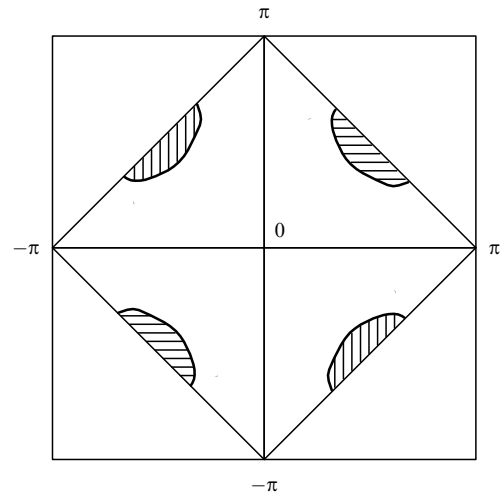
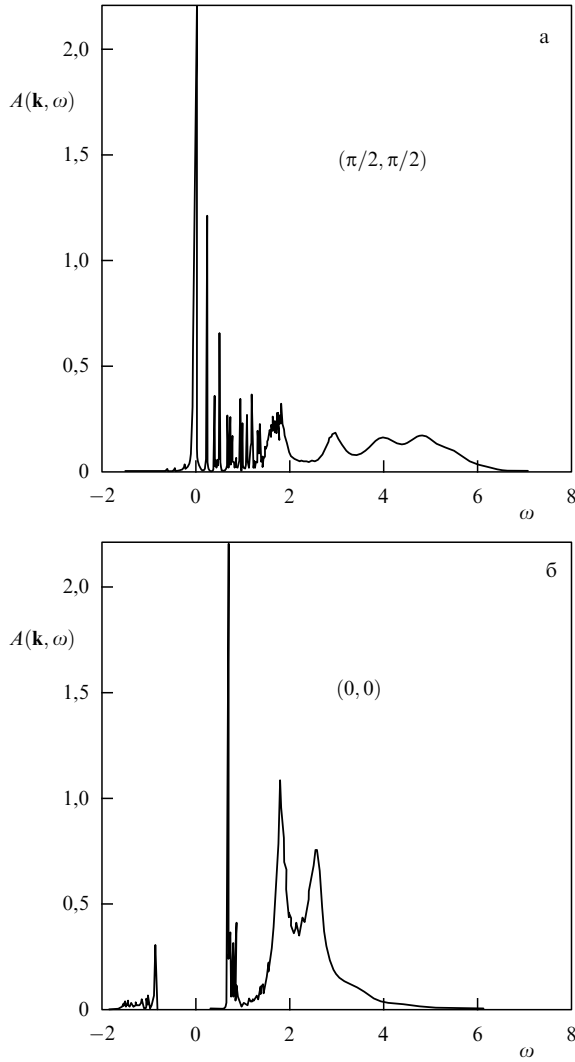


Рис. 5. Зона Бриллюэна для квадратной решетки (штрих) и для антиферромагнитной неелевской структуры (сплошная линия).



**Рис. 6.** Спектральная функция  $A(\mathbf{k}, \omega)$  для  $J/t = 0.4$ ,  $T = 0$ ,  $\delta = 3\%$  при  $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$  (а) и  $\mathbf{k} = (0, 0)$  (б). Все энергии здесь и далее выражены в единицах  $t$ ; частоты отсчитываются от уровня химического потенциала  $\mu$  [49].

гий, примерно равных  $7t$ . Конечная ширина квазичастичного пика связана с конечностью мнимой добавки  $\eta$  к частоте, которая в данном расчете была положена равной  $0.01t$ . Эти результаты соответствуют следующей форме дырочной плотности состояний:

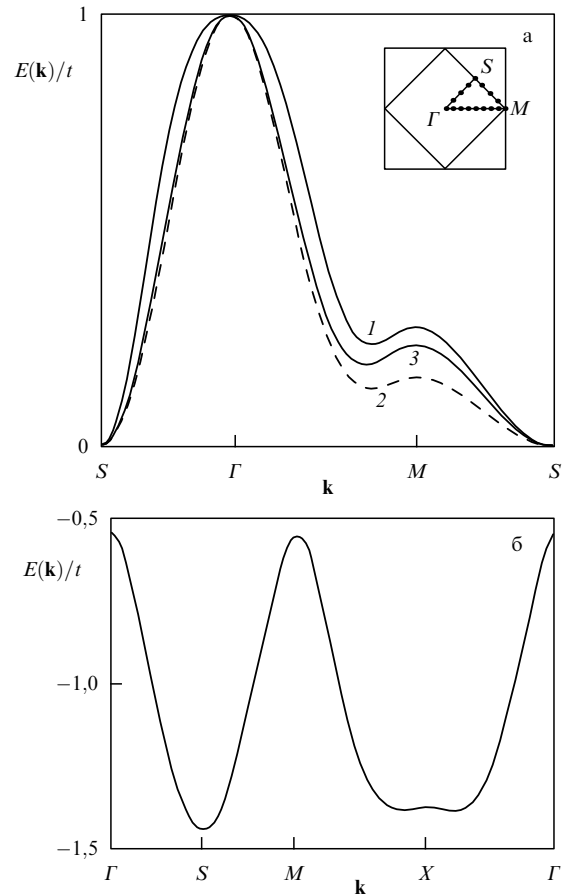
$$A(\mathbf{k}, \omega) = Z_{\mathbf{k}} \delta(\omega - E(\mathbf{k}) + \mu) + A_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega), \quad (4.19)$$

где  $Z_{\mathbf{k}}$  — интенсивность квазичастичного состояния (определяется как интеграл по площади пика), а  $A_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega)$  — некогерентная часть спектра. Для  $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$  при  $\delta = 3\%$   $Z_{\mathbf{k}} \approx 0.353$ , что несколько выше значения  $Z_{\mathbf{k}} = 0.329$  для очень низкой концентрации дырок, соответствующей изолированной примеси. При увеличении концентрации до 10% появляются новые черты в спектре для состояния с  $\mathbf{k} = 0$ : при  $\omega < 0$  возникает область некогерентных состояний, а интенсивность когерентного пика, соответственно, снижается. Однако для  $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$  интенсивность когерентного пика меняется мало. Она возрастает до значения  $Z_{\mathbf{k}} = 0.369$ . Незначительный рост этого пика сохра-

няется при дальнейшем увеличении концентрации:  $Z_{\mathbf{k}} = 0.373$  для  $\delta = 10\%$ . Расчеты, проведенные для различных значений  $\mathbf{k}$ , подтверждают, что точка  $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$  соответствует минимуму энергии, поэтому рассмотрим квазичастичный пик при  $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$  более детально. На рисунке 7 приведены вычисленные дисперсионные кривые изолированной дырки при различных значениях обменного интеграла  $J$  [39] (рис. 7а). Главной чертой полученного решения является локальный максимум в точке  $(0, \pi)$  и абсолютный минимум в точке  $(\pi/2, \pi/2)$ . На линии  $\Gamma M$  виден минимум, который, однако, оказывается седловой точкой, если рассматривать дисперсию в перпендикулярном к этой линии направлении. Минимум в точке  $(\pi/2, \pi/2)$  соответствует одному из четырех карманов поверхности Ферми. Численные результаты на рис. 7а были аппроксимированы функцией

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 + x_1(\cos k_x + \cos k_y)^2 + x_2(\cos 2k_x + \cos 2k_y), \quad (4.20)$$

которая соответствует переносу электрона между ближайшими и следующими за ближайшими соседями одной и той же неэлементарной подрешетки. Подгоночные коэффициенты возрастают с ростом величины  $J/t$  до значений порядка 1. Так, для  $J/t = 0.3$  оказывается, что



**Рис. 7.** Дисперсионные кривые для магнитного поларона, вычисленные (а) в SCBA-приближении при значениях параметров:  $J/t = 0.01$  (кривая 1),  $J/t = 0.8$  (кривая 2) и в пределе больших  $J$  (кривая 3) [39]; (б) в канонической теории магнитного поларона для  $J/t = 0.4$  [68].

$\varepsilon_0/t = -2,305$ ,  $x_1/t = 0,131$ ,  $x_2/t = 0,027$ . Дисперсионное соотношение показывает, что дырка образует зону, расположенную у нижнего края затравочной зоны, ширины порядка обменного взаимодействия, как и ожидалось. Результаты, выраженные дисперсионной кривой, эквивалентны картине изоэнергетических линий (рис. 8), из которой явно видны замкнутые участки поверхности Ферми (карманы), центрированные в точках  $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ .

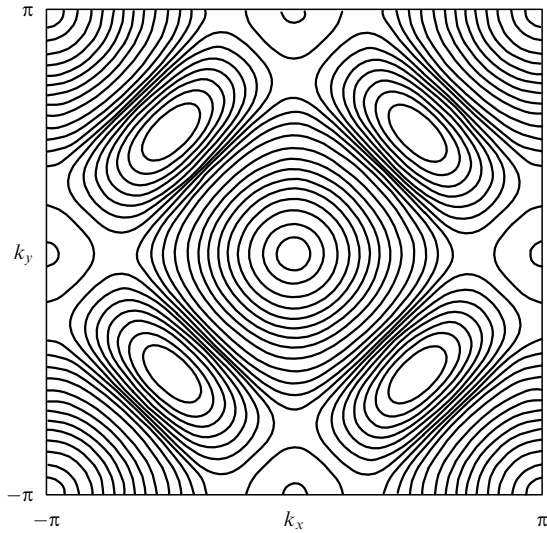


Рис. 8. Изоэнергетические линии в пределе больших значений  $J$  [39].

Вернемся теперь к работе [49], в которой расчеты были выполнены также для конечной температуры. Отметим сначала, что положение самого квазичастичного пика  $\omega_{\text{QR}}(\mathbf{k}^*) = E(\mathbf{k}^*) - \mu$  в точке  $\mathbf{k}^* = (\pi/2, \pi/2)$  линейно возрастает с ростом концентрации:

$$\omega_{\text{QR}}(\mathbf{k}^*) \approx -1,5\delta J \quad (\delta > 1,5\%),$$

причем  $\omega_{\text{QR}}(\mathbf{k}^*) < 0$ . Величину  $\mu - E(\mathbf{k}^*)$  следует отождествить с энергией Ферми для квазичастиц. Определим температуру вырождения квазичастичного газа:

$$T_d = \mu - E(\mathbf{k}^*) = 1,5\delta J \quad (4.21)$$

(постоянная Больцмана положена равной 1). Следует ожидать различное поведение квазичастичного газа при  $T \ll T_d$  и  $T > T_d$ .

Анализ расчетов, выполненных для разных температур, не показывает существенного изменения формы спектра вплоть до  $T \sim T_d$ . При заданном  $\delta$  единственным температурным эффектом является равномерный сдвиг  $A(\mathbf{k}, \omega)$  к большим значениям  $\omega$  для всех  $\mathbf{k}$ . В частности, оказывается, что положение квазичастичного пика для  $\mathbf{k} = \mathbf{k}^*$  становится близко к значению  $\omega_{\text{QR}} = 0$  для  $T \lesssim T_d$ . При более высоких температурах острая структура спектра сглаживается, но квазичастичные пики сохраняются и лишь незначительно снижаются с ростом  $T$ . Такая же картина имеет место и для других концентраций дырок. Таким образом, оказывается, что в широком интервале концентраций дырок и температур спектральная плотность  $A(\mathbf{k}, \omega)$  для состояния  $\mathbf{k} = \mathbf{k}^*$  содержит узкий квазичастичный пик, интенсивность

которого слабо меняется с ростом  $\delta$  и  $T$ . Положение пика сдвигается в сторону больших частот с увеличением температуры.

Исследуем теперь функцию распределения частот по импульсам

$$N(\mathbf{k}) = \int d\omega A(\mathbf{k}, \omega) f(\omega). \quad (4.22)$$

В общем случае в нее дают вклад когерентные и некогерентные состояния с  $\omega < 0$  (химический потенциал  $\mu$  при выбранной системе отсчета энергии равен нулю). Для понимания природы некогерентного вклада в  $A(\mathbf{k}, \omega)$  полезно проанализировать мнимую часть собственной энергии дырок

$$\Gamma(\mathbf{k}, \omega) = -\text{Im} \Sigma(\mathbf{k}, \omega).$$

Результаты расчета ее для концентрации дырок 3% представлены на рис. 9. Из определения (4.10) запишем

$$A(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(\mathbf{k}, \omega)}{[\omega - \text{Re} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) + \mu]^2 + [\Gamma(\mathbf{k}, \omega)]^2}. \quad (4.23)$$

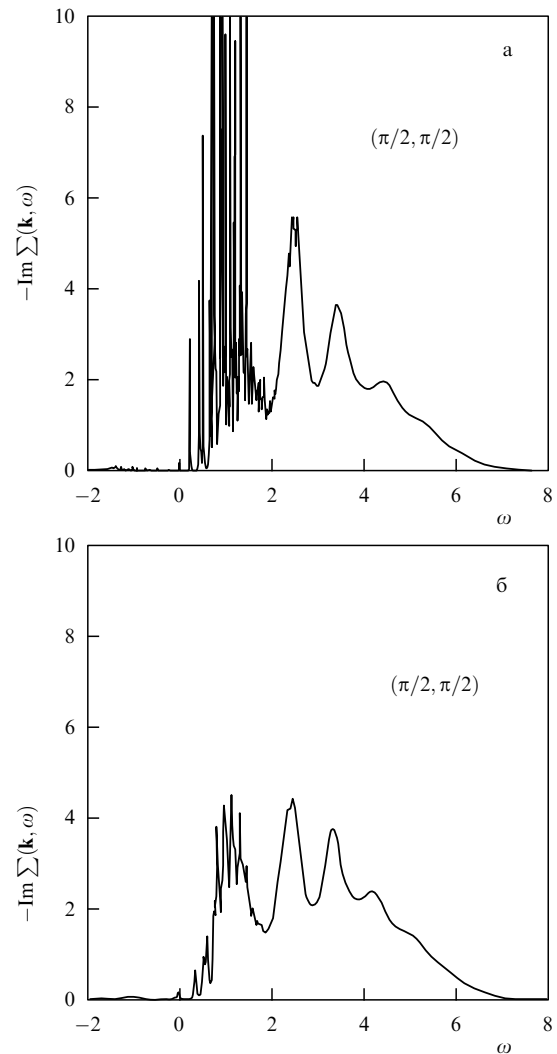


Рис. 9. Мнимая часть собственной энергии дырок для  $\delta = 3\%$  при  $T = 0$  (а) и  $T = 0,1t$  (б) [49].

Положение максимума этой функции  $\omega$  (тем более острого, чем меньше  $\Gamma$ ) определяется из уравнения

$$E(\mathbf{k}) = \text{Re } \Sigma(\mathbf{k}, E(\mathbf{k})) - \mu. \quad (4.24)$$

Для состояния  $\mathbf{k} = \mathbf{k}^*$  величины  $E(\mathbf{k}^*) - \mu$  при  $\delta = 3\%$  близки к нулю, и в этой области, как видно из рис. 9,  $\Gamma = 0$ , поэтому (4.23) сводится к функции  $Z_{\mathbf{k}^*} \delta(\omega - \omega_{\text{QP}}(\mathbf{k}^*))$ , где

$$Z_{\mathbf{k}} = \left[ 1 - \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re } \Sigma(\mathbf{k}, \omega) \right]_{\omega=E(\mathbf{k})}^{-1}. \quad (4.25)$$

С другой стороны, в области  $\omega > \omega_{\text{QP}}(\mathbf{k})$   $\Gamma(\mathbf{k}, \omega) \gg |\omega - \text{Re } \Sigma(\mathbf{k}, \omega) + \mu|$ , поэтому из (4.23) следует приближенное выражение для спектральной плотности некогерентных состояний

$$A_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) \approx \frac{1}{\pi \Gamma(\mathbf{k}, \omega)}. \quad (4.26)$$

Вернемся теперь к выражению (4.22) для  $N(\mathbf{k})$ . Для точек, далеких от  $\mathbf{k}^*$ , квазичастичные пики лежат при  $\omega > 0$ , поэтому  $N(\mathbf{k})$  определяется вкладом от некогерентных состояний с  $\omega < 0$ , причем интегральный вклад от них порядка  $\delta$  (рис. 6б). Таким образом, вдали от  $\mathbf{k}^*$   $N(\mathbf{k}) \sim \delta \ll 1$ . Для точки  $\mathbf{k} = \mathbf{k}^*$  некогерентный вклад при  $\omega < 0$  отсутствует, а с другой стороны, квазичастичный пик лежит при  $\omega < 0$  (см. рис. 6). Он и определяет  $N(\mathbf{k}) \approx Z_{\mathbf{k}}$  вблизи  $\mathbf{k} = \mathbf{k}^*$ . За пределами окрестности точки  $\mathbf{k}^*$   $\omega_{\text{QP}}(\mathbf{k}) > 0$ , и поэтому  $N(\mathbf{k})$  становится малым. Из этих рассуждений следует, что квазичастицы распределены в  $\mathbf{k}$ -пространстве вблизи четырех карманов с центрами  $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ . Интегральные объемы каждого кармана должны быть порядка  $\delta$ .

Распределение  $N(\mathbf{k})$  при концентрации дырок 3 % при  $T = 0$  показано на рис. 10. Отсутствие скачка в  $N(\mathbf{k})$ , соответствующего поверхности Ферми, связано с конечностью минимой добавки  $\eta$ , использованной в численных расчетах. При концентрации 10 % распределение существенно меняется: возрастает хребет в  $N(\mathbf{k})$  вдоль границ магнитной зоны Бриллюэна. При  $\delta = 20\%$  эта хребетная структура сохраняется, но формируются также пики около точек типа  $(\pi, 0)$ , при этом фон некогерентных состояний существенно не меняется. Таким образом, с ростом концентрации дырок проявляется тенденция к переходу от состояний, образующих карманы в окрест-

ности точки  $(\pi/2, \pi/2)$ , к карманам в окрестности точки типа  $(\pi, 0)$ .

При конечных температурах происходит сильное занижение высоты когерентных пиков в  $N(\mathbf{k})$ . Так, расчет для  $\delta = 3\%$  при  $T \approx 0,017t > T_d$  показывает, что интенсивность пиков в точках  $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$  снижается в десять раз, при этом существенно возрастает  $N(\mathbf{k})$  повсюду за пределами этих точек. Следует подчеркнуть, что размытие четырехкарманной структуры  $N(\mathbf{k})$  с температурой обусловлено не уширением квазичастичных пиков, как можно было бы ожидать, а температурным сдвигом квазичастичных энергий  $\omega_{\text{QP}}(\mathbf{k})$ . Как обсуждалось выше, при  $\delta = 3\%$  и  $T = 0$   $\omega_{\text{QP}}(\mathbf{k}) < 0$ , и квазичастичные состояния формируют пики в  $N(\mathbf{k})$  в окрестности точки  $\mathbf{k}^*$ . Однако при  $T > T_d$  квазичастичные пики появляются выше уровня химического потенциала, поэтому  $\omega_{\text{QP}}(\mathbf{k}) > 0$ . Фермиевский фактор в формуле (4.22) ведет к сильному подавлению вклада когерентных состояний в  $N(\mathbf{k})$  и исчезновению четырехкарманной структуры. Таким образом, общим результатом проведенных численных расчетов [49] является установление того факта, что спектральная плотность  $A(\mathbf{k}, \omega)$  слабо зависит от концентрации дырок и температуры, однако функция распределения по импульсам меняется резко при увеличении температур до  $T > T_d \approx 1,5\delta J$ .

Следует обсудить границы применимости теории магнитного полярона [47–55], возникающие из-за использования ряда приближений. Во-первых, предполагается дальний антиферромагнитный порядок. В то же время известно (см. ниже), что он исчезает при достаточно низкой концентрации дырок, порядка нескольких процентов. При больших концентрациях, однако, остается значительный ближний порядок, характеризуемый корреляционной длиной  $\xi$ . Такое состояние  $t$ - $J$ -модели принято называть спиновой жидкостью. Численные расчеты [43] показывают, что положение минимума квазичастичной зоны при  $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$  не зависит от того, что представляет собой система: неелевский антиферромагнетик или спиновую жидкость. В работе [50] было показано, что минимум энергии в точке  $(\pi/2, \pi/2)$  сохраняется до тех пор, пока  $\xi \gg R_p$ , где  $R_p$  — поляронный радиус. Только при  $\xi \sim R_p$  возникает картина, соответствующая "свободному" распространению дырки по решетке с большой поверхностью Ферми, близкой к границам магнитной зоны Бриллюэна.

Другое существенное приближение — игнорирование перенормировки магнетонного спектра. Однако при больших  $\delta$  следует ожидать большой перенормировки энергии спиновых волн [57]. Такая перенормировка может быть учтена в полностью самосогласованной теории не только для дырочных, но и для спин-волновых состояний. Таким образом, представленная теория магнитного полярона справедлива вплоть до умеренных концентраций дырок  $\delta$ , когда система находится в режиме спиновой жидкости, но перенормировка магнетонного спектра еще не существенна.

Мы уже отмечали, что SCBA для изолированной примеси дает результаты, хорошо согласующиеся с численными расчетами для малых кластеров. Отметим, что успех этого приближения обусловлен тем, что перенормировка вершинных частей гамильтониана (4.7) оказывается не существенной. Этот вопрос специально был исследован в работах [45, 48].

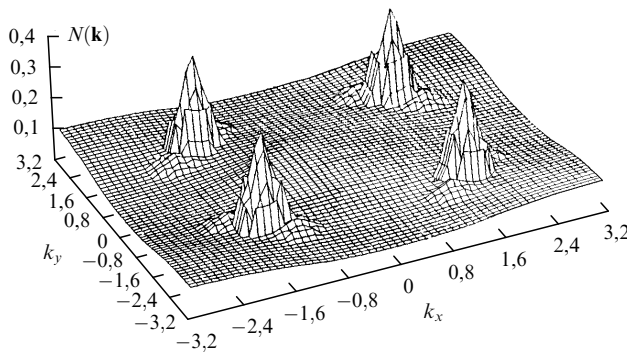


Рис. 10. Функция распределения дырок  $N(\mathbf{k})$  в  $\mathbf{k}$ -пространстве для  $\delta = 3\%$  при  $T = 0$  [49].

Магнитный полярон представляет собой сложное образование, состоящее из собственно дырки и окружающей ее деформации неелевской структуры. Пространственное распределение этой деформации исследовалось в работе [57] для нуля температур, где вычислялась корреляционная функция вида

$$N_{\mathbf{R}} = \langle h_0^\dagger h_0 S_{\mathbf{R}}^z \rangle. \quad (4.27)$$

Она как раз описывает корреляцию между дыркой, находящейся в узле  $\mathbf{0}$ , и спиновыми отклонениями на узле  $\mathbf{R}$ . В рамках спин-волнового приближения для величины  $N_{\mathbf{R}}^z$  была найдена асимптотика функции (4.27):

$$N_{\mathbf{R}} = 8[\gamma_{\mathbf{k}}^2 + 2(\mathbf{v}_{\mathbf{k}}\mathbf{n})^2] \frac{t^2}{JR^2}, \quad (4.28)$$

где  $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \nabla \gamma_{\mathbf{k}}$  и  $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$ . Таким образом, спиновая деформация вокруг дырки спадает по степенному закону  $N_{\mathbf{R}} \sim 1/R^2$ , и поэтому понятия поляронного радиуса не существует. Расчеты величины (4.27) с помощью волновых функций SCBA [58] для ближайших к дырке узлов находятся в хорошем соответствии с результатами точной диагонализации малых кластеров.

#### 4.4. Неферми-жидкостное поведение дырок

Мы обсудим результаты SCBA-приближения, пренебрегая перенормировкой спин-волнового спектра. Самосогласованный подход с учетом взаимной перенормировки спектров дырок и спиновых волн был развит в работах [52–54, 59]. В них функции Грина дырок  $G$  и магнонов  $D$  определяются аналогичными соотношениями, в частности,

$$\langle\langle \beta_{\mathbf{k}}(t) | \beta_{\mathbf{k}}^\dagger(t') \rangle\rangle = -i\Theta(t-t') \langle [\beta_{\mathbf{k}}(t), \beta_{\mathbf{k}}^\dagger(t')] \rangle. \quad (4.29)$$

С помощью гамильтониана (4.7) для магнонной функции Грина составляется уравнение движения и решается аналогичным образом, как и для дырок. Запишем уравнения Дайсона для функций Грина:

$$G(\mathbf{k}, \omega) = [\omega - \Sigma(\mathbf{k}, \omega) + \mu]^{-1}, \quad (4.30)$$

$$D(\mathbf{k}, \omega) = [\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 - \Pi(\mathbf{k}, \omega)]^{-1}, \quad (4.31)$$

где собственно-энергетические части  $\Sigma$  и  $\Pi$  определяются выражениями [52]

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega_1}{\pi} \frac{d\omega_2}{\pi} \left[ \tanh \frac{\omega_1}{2T} + \coth \frac{\omega_2}{2T} \right] \mathcal{M}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2(\mathbf{k}) \times \frac{\text{Im } G(\mathbf{q}, \omega_1) \text{Im } D(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega_2)}{\omega - \omega_1 - \omega_2 + i\delta}, \quad (4.32)$$

$$\Pi(\mathbf{k}, \omega) = - \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega_1}{\pi} \frac{d\omega_2}{\pi} \left[ \tanh \frac{\omega_1}{2T} - \tanh \frac{\omega_2}{2T} \right] \mathcal{M}_{\mathbf{k}}^2(\mathbf{q}) \times \frac{\text{Im } G(\mathbf{q}, \omega_1) \text{Im } G(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega_2)}{\omega - \omega_1 + \omega_2 + i\delta}. \quad (4.33)$$

Нетрудно проверить, что выражение (4.32) для собственно-энергетической части дырок является другой формой записи (4.16). Оба выражения получены в

SCBA-приближении и соответствуют процессам испускания дыркой спиновой волны или распаду спиновой волны на электрон-дырочную пару.

Для оценки выражений (4.32) и (4.33) учтем, что дырочный спектр двумерного антиферромагнетика имеет четыре минимума в точках  $\mathbf{k}^* = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$  и в окрестности минимума может быть аппроксимирован квадратичной формой. Если пренебречь анизотропией спектра (хотя, как показывают численные расчеты, она велика), то имеем для  $\mathbf{k}$ , лежащего в окрестности минимума:

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_i^*) + \frac{1}{2m} \mathbf{k}'^2. \quad (4.34)$$

Функцию Грина дырок в полюсном приближении запишем в виде

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{Z_{\mathbf{k}}}{\omega - E(\mathbf{k}) + \mu + i\delta}, \quad (4.35)$$

где  $Z_{\mathbf{k}} \sim J/t$  должна остаться малой величиной, а эффективная масса дырки  $m \sim t/J$  — большой. Оценка выражения (4.32) с помощью функции Грина спиновых волн нулевого приближения дает [60]

$$Z_{\mathbf{k}}^2 \approx \frac{2}{\pi} \left( \frac{J}{t} \right)^2. \quad (4.36)$$

Поскольку величины импульсов  $\mathbf{k}'$  и  $\mathbf{q}$  малы, можно аппроксимировать затравочную вершинную часть выражением

$$\mathcal{M}_{\mathbf{q}}^2(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^4 \mathcal{M}_{\mathbf{q}}^2(\mathbf{k}_i) \approx \frac{t^2}{2\sqrt{2}} [qk'^2 - 2\sqrt{2}(\mathbf{q}\mathbf{k}') + 2q]. \quad (4.37)$$

С учетом приближений (4.34)–(4.47) имеем оценку для (4.33) [52]:

$$\text{Im } \Pi(\mathbf{k}, \omega) = \begin{cases} -\frac{Z_{\mathbf{k}}^2 t^2 m k_F}{16\sqrt{2}\pi} \left( \frac{\omega}{T} \right), & \omega < T, \\ -\frac{Z_{\mathbf{k}}^2 t^2 m k_F}{8\sqrt{2}\pi}, & \omega > T. \end{cases} \quad (4.38)$$

Для вещественной части  $\Pi(\mathbf{k}, \omega)$  получаем при малых импульсах и энергии передачи:

$$\text{Re } \Pi(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{Z_{\mathbf{k}}^2 t^2 m k}{8\sqrt{2}\pi} \left( 1 + \frac{k_F}{2} \right) + \frac{Z_{\mathbf{k}}^2 t^2 m^2}{8\pi} \omega. \quad (4.39)$$

Запишем теперь приближенное выражение для мнимой части магнонной функции Грина в двух предельных случаях соотношения частоты и температуры [52]:

$$\text{Im } D(\mathbf{k}, \omega) \approx \begin{cases} -\frac{Ck_F}{\{(1-2\sqrt{2}mC)\omega - [\sqrt{2}J - C(2+k_F)]k\}^2} \frac{\omega}{T}, & \omega < T, \\ -\frac{2Ck_F}{\{(1-2\sqrt{2}mC)\omega - [\sqrt{2}J - C(2+k_F)]k\}^2}, & \omega > T, \end{cases}$$

где  $C = Z_{\mathbf{k}}^2 t^2 m / 16\pi\sqrt{2}$ . Используя эти соотношения в формуле (4.32) для  $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ , получаем оценки для мнимой



части собственной энергии дырки [52]:

$$\text{Im } \Sigma(\mathbf{k}, \omega) \approx$$

$$\approx \begin{cases} -\frac{mk_F J t}{2\sqrt{2} \pi^{5/2} [\pi^2 - mJ(2 + k_F)]^2} \omega, & \omega > T, \\ -\frac{mk_F J t}{2\sqrt{2} \pi^{5/2} [\pi^2 - mJ(2 + k_F)]^2} (1 + \ln 2) T, & \omega < T. \end{cases} \quad (4.40)$$

Полученные оценки показывают неферми-жидкостное поведение дырок (в теории ферми-жидкости затухание квазичастиц порядка  $\omega^2$ ). Поведение затухания с частотой и температурой, описываемое формулами (4.40) и (4.41), соответствует маргинальной ферми-жидкости [61]. Результат (4.41) немедленно приводит к линейной зависимости сопротивления от температуры, характерной для ВТСП-материалов.

Оценки (4.38) и (4.40) выполнены в полюсном приближении для функции Грина. В то же время выше было показано, что в спектре дырок-квазичастиц присутствует широкая область некогерентных состояний. Впервые появление такой области ниже квазичастичного спектра было обнаружено в работе [53]. Эта часть спектра слабо зависит от импульса, хотя и показывает довольно специфическую зависимость от частоты (см. рис. 9). В работе [53] применяется аппроксимация некогерентной части спектра в виде (см. соотношение (4.19))

$$A_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2\Gamma} \Theta(\Gamma - |\omega|), \quad (4.41)$$

где  $\Gamma \approx zt$  — полуширина затравочной полосы. Поскольку  $\Gamma \gg T$  и  $J > T$ , для частот  $\omega$ , меньших предельной частоты спин-волнового спектра, включение некогерентной части в спектральную плотность несущественно меняет результаты (4.40), характеризующие поведение дырок [52].

Однако вклад некогерентных состояний в оператор поляризации  $\Pi(\mathbf{k}, \omega)$  спиновых волн весьма существен. Из выражения (4.33) видно, что вклад в  $\Pi(\mathbf{k}, \omega)$  дают три вида процессов перехода: между когерентными состояниями ( $\Pi_{\text{cc}}$ ), некогерентными ( $\Pi_{\text{ii}}$ ) и смешанные переходы ( $\Pi_{\text{ic}}$ ). Оценки показывают [53], что

$$\Pi_{\text{cc}} \approx -\frac{J}{t^2} \delta, \quad \Pi_{\text{ic}} \approx \frac{\delta}{t}, \quad \Pi_{\text{ii}} \approx \frac{\delta}{2t} \ln \frac{zt}{2J}. \quad (4.42)$$

Таким образом, действительно, в поляризуемость максимальный вклад дают некогерентные состояния. Благодаря конечной поляризуемости происходит перенормировка спин-волнового спектра. С ростом концентрации дырок частота спиновых волн (при фиксированном  $\mathbf{q}$ ) уменьшается, и при некоторой концентрации  $\delta_c$  обращается в нуль. Численные расчеты, проведенные в работах [53, 54], показывают, что  $\delta_c$  составляет несколько процентов. В точке  $\delta = \delta_c$  происходит разрушение дальнего антиферромагнитного порядка. Вопросы спиновой динамики в двумерной антиферромагнитной системе будут детально обсуждаться в следующем разделе, где также будет вычислена более точно, чем в [53, 54], критическая концентрация дырок  $\delta_c$ . В этом же разделе мы продолжим общее исследование дырочного спектра.

#### 4.5. Ферроны

При уменьшении  $J$  тенденция к образованию антиферромагнитного состояния ослабевает, и при  $J = 0$ , согласно теории Нагаока, система должна стать ферромагнитной. Возникает вопрос о том, каким образом совершается этот переход: непосредственно из одной фазы в другую или через некоторую промежуточную (например, смешанную) фазу? Частью этой общей проблемы является вопрос о структуре одночастичного дырочного состояния при малых значениях  $J$ . Давно была высказана идея о том, что дырка, внедренная в антиферромагнитную матрицу, может образовать вокруг себя область ферромагнитного порядка, поскольку это дает выигрыш в кинетической энергии, который при малой величине обменного взаимодействия может превысить проигрыш в обменной энергии [62]. Такой объект — дырка в антиферромагнитной матрице, одетая ферромагнитно поляризованной областью, — был назван ферроном [63]. Энергетическая выгодность феррона была проанализирована в изинговском пределе обменного взаимодействия. Учет поперечных компонент спина, как и в задаче о магнитном поляроне, должен приводить к конечной подвижности феррона и тем самым формировать зону квазичастичных состояний при малых  $J$ .

Эта задача была исследована в работах [64, 65]. Авторы исходили из гамильтониана (4.7), описывающего дырку, взаимодействующую с антиферромагнитной матрицей в спин-волновом приближении. Поскольку суммарный спин коммутирует с гамильтонианом, собственные функции одночастичного состояния можно характеризовать значением суммарного спина  $S^z = 1/2, \dots$ . Он складывается из спина  $1/2$  дырки и перевернутых (относительно неелевского состояния) спинов ближайших соседей, а также соседей следующих порядков. Поскольку для квадратной решетки число ближайших соседей четно, возможны, в силу симметрии, только нечетные значения  $S^z = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ . В соответствии с заданным значением  $S^z$  волновая функция одночастичного состояния записывается в виде суперпозиции волновых функций с различным числом спиновых отклонений на узлах. В работе [64] собственные функции и значения энергии были найдены для интервала  $0,01 < J/t < 1,00$  по методу Ланчеса с числом последовательных шагов порядка 100. Это обеспечивает точность вычисления энергии до 2 %. Результаты расчета энергии одночастичных состояний для  $S^z = 1/2$  и  $3/2$  при  $J/t = 0,15$  приведены на рис. 11.

Зонный спектр для  $S^z = 1/2$  имеет четыре минимума в точках  $X$  с  $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ , что согласуется с вычислениями, представленными выше. Вблизи этих минимумов спектр имеет квазиодномерный характер: эффективная масса в направлении, перпендикулярном границам магнитной зоны Бриллюэна, на порядок меньше эффективной массы в параллельном направлении. В противоположность случаю  $S^z = 1/2$  для  $S^z = 3/2$  спектр имеет минимум в точке  $\Gamma$ , а максимумы лежат на линиях магнитной зоны Бриллюэна. Нетрудно видеть, что эти спектры перекрываются, и есть область  $\mathbf{k}$ -пространства, где состояния с  $S^z = 3/2$  лежат ниже по энергии состояния с  $S^z = 1/2$ . Только для значений  $J/t > 0,92$  основное состояние имеет спин  $S^z = 1/2$ . Для меньших  $J/t$  в некоторых точках зоны Бриллюэна энергия состояния с  $S^z = 1/2$  ниже, чем для  $S^z = 3/2$ . Вблизи  $J/t = 0,053$  происходит смена основного состояния  $\mathbf{k} =$

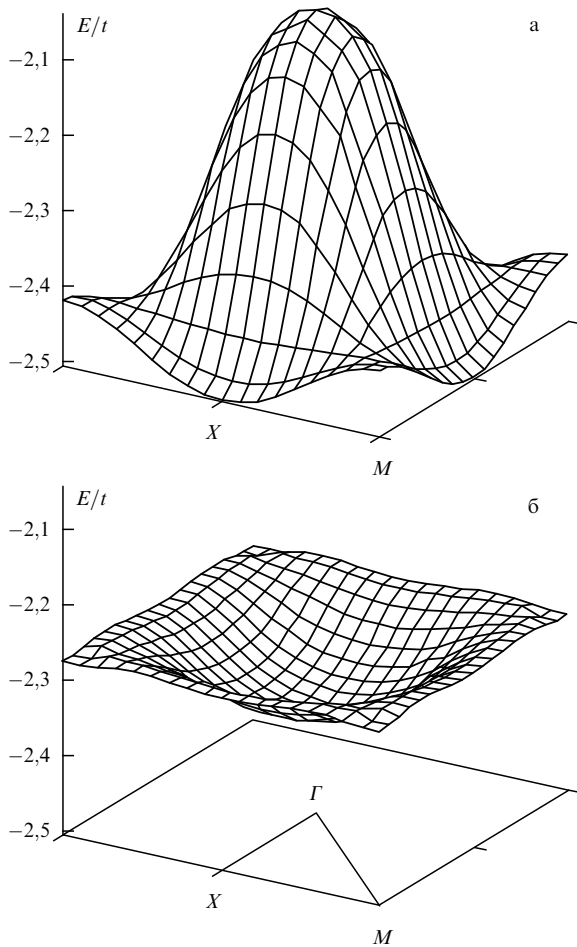


Рис. 11. Зонный спектр дырок в магнитной зоне Бриллюэна для двух значений суммарного спина: (а)  $S^z = 1/2$  и (б)  $S^z = 3/2$  [64].

$= (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$  и  $S^z = 1/2$  на основное состояние  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  и  $S^z = 3/2$ . Расчеты показывают, что при заданном  $\mathbf{k}$  энергия растет монотонно с ростом  $S^z$ , поэтому, чем больше  $S^z$ , тем меньшее значение  $J/t$  требуется, чтобы соответствующее состояние было основным. Итак, показано, что дырочное состояние со значением суммарного спина  $S^z = 1/2$  является основным при  $J/t > 0,053$ . В интервале  $0,02 < J/t < 0,053$  это состояние имеет большую энергию, чем состояние с  $S^z = 15/2$ , а при  $J/t < 0,02$  основное состояние имеет  $S^z > 15/2$ . Структура феррона, т.е. пространственное распределение отклоненных спинов вблизи дырки, с учетом симметрии квадратной решетки, представлена в работе [60] для нескольких симметричных точек зоны Бриллюэна. По мере уменьшения  $J$  величина  $S^z$ , а вместе с ней и радиус феррона, растет. Эти числовые результаты отражают стремление к пределу  $J \rightarrow 0$ , когда весь объем вокруг дырки заполнен ферромагнитно ориентированными спинами, что и требует теорема Нагаока [66].

#### 4.6. Каноническая форма теории магнитного полярона

Эффективный гамильтониан в форме (4.5) или (4.7), описывающий дырку, движущуюся в антиферромагнитной матрице, имеет структуру гамильтониана Фрелиха для электрон-фононной модели металла. В случае сильной связи электронов с решеткой гамильтониан Фрелиха используется в задаче полярона малого радиуса, осно-

ванной не на теории возмущений, а на использовании некоторого канонического преобразования (см., например, [67]). Этот подход может быть применен и к гамильтониану (4.5), в котором роль фононов играют магныны [68–70]. Мы обозначим здесь основные этапы такого канонического подхода в теории магнитного полярона.

Отметим прежде всего, что в задаче существует несколько интегралов движения, а именно, сохраняются число фермионов

$$\mathcal{N} = \sum_i h_i^\dagger h_i \quad (4.43)$$

и суммарный импульс

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \equiv \mathbf{K} + \mathbf{Q}. \quad (4.44)$$

Это означает, что возможно выбрать общий базис собственных значений операторов  $H$  и  $\mathbf{P}$ . В теории обычного полярона [67] это достигается унитарным преобразованием Йоста  $U = \exp[-i\mathbf{Q}\mathbf{r}]$ , где  $\mathbf{r}$  — координата электрона. Подобное преобразование можно предложить и для магнитного полярона [70]:

$$U = \exp\left[-i \sum_i \mathbf{Q}\mathbf{r}_i h_i^\dagger h_i\right], \quad (4.45)$$

оно может рассматриваться как преобразование Йоста на решетке. Для единичной дырки его можно переписать в форме

$$U = \sum_i T_i h_i^\dagger h_i, \quad T_i = \exp[-i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i]. \quad (4.46)$$

Под действием этого преобразования фермиевские и бозевские операторы преобразуются следующим образом:

$$U^\dagger h_i^\dagger h_j U = T_{j-i} h_i^\dagger h_j, \quad U^\dagger b_i U = \sum_j b_{i-j} h_j^\dagger h_j.$$

Непосредственным преобразованием гамильтониана (4.5) легко показать, что он принимает диагональную по фермиевским операторам форму:

$$U^\dagger H U = \sum_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}}, \quad (4.47)$$

причем  $H_{\mathbf{k}}$  зависит только от бозе-операторов.

Для диагонализации блока  $H_{\mathbf{k}}$  предлагается провести два дополнительных унитарных преобразования:

$$V = \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \theta_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{-\mathbf{q}}^\dagger - \text{к.с.})\right], \quad (4.48)$$

$$W = \sum_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}}, \quad W_{\mathbf{k}} = \exp\left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \lambda_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) (b_{\mathbf{q}} - b_{\mathbf{q}}^\dagger)\right]. \quad (4.49)$$

Первое, при подходящем выборе параметров  $\theta_{\mathbf{q}}$ , диагонализует чисто магннную часть гамильтониана (4.5) (преобразование (4.48) эквивалентно  $u$ - $v$ -преобразова-

нию бозе-операторов (4.6)). Второе преобразование (4.49) производит линейный сдвиг бозе-операторов, а именно,

$$W_k^\dagger b_q W_k = b_q - \frac{1}{\sqrt{N}} \lambda_q(\mathbf{k}). \quad (4.50)$$

Величины  $\lambda_q(\mathbf{k})$  следует рассматривать как вариационные параметры; их подбирают из условия, чтобы линейные по операторам  $b_q$  члены в выражении  $(VW_k)^\dagger H_k (VW_k)$  исключались.

В результате применения трех унитарных преобразований исходный гамильтониан полностью диагонализуются в пространстве состояний с одной дыркой, т.е.

$$(UVW)^\dagger H (UVW) = \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}}, \quad (4.51)$$

где

$$E(\mathbf{k}) = -2z\Omega(\mathbf{k}) + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \lambda_{\mathbf{q}}^2(\mathbf{k}) \quad (4.52)$$

представляет собой дисперсионную кривую одночастичного состояния (магнитного полярона). Здесь

$$\begin{aligned} \Omega(\mathbf{k}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \lambda_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) \mathcal{M}_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) F(\mathbf{k}), \\ F(\mathbf{k}) &= \exp \left[ -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \lambda_{\mathbf{q}}^2(\mathbf{k}) \right], \end{aligned} \quad (4.53)$$

а  $\mathcal{M}_{\mathbf{q}}(\mathbf{k})$  — амплитуда дырочно-магнонного взаимодействия, определенная в (4.7).

Вариационный параметр определяется соотношением

$$\lambda_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) = \frac{F(\mathbf{k}) \mathcal{M}_{\mathbf{q}}(\mathbf{k})}{\omega_{\mathbf{q}} + 2\Omega(\mathbf{k})}, \quad (4.54)$$

которое представляет собой сложное нелинейное уравнение относительно  $\lambda_{\mathbf{q}}(\mathbf{k})$ . Численное решение этого уравнения с заданными  $\mathbf{k}$  и параметром  $J/t$  позволяет по формуле (4.52) рассчитать дисперсионную кривую для магнитного полярона. Результаты расчета представлены на рис. 76 для симметричных направлений в зоне Бриллюэна. Они находятся в хорошем согласии с численными расчетами в схеме SCBA, выполненными посредством квантового метода Монте-Карло для того же самого значения  $J/t$  [71], а также с расчетами по модели Хаббарда [72]. Расчет показывает, что результаты для дисперсионной кривой мало чувствительны к величине  $J/t$ . Таким образом, в широком интервале изменений параметра  $J/t$  сохраняются характерные черты спин-поляронного спектра, а именно, абсолютный минимум в точке  $(\pi/2, \pi/2)$ , максимум в точке  $(0, 0)$  и широкий плоский участок в точке  $(\pi, 0)$ . Именно такие черты наблюдаются в дырочном спектре купратов меди [71].

Безразмерным параметром связи в теории магнитного полярона является величина  $\alpha = 2t/J$ , которая в  $t$ - $J$ -модели должна быть много больше единицы. Сравнение результатов канонической теории, кратко изложенных здесь, с численными расчетами показывает, что теория хорошо работает в интервале значений пара-

метра  $\alpha \lesssim 5$ , т.е. в промежуточной области, недоступной стандартной теории возмущений.

#### 4.7. $t$ - $t'$ - $J$ -модель

Имеется ряд причин, делающих актуальным учет перескока электронов на следующий за ближайшим узел. Во-первых, затравочный спектр электронов меняет топологию ферми-поверхности вблизи половинного заполнения [73–75]. Действительно, закон дисперсии для свободных электронов в этом случае имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) &= -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \\ &- 2t'[\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y)]. \end{aligned} \quad (4.55)$$

Характер изоэнергетических поверхностей зависит от знака  $t'$ , тогда как в модели с перескоком на ближайший узел от знака  $t$  ничего не зависит. Вблизи половинного заполнения электронные траектории открытые, при достаточно большой концентрации дырок они становятся закрытыми, при промежуточных концентрациях дырок кривизна меняет знак при движении по ферми-поверхности. Такая картина сохраняется в интервале  $-0,5t < t' < 0$ . В модели, в которой  $t' = 0$ , поверхность Ферми при половинном заполнении плоская, т.е. имеется идеальный нестинг, обеспечивающий антиферромагнитное упорядочение. При  $t' \neq 0$  нестинг нарушается, и вопрос об антиферромагнетизме такой системы остается открытым. В работе [74] исследуются аномалии затравочной магнитной восприимчивости при различных значениях  $t' < 0$ . Разумеется, кулоновское взаимодействие при  $U \gtrsim W$  должно внести существенные изменения в поведение статической магнитной восприимчивости и истинной поверхности Ферми, однако ряд аномалий, происходящих от затравочного спектра (4.55), сохраняется и при переходе к взаимодействующим электронам [74].

Другая причина была отмечена в [76], где было обращено внимание на тот факт, что перескоки между следующими за ближайшими соседями связывают узлы одной и той же подрешетки неелевского антиферромагнетика, поэтому такое движение электрона происходит без нарушения магнитного порядка и должно учитываться при определении фазовых границ антиферромагнитного состояния. Наконец, в работах [74, 75] было высказано утверждение, что объяснение экспериментальных результатов исследования ВТСП-материалов по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением возможно лишь на основе решеточной модели с  $t'$ -перескоками. В работе [77] было предположено, что в купратах меди знак  $t'$  зависит от типа носителей. Вблизи половинного заполнения  $t' < 0$  для дырочных носителей и  $t' > 0$  для электронных.

Модель Хаббарда и  $t$ - $J$ -модель с учетом перескоков по узлам, следующим за ближайшими, получили название  $U$ - $t$ - $t'$ - и  $t$ - $t'$ - $J$ -модели, соответственно.  $U$ - $t$ - $t'$ -модель при слабом кулоновском взаимодействии рассматривалась в работах [74] и [75], а  $t$ - $t'$ - $J$ -модель — в [73, 77–86]. В работе [87]  $U$ - $t$ - $t'$ -модель исследовалась численно с помощью квантового метода Монте-Карло при умеренных значениях  $U \sim W$  с целью уточнить, каким образом затравочный параметр  $t'$  перенормирует кулоновское взаимодействие. Результаты расчета показывают значительную перенормировку, так что определять параметр  $t'$  из сравнения эмпирических данных по

фотоэмиссии с расчетными из затравочного спектра довольно рискованно. В этой же работе исследовалось влияние  $t'$ -перескоков на магнитные свойства системы. Оказалось, что при  $t' < 0$  для систем с малой концентрацией дырок антиферромагнитные корреляции ослабевают по отношению к случаю  $t' = 0$ . Этот результат может быть понят из простых качественных рассуждений. Перескок на ближайший узел индуцирует эффективное антиферромагнитное взаимодействие  $J \sim t^2/U$ , тогда как  $t'$ -перескоки индуцируют дополнительное антиферромагнитное взаимодействие  $J' \sim t'^2/J$  между узлами, следующими за ближайшими. Возникает, таким образом, фрустрация, разрушающая неелевский порядок в меру величины  $J'/J$ . Далее, известно из предыдущих исследований модели Хаббарда квантовым методом Монте-Карло, что при отклонении от половинного заполнения в системе возникают несоизмеримые магнитные структуры с волновым вектором модуляции неелевского состояния, возрастающим с ростом концентрации дырок. Включение  $t'$ -члена способствует возникновению несоизмеримости при более низких значениях  $\delta$  для  $t' < 0$  по сравнению с  $t' > 0$ .

В случае же сильного кулоновского взаимодействия (для  $t-t'-J$ -модели) имеются противоположные результаты о влиянии  $t'$ -члена на антиферромагнитные корреляции. В работе [83]  $t-t'-J$ -модель исследовалась в приближении среднего поля для эффективного гамильтониана, возникающего в технике слэив-бозонного представления, первоначально примененного к модели Хаббарда [87, 88]. При этом исследовалось представление, инвариантное относительно вращения спинов [81], в котором электронные операторы выражались через бозонные и псевдоспиновые операторы, представляющие зарядовые и спиновые степени свободы соответственно. Путем сравнения энергий нескольких однородных фаз получена фазовая диаграмма (рис. 12) на плоскости  $(t'/t, \delta)$ . В отсутствие  $t'$ -члена возникают несоизмеримые фазы сразу же при отклонении от половинного заполнения. Таким образом, в  $t-J$ -модели антиферромагнитная неелевская фаза оказывается в этом приближении неустойчивой относительно образования несоизмеримых спиральных фаз. Однако видно, что при

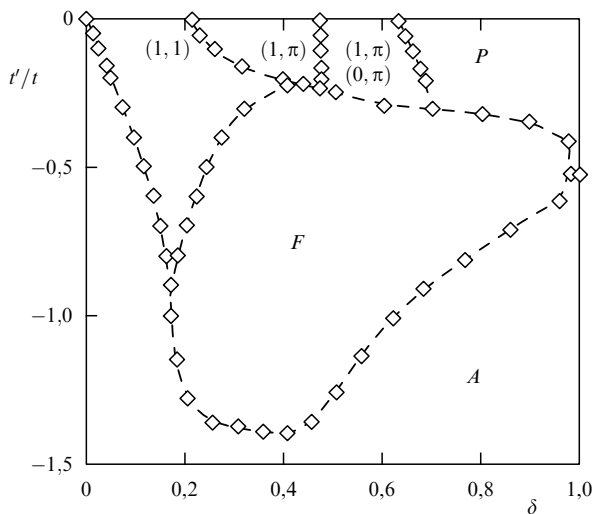


Рис. 12. Фазовая диаграмма двумерной  $t-t'-J$ -модели при  $J/t = 0,4$  и для  $T = 0$  [83].

наличии даже малого  $t'$ -члена существует стабильная неелевская фаза вблизи  $n = 1$ , область которой расширяется с увеличением  $|t'|$ , и при  $|t'| > |t'_c| = 1,4t$  эта фаза становится стабильной при всех электронных концентрациях.

Наиболее полно исследованы квазичастичные состояния (магнитный полярон) в  $t-t'-J$ -модели в работе [80] с помощью приближения SCBA в технике слэив-фермионов. К гамильтониану (4.7), описывающему систему взаимодействующих дырок и спиновых волн над неелевским состоянием, было добавлено два слагаемых:  $t'$ -член и член  $H_3$ , учитывающий трехцентровое взаимодействие (см. выражение (2.8), полученное из гамильтониана Хаббарда путем канонического преобразования в пределе  $U \gg W$ ). Последний член традиционно отбрасывается, хотя его заметная роль в формировании квазичастичного спектра была проиллюстрирована недавно в [90, 91]. Дополнительные члены приводят к изменению амплитуды фермион-магнонного взаимодействия, так что вместо (4.7) теперь имеем

$$\mathcal{M}_q(\mathbf{k}) = zt(u_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}}\gamma_{\mathbf{k}}) + \frac{zt t'}{U}(1-\delta)(\eta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \eta_{\mathbf{k}})(u_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - v_{\mathbf{q}}\gamma_{\mathbf{k}}). \quad (4.56)$$

Второе слагаемое происходит от совместного действия  $t'$ -члена и трехцентрового взаимодействия  $\sim t^2/U$ , причем  $\eta_{\mathbf{k}} = \cos k_x \cos k_y$ . С другой стороны, в отличие от  $t-J$ -модели в гамильтониане появляется затравочный спектр фермионов с законом дисперсии

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = zt'\eta_{\mathbf{k}} + \frac{zt^2}{U}(1-\delta)(z\gamma_{\mathbf{k}}^2 - 1). \quad (4.57)$$

Первый член здесь описывает свободное распространение фермиона за счет перескоков на соседний узел той же самой антиферромагнитной подрешетки, а второй обусловлен трехцентровым взаимодействием, за счет которого совершаются два последовательных перескока между ближайшими узлами. Фактор  $\gamma_{\mathbf{k}}^2$  можно представить в виде двух членов  $\propto \eta_{\mathbf{k}}$  и  $\propto \gamma_{2\mathbf{k}}$ , так что в результате фермион может попасть на узел, следующий за ближайшим (член  $\propto \eta_{\mathbf{k}}$ ) или на следующий за ним (член  $\propto \gamma_{2\mathbf{k}}$ ).

Результаты численного расчета уравнений SCBA с новыми выражениями для  $\mathcal{M}_q(\mathbf{k})$  и  $\varepsilon(\mathbf{k})$  при  $t' < 0$  показывают, что ширина зоны квазичастичных состояний определяется в  $t-t'-J$ -модели не шириной затравочной зоны фермионов  $W = 2z|t'|$ , как можно было бы ожидать, а исключительно эффектами сильной связи дырок со спиновыми волнами. Когерентное движение квазичастиц в  $t-t'-J$ -модели определяется, как и в  $t-J$ -модели, процессами поглощения и испускания спиновых волн. Иначе говоря, дырка распространяется по антиферромагнитной решетке за счет локального разрушения антиферромагнитного порядка.

## 5. Спиновая динамика квантового антиферромагнетика

### 5.1. Спин-волновой спектр и затухание

Мы будем исходить из эффективного гамильтониана (4.7), описывающего систему взаимодействующих спиновых волн и дырок в антиферромагнитной матрице. Это взаимодействие, с одной стороны, приводит к

формированию фермиевских квазичастиц в системе — магнитных поляронов, а с другой — к перенормировке затравочного спин-волнового спектра, который характеризует спиновую динамику в отсутствие дырок. Эта перенормировка оказывается столь существенной, что при нуле температур при концентрации дырок порядка нескольких процентов энергия спиновой волны обращается в нуль и, как следствие, в системе исчезает дальний антиферромагнитный порядок. Этот эффект обусловлен тем, что дырка, внедренная в антиферромагнитную матрицу, сильно деформирует магнитный порядок в своей окрестности, и поэтому достаточно небольшой (несколько процентов) концентрации дырок, чтобы эти деформированные области перекрывались и дальний порядок полностью разрушался. Задачей теории является вычисление дисперсионных кривых спиновых волн и их затухания, зависимости намагниченности подрешеток и температуры Нееля  $T_N$  от концентрации дырок  $\delta$ .

Все перечисленные проблемы (кроме вычисления  $T_N$ ) могут быть решены в рамках линейной спин-волновой теории. В связи с этим введем двухкомпонентный оператор спиновых отклонений

$$A_q = \begin{pmatrix} \beta_q \\ \beta_{-q}^\dagger \end{pmatrix}, \quad A_q^\dagger = (\beta_q^\dagger, \beta_{-q}) \quad (5.1)$$

и построим двухвременную запаздывающую функцию Грина [92]

$$\langle\langle A_q(t) | A_q^\dagger(t') \rangle\rangle = -i\Theta(t-t') \langle [\beta_q(t), \beta_q^\dagger(t')] \rangle. \quad (5.2)$$

Составим уравнение движения для нее, дифференцируя (5.2) сначала по  $t$ , а затем по  $t'$ . Полученному уравнению для  $\langle\langle A_q | A_q^\dagger \rangle\rangle_\omega$  можно придать форму уравнения Дайсона:

$$\langle\langle A_q | A_q^\dagger \rangle\rangle_\omega = \langle\langle A_q | A_q^\dagger \rangle\rangle_\omega^0 + \langle\langle A_q | A_q^\dagger \rangle\rangle_\omega^0 P(q, \omega) \langle\langle A_q | A_q^\dagger \rangle\rangle_\omega, \quad (5.3)$$

где "нулевая" функция Грина удовлетворяет уравнению

$$\omega \langle\langle A_q | A_q^\dagger \rangle\rangle_\omega^0 = \langle [A_q, A_q^\dagger] \rangle + \langle [i\dot{A}_q, A_q^\dagger] \rangle \langle [A_q, A_q^\dagger] \rangle^{-1} \langle\langle A_q | A_q^\dagger \rangle\rangle_\omega^0,$$

а  $P(q, \omega)$  имеет смысл поляризационного оператора. Он определяется соотношением [96]

$$P(q, \omega) = \langle [A_q, A_q^\dagger] \rangle^{-1} \left\{ \langle [i\dot{A}_q, -i\dot{A}_q^\dagger] \rangle_\omega - \langle [i\dot{A}_q, A_q^\dagger] \rangle_\omega \langle [A_q, A_q^\dagger] \rangle^{-1} \langle [A_q, -i\dot{A}_q^\dagger] \rangle_\omega \right\} \langle [A_q, A_q^\dagger] \rangle^{-1}. \quad (5.4)$$

Учитывая уравнение движения для операторов  $i\dot{A}_q = [A_q, H]$ , видим, что  $P(q, \omega)$  выражается через двухчастичную функцию Грина, которая может быть расцеплена на произведение одночастичных функций Грина. Тогда из (5.4) находим матричные элементы поляризационного оператора:

$$\begin{Bmatrix} P_{11}(q, \omega) \\ P_{12}(q, \omega) \end{Bmatrix} = \frac{1}{N} \sum_k \begin{Bmatrix} \mathcal{M}_q^2(k) \\ \mathcal{M}_q(k) \mathcal{M}_{-q}(k-q) \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \int d\omega_1 d\omega_2 [f(\omega_1)f(-\omega_2) - f(-\omega_1)f(\omega_2)] \times \frac{A(k-q, \omega_1)A(k, \omega_2)}{\omega + \omega_1 - \omega_2 + i\delta}. \quad (5.5)$$

Другие два матричных элемента находятся из соотношений

$$P_{22}(q, \omega) = P_{11}(-q, -\omega), \quad P_{21}(q, \omega) = P_{12}(q, \omega).$$

Уравнение Дайсона (5.3) определяет матрицу функций Грина

$$\begin{aligned} \langle\langle A_q | A_q^\dagger \rangle\rangle_\omega &= \\ &= \frac{1}{\mathcal{D}_q(\omega)} \begin{pmatrix} \omega + \omega_q^0 + P_{22}(q, \omega) & -P_{12}(q, \omega) \\ -P_{21}(q, \omega) & -\omega + \omega_q^0 + P_{11}(q, \omega) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

где

$$\mathcal{D}_q(\omega) = [\omega + \omega_q^0 + P_{22}(q, \omega)] [\omega - \omega_q^0 - P_{11}(q, \omega)] + P_{12}(q, \omega)P_{21}(q, \omega). \quad (5.7)$$

Спектр спиновых волн соответствует полюсам функции Грина (5.6), или нулям выражения (5.7). При вычислении матричных элементов (5.5) поляризационного оператора учтем структуру спектральной плотности дырок, а именно, полюсный и некогерентный вклады (см. выражение (4.19)):

$$A(k, \omega) = Z_k \delta(\omega - E(k) + \mu) + \frac{1}{W} \Theta(\omega - J) \Theta(W - \omega), \quad (5.8)$$

где  $W = 2zt$  — ширина затравочной зоны. Правило сумм

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(k, \omega) = 1 \quad (5.9)$$

определяет интенсивность когерентного вклада  $Z_k = J/W$ ; ширина зоны когерентных квазичастиц, как мы знаем, имеет порядок величины  $J \ll W$ .

Химический потенциал  $\mu$  находится из уравнения для числа дырок:

$$\delta = \frac{1}{N} \sum_k \int d\omega A(k, \omega) f(\omega). \quad (5.10)$$

Предполагая, что поверхность Ферми состоит из четырех сферических карманов, централизованных в точках  $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ , находим из (5.10)

$$\mu = \frac{2\pi W}{mJ} \delta, \quad (5.11)$$

где  $m$  — эффективная масса дырок.

Если подставить (5.8) в выражения (5.5), мы увидим, что оно распадается на четыре слагаемых. Слагаемое, включающее  $\sim A_{\text{coh}} A_{\text{coh}}$ , мало в силу малости  $Z_k \ll 1$ , поэтому, как впервые было отмечено в [53], основной вклад в поляризуемость дают некогерентные вклады. Максимальный из них был бы  $\sim A_{\text{inc}} A_{\text{inc}}$ , однако в наших приближениях, использующих аппроксимацию

(5.8), этот вклад тождественно равен нулю [96] (в работе [54] это не было замечено), поэтому главный вклад в интегралы (5.5) дают члены  $\sim A_{\text{coh}} A_{\text{inc}}$ , если предположить, что  $\mu < J$ . В указанном приближении в первом порядке по  $\delta$  получаем при малых  $\mathbf{q}$  выражение для энергии спиновых волн:

$$\omega_{\mathbf{q}} = vq, \quad v = v_0 \sqrt{1 - \frac{\delta}{\delta_c}}, \quad (5.12)$$

где  $v_0 = \sqrt{2}J$  — скорость неперенормированных спиновых волн для антиферромагнетика с половинным заполнением, а

$$\delta_c = \frac{JW/4zt^2}{\ln(W/J)} \quad (5.13)$$

— критическая концентрация, при которой скорость обращается в нуль. При  $t/J = 5$  имеем  $\delta_c = 0,027$ , что соответствует критической концентрации разрушения антиферромагнетизма в соединениях ВТСП.

Численный расчет  $\omega_{\mathbf{q}}$  и  $\Gamma_{\mathbf{q}}$  дает дисперсию и затухание спиновых волн для различных концентраций дырок (рис. 13). Мы видим размягчение спин-волновых энергий по мере увеличения  $\delta$  и одновременно рост затухания. Для очень малых концентраций дырок, когда скорость спиновых волн много больше скорости дырок на поверхности Ферми  $v_F$ , длинноволновые спиновые волны остаются фактически незатухающими, поскольку они не могут распадаться на электрон-дырочную пару. Однако коротковолновые спиновые волны затухают, как это показано на рис. 13. Когда  $v < v_F$ , спин-волновой спектр лежит целиком в континууме электрон-дырочных пар, и тогда спиновые волны становятся передемпфированными. При этих условиях быстро наступает разрушение антиферромагнитного порядка.

Вместе с уменьшением скорости спиновых волн с ростом  $\delta$  должна уменьшаться намагниченность подрешетки  $m$ . Как следует из численного расчета [96],  $m$  обращается в нуль при той же концентрации  $\delta_c$ , что и скорость спиновых волн. Это непосредственно означает, что  $\delta_c$  есть критическая концентрация разрушения дальнего порядка. Результаты численного расчета [96] хорошо согласуются с экспериментальными данными для ВТСП-материалов.

## 5.2. Антиферромагнетик при конечной температуре

Мы рассмотрели вопрос о перенормировке спин-волнового спектра за счет взаимодействия спиновых волн с дырками при нуле температур и определили критическую концентрацию примеси, при которой скорость спиновых волн и намагниченность подрешетки обращается в нуль. Вопрос исследовался в рамках линейной теории спиновых волн. В данном разделе будет изучено поведение системы при конечных температурах путем самосогласованного подхода к спиновой системе, аналогичного тому, какой используется для описания гайзенберговской модели в широком интервале температур [92]. В результате будут получены самосогласованные уравнения для намагниченности подрешетки в  $t$ - $J$ -модели, позволяющие вычислить температуру Нееля  $T_N$ . Мы следуем далее работам [50, 93]. В данной ситуации необходимо исходить из полного гамильтониана (4.4), который запишем в несколько упрощенной

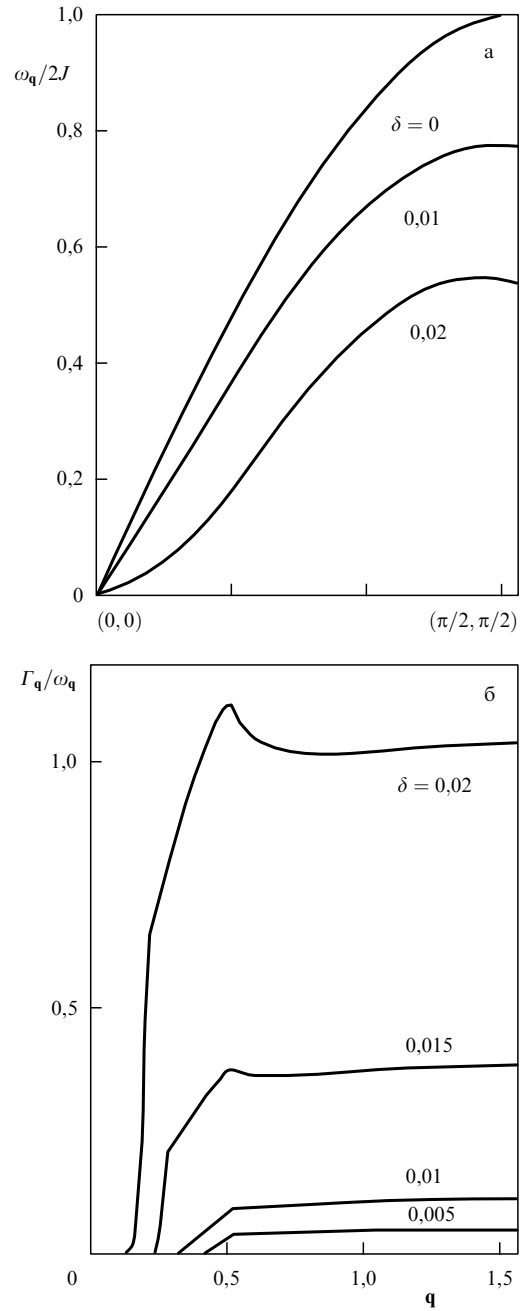


Рис. 13. Спин-волновой спектр (а) и затухания (б) вдоль  $\mathbf{q} = (q, q)$  для различных концентраций дырок [96].  $J/t = 0,2$ .

форме [93]:

$$H = t \sum_{ij} h_i^\dagger h_j (s_i^+ + s_j^-) + J \sum_{ij} \left[ \frac{1}{2} (s_i^+ s_j^+ + s_i^- s_j^-) - s_i^z s_j^z \right]. \quad (5.14)$$

Вместо величины (5.1) введем теперь двухкомпонентный оператор, составленный из спиновых операторов

$$\mathcal{B}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} s_{\mathbf{q}}^+ \\ s_{\mathbf{q}}^- \end{pmatrix}, \quad \mathcal{B}_{\mathbf{q}}^\dagger = (s_{\mathbf{q}}^-, s_{\mathbf{q}}^+), \quad (5.15)$$

и определим матричную (коммутаторную) функцию Грина магнитных возмущений

$$D(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle \mathcal{B}_{\mathbf{q}} | \mathcal{B}_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle\rangle_\omega.$$

Запишем уравнение движения для оператора  $s_i^+$  и линеаризуем его, как это делается в гайзенберговской модели [92], заменив оператор  $s_i^z$  его средним значением:

$$s_i^z \rightarrow \langle s_i^z \rangle \equiv m. \quad (5.16)$$

Поскольку при нулевой концентрации дырок  $t$ - $J$ -модель сводится к модели Гайзенберга, это приближение будет тем точнее, чем меньше  $\delta$ . Линеаризованное уравнение запишем в фурье-представлении следующим образом:

$$i \frac{\partial s_q^+}{\partial t} = 2m \left[ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{q}) h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger h_{\mathbf{k}} + J(\mathbf{0}) s_q^+ + J(\mathbf{q}) s_{-\mathbf{q}}^- \right], \quad (5.17)$$

где  $J(\mathbf{q}) = zJ\gamma_{\mathbf{q}}$  — фурье-компонента обменного взаимодействия. Поскольку для двумерного магнетика с симметрией группы вращения (каковым является  $t$ - $J$ -модель) дальний порядок возможен только при  $T = 0$ , мы должны рассматривать квазидвумерный случай, включив, например, малое обменное взаимодействие  $J_\perp \ll J$  в направлении, перпендикулярном слоям; тогда для трехмерного вектора  $\mathbf{q}$  в уравнении движения (5.17) следует иметь в виду, что

$$J(\mathbf{q}) = zJ(\gamma_{\mathbf{q}} + \xi \cos q_z), \quad \xi = \frac{J_\perp}{2J}. \quad (5.18)$$

Уравнение для оператора  $\mathcal{B}_q$  запишем в форме

$$i \frac{\partial \mathcal{B}_q}{\partial t} = 2mI_q \mathcal{B}_q + j_q, \quad (5.19)$$

где  $I_q$  — двухрядная матрица, а  $j_q$  — двухкомпонентный столбец:

$$I_q = \begin{pmatrix} J(\mathbf{0}) & J(\mathbf{q}) \\ -J(\mathbf{q}) & -J(\mathbf{0}) \end{pmatrix},$$

$$j_q = \frac{2m}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{q}) h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger h_{\mathbf{k}} \\ -\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \end{pmatrix}.$$

Теперь можно составить уравнение движения для функции Грина спиновых волн, дифференцируя выражение для  $\langle\langle \mathcal{B}_q | \mathcal{B}_q^\dagger \rangle\rangle$  сначала по времени  $t$ , а затем по  $t'$ . В фурье-представлении получается пара связанных уравнений:

$$(\omega - 2mI_q) \langle\langle \mathcal{B}_q | \mathcal{B}_q^\dagger \rangle\rangle_\omega = \langle [\mathcal{B}_q, \mathcal{B}_q^\dagger] \rangle + \langle\langle j_q | \mathcal{B}_q^\dagger \rangle\rangle_\omega,$$

$$\langle\langle j_q | \mathcal{B}_q^\dagger \rangle\rangle_\omega (\omega - 2mI_q) = \langle [j_q, \mathcal{B}_q^\dagger] \rangle + \langle\langle j_q | j_q^\dagger \rangle\rangle_\omega. \quad (5.20)$$

Уравнению для величины  $\langle\langle \mathcal{B}_q | \mathcal{B}_q^\dagger \rangle\rangle$  можно придать форму уравнения Дайсона, в котором поляризационный оператор выражается через функцию Грина токов:

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2m} \langle\langle j_q | j_q^\dagger \rangle\rangle_\omega \tau_z. \quad (5.21)$$

В итоге имеем

$$D(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2m}{\omega - 2mI_q - \Pi(\mathbf{q}, \omega)} \tau_z, \quad (5.22)$$

где

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = 2m \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \chi_{\mathbf{q}\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega) \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varepsilon(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) & \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \varepsilon(\mathbf{k}') \\ -\varepsilon(\mathbf{k}) \varepsilon(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) & -\varepsilon(\mathbf{k}) \varepsilon(\mathbf{k}') \end{pmatrix}. \quad (5.23)$$

Здесь введена двухчастичная функция Грина дырок следующего вида:

$$\chi_{\mathbf{q}\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega) = \langle\langle h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger h_{\mathbf{k}} | h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \rangle\rangle_\omega. \quad (5.24)$$

Стандартным расщеплением получаем

$$\chi_{\mathbf{q}\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega) = \chi_{\mathbf{q}\mathbf{k}}(\omega) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'},$$

где

$$\chi_{\mathbf{q}\mathbf{k}}(\omega) = \int d\omega_1 d\omega_2 \frac{f(\omega_1) - f(\omega_2)}{\omega + \omega_1 - \omega_2 + i\delta} A(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_1) A(\mathbf{k}, \omega_2). \quad (5.25)$$

Таким образом, собственно-энергетическая часть магнетона  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$  выражается через некоторые интегралы от спектральной плотности функции Грина дырок. Полуса функции Грина (5.22) определяют перенормированные за счет взаимодействия с дырками частоты  $\omega_{\mathbf{q}}$  спиновых волн.

### 5.3. Температура Нееля

Параметр  $m$  (средняя намагниченность подрешетки) до сих пор является неопределенной величиной. Как и в теории гайзенберговского магнетика [92], его следует определять из уравнения

$$m = \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle s_{\mathbf{q}}^- s_{\mathbf{q}}^+ \rangle, \quad (5.26)$$

где спиновый коррелятор выражается через соответствующий элемент матричной функции Грина:

$$\langle s_{\mathbf{q}}^- s_{\mathbf{q}}^+ \rangle = \int d\omega \frac{-(1/\pi) \text{Im} \langle\langle \mathcal{B}_q | \mathcal{B}_q^\dagger \rangle\rangle_\omega^{11}}{\exp(\beta\omega) - 1}. \quad (5.27)$$

Как мы видели выше, для двумерного антиферромагнетика существует вклад некогерентных состояний в спектральную плотность дырок. Воспользуемся приближением (4.41) для нее и пренебрежем полюсным вкладом. Тогда величина  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$  становится не зависящей от  $\mathbf{q}$  и уравнение (5.27) сводится к следующему:

$$\frac{1}{(2m)^2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{J(\mathbf{0}) - (zt/2)^2 \chi(T, \delta)}{\omega_{\mathbf{q}}} \coth\left(\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2T}\right). \quad (5.28)$$

Из уравнения, определяющего полюса функции Грина (5.22), в наинизшем приближении по  $m$  легко получить выражение для перенормированных частот спиновых волн:

$$\omega_{\mathbf{q}} = 2m\omega_{\mathbf{q}}^0 \left[ 1 - \frac{zt^2}{4J} \chi(T, \delta) \right]. \quad (5.29)$$

В уравнениях (5.28) и (5.29) величина

$$\chi(T, \delta) = - \int d\omega_1 d\omega_2 \frac{f(\omega_1) - f(\omega_2)}{\omega_1 - \omega_2} A(\omega_1) A(\omega_2) \quad (5.30)$$

зависит от температуры и концентрации дырок. После подстановки выражения (5.29) в уравнение (5.28) и разложения по степеням  $m$  находим уравнение для намагниченности подрешетки:

$$m^2 = \frac{3}{4C_\xi} \frac{T_N(\delta) - T}{T_N(\delta)}, \quad (5.31)$$

где температура Нееля  $T_N$  определяется уравнением

$$\frac{T_N(\delta)}{T_N(0)} = 1 - \frac{zt^2}{4J} \chi[T_N(\delta), \delta], \quad (5.32)$$

причем  $T_N(0)$  — температура Нееля для строго половинного заполнения зоны:

$$T_N(0) = \frac{2J}{C_\xi}, \quad C_\xi = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left[ 1 - \frac{J(\mathbf{q})}{J(\mathbf{0})} \right]^{-1}. \quad (5.33)$$

Для двумерного антиферромагнетика величина  $C_\xi$  логарифмически расходится и дает температуру Нееля равную нулю, как и должно быть. Если учесть взаимодействие между плоскостями и выбрать  $J(\mathbf{q})$  в форме (5.18), мы получим, что при малых  $\xi$   $C_\xi \sim \ln(1/\xi)$  и остается конечной при конечном  $\xi$ .

Легко видеть, что выражение (5.32) обращается в нуль при очень малой концентрации дырок. Действительно, возьмем оценку для величины

$$\chi(T_N(\delta), \delta) \sim \Pi_{ii} \sim \frac{\delta}{zt} \ln \frac{zt}{2J}.$$

Тогда немедленно получаем из (5.32) оценку для критической концентрации

$$\delta_c \approx \frac{J}{t} \frac{1}{\ln(zt/2J)} \ll 1. \quad (5.34)$$

Вычисление интегралов в выражении (5.30) после использования приближения (4.41) для спектральной плотности некогерентных состояний в пределе малой концентрации  $\Gamma\delta/T \ll 1$  дает

$$\chi(T, \delta) \approx \frac{\delta}{T} \ln \frac{2\Gamma}{T}. \quad (5.35)$$

С учетом этой оценки уравнение (5.32) для  $T_N(\delta)$  может быть переписано в виде

$$\delta = \frac{J\Gamma}{t^2} \frac{1 - T_N(\delta)/T_N(0)}{\ln[2\Gamma/T_N(0)] - \ln[T_N(\delta)/T_N(0)]}. \quad (5.36)$$

Численное решение его представлено на рис. 14. В актуальной области значений параметров имеет место быстрое убывание  $T_N(\delta)$  с концентрацией. Критическая концентрация дырок при параметрах, типичных для ВТСП-материалов,  $\delta_c = 0,04$ , что находится в хорошем согласии с экспериментальными данными [94, 95]. Отметим в заключение, что спин-волновой спектр в  $t-t'-J$ -модели исследовался детально в работе [98].

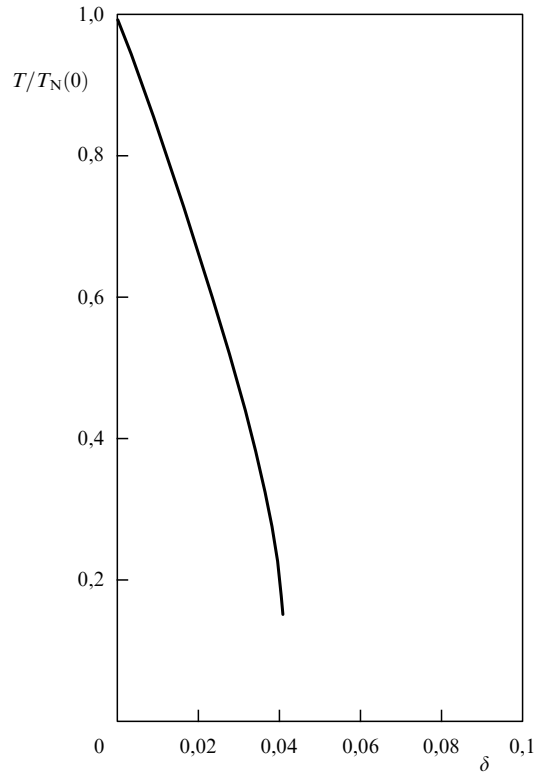


Рис. 14. Зависимость температуры Нееля от концентрации дырок. Получена из решения уравнения (5.36) при  $t = 0,5$  эВ,  $2J/t = 0,2$ ,  $\Gamma = 2\sqrt{3}t$ ,  $T_N = 2J/3$  [50].

## 6. Калибровочные поля для двумерной $t-J$ -модели

### 6.1. Слэив-бозонное представление для спиновой жидкости

За пределами критической концентрации дырок ( $\delta > \delta_c$ ) система теряет дальний антиферромагнитный порядок и переходит в состояние спиновой жидкости [100]. Основное состояние системы в этой области может оказаться ферромагнитным, однако при достаточно высоких температурах сильно коррелированная система попадает в режим больших магнитных и зарядовых флуктуаций и характеризуется необычным поведением. Для описания этого особого состояния было предложено несколько подходов, среди которых, по-видимому, наиболее адекватным является подход, основанный на введении калибровочных полей [101–113]. Идея такого подхода была высказана в работе [114].

Чаще всего при этом используют слэив-бозонное представление для  $X$ -операторов, описывающих коррелированное движение электронов по решетке. Представим оператор  $X_i^{0\sigma}$  в виде произведения фермиевского  $f_{i\sigma}$  и бозовского  $b_i$  операторов:

$$X_i^{0\sigma} = f_{i\sigma} b_i^\dagger \quad (6.1)$$

с дополнительным условием

$$\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + b_i^\dagger b_i = 1, \quad (6.2)$$



исключая появление двоек на узлах. Поскольку спиновый индекс электрона переносится на фермиевский оператор, представление называется слэив-бозонным, при этом бозевский оператор описывает рождение дырки.  $t$ - $J$ -модель становится эквивалентной системе взаимодействующих ферми- и бозе-частиц, а статистическая сумма может быть представлена как функциональный интеграл по грассмановым ( $f_{i\sigma}$  и  $f_{i\sigma}^*$ ) и комплексным ( $b_i$  и  $b_i^*$ ) полям [102]:

$$Z = \int \delta \lambda_i \delta b_i \delta b_i^* \delta f_{i\sigma} \delta f_{i\sigma}^* \exp \left[ - \int_0^\beta (\mathcal{L}_0 + H) d\tau \right], \quad (6.3)$$

$$\mathcal{L}_0 = \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^* \left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) f_{i\sigma} + \sum_i b_i^* \frac{\partial}{\partial \tau} b_i + \sum_i \lambda_i \left( \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^* f_{i\sigma} + b_i^* b_i - 1 \right), \quad (6.4)$$

$$H = -t \sum_{ij\sigma} f_{i\sigma}^* f_{j\sigma} b_i b_j^* + \frac{J}{2} \sum_{ij} f_{i\sigma}^* f_{j\sigma} f_{j\sigma}^* f_{i\sigma}. \quad (6.5)$$

Здесь выражение (6.5) совпадает с гамильтонианом (2.9) в слэив-бозонном представлении. В дальнейшем четверной член  $b_i^* b_i b_j^* b_j$  отбрасываем, поскольку концентрация дырок предполагается малой. Параметр  $\mathcal{L}_0$  представляет собой лагранжиан системы невзаимодействующих фермионов и бозонов; он включает в себя химический потенциал  $\mu$ , учитывающий сохранение числа дырок, и локальный множитель Лагранжа  $\lambda_i$ , учитывающий констрейн (6.2).

Дальнейшее преобразование функционального интеграла стандартно: члены четвертого порядка  $f^* f f^* f$  и  $f^* f b^* b$  преобразуются в билинейные члены  $f^* f$  и  $b^* b$  с помощью тождества Хаббарда–Стратоновича, вводящего интегрирование по комплексным переменным  $\chi_{ij}$  и  $\eta_{ij}$ . Получаем в результате выражение для  $Z$ :

$$Z = \int \delta \lambda_i \delta \chi_{ij} \delta \chi_{ij}^* \delta \eta_{ij} \delta \eta_{ij}^* \delta b_i \delta b_i^* \delta f_{i\sigma} \delta f_{i\sigma}^* \times \exp \left[ - \int_0^\beta \mathcal{L}(\tau) d\tau \right] \quad (6.6)$$

с линеаризованным лагранжианом

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 - \frac{J}{2} \eta_{ij} f_{i\sigma}^* f_{j\sigma} + t \chi_{ij} b_i b_j^* + \text{к.с.} + \frac{J}{2} (\eta_{ij} \chi_{ij}^* + \eta_{ij}^* \chi_{ij}) - J \chi_{ij} \chi_{ij}^*.$$

Интегрирование по калибровочным полям производится методом стационарной точки. Для этого представим поля в виде

$$\lambda_i = i\lambda_0 + a_0(\mathbf{r}_i), \quad \chi_{ij} = \chi_0 \exp(i\vartheta_{ij}), \quad \eta_{ij} = \eta_0 \exp(i\vartheta_{ij}). \quad (6.7)$$

Тем самым мы предполагаем, что имеется однородное состояние, в котором величина  $\lambda_0$  и амплитуды  $\chi_0$  и  $\eta_0$  не зависят от координат. Величины  $a_0(\mathbf{r}_i)$  и  $\vartheta_{ij}$  описывают возмущение калибровочных полей. Сама стационарная точка  $(\lambda_0, \chi_0, \eta_0)$  соответствует приближению среднего поля; ей отвечает лагранжиан  $\mathcal{L}_{\text{MF}}$ . Представим полный

лагранжиан в виде суммы двух членов:  $\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{MF}} + \mathcal{L}_f$ , где  $\mathcal{L}_f$  описывает вклад от флуктуаций над средним полем:

$$\mathcal{L}_f = \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^* \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu_F + i a_0(\mathbf{r}_i) \right] f_{i\sigma} + \sum_i b_i^* \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu_F + i a_0(\mathbf{r}_i) \right] b_i - \frac{J}{2} \eta_0 \sum_{ij} \exp(i\vartheta_{ij}) f_{i\sigma}^* f_{j\sigma} + t \chi_0 \sum_{ij} \exp(i\vartheta_{ij}) b_i^* b_j. \quad (6.8)$$

Нетрудно проверить, что выражение (6.8) инвариантно относительно калибровочного преобразования полей на решетке:

$$f_{i\sigma} \rightarrow f_{i\sigma} \exp(i\phi_i), \quad b_i \rightarrow b_i \exp(i\phi_i), \quad \vartheta_{ij} \rightarrow \vartheta_{ij} + \phi_i - \phi_j, \quad a(\mathbf{r}_i) \rightarrow a(\mathbf{r}_i) - \frac{\partial \phi_i}{\partial \tau}. \quad (6.9)$$

Мы увидим ниже, что в рассматриваемой системе существенны длинноволновые флуктуации, поэтому далее можем использовать континуальное приближение. Тогда вместо фазы  $\vartheta_{ij}$ , зависящей от двух узлов решетки, являющихся ближайшими соседями, можно ввести некоторый вектор  $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ , зависящий от одной точки  $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j)/2$ . Этот вектор определим из соотношения

$$\vartheta_{ij} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \mathbf{a} \left( \frac{\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j}{2} \right).$$

В результате лагранжиан представляется в следующей окончательной форме [103, 104]:

$$\mathcal{L} = \int d^2 \mathbf{r} \left[ \sum_{\sigma} f_{\sigma}^*(\mathbf{r}) \left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu_F + i a_0 \right) f_{\sigma}(\mathbf{r}) + b^*(\mathbf{r}) \left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu_B + i a_0 \right) b(\mathbf{r}) - \frac{1}{2m_F} \sum_{\sigma\alpha} f_{\sigma}^*(\mathbf{r}) \left( \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} + i a_{\alpha} \right)^2 f_{\sigma}(\mathbf{r}) - \frac{1}{2m_B} \sum_{\alpha} b^*(\mathbf{r}) \left( \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} + i a_{\alpha} \right)^2 b(\mathbf{r}) \right]. \quad (6.10)$$

Здесь введены эффективные массы фермионов и бозонов (вместо параметров  $t$  и  $J$ ), согласно соотношениям  $1/m_B = 2Ja^2$ ,  $1/m_F = 2ta^2$ , где  $a$  — параметр решетки. Полученный в результате указанных преобразований функциональный интеграл лагранжиан мог бы рассматриваться как феноменологический для системы фермионов и бозонов, взаимодействующих друг с другом через калибровочные поля  $a_0$  и  $\mathbf{a}$ . Этот лагранжиан обладает калибровочной инвариантностью вида

$$f_{\sigma} \rightarrow f_{\sigma} \exp(i\theta), \quad b \rightarrow b \exp(i\theta), \quad \mathbf{a} \rightarrow \mathbf{a} + \nabla \theta, \quad a_0 \rightarrow a_0 - \frac{\partial \theta}{\partial \tau}, \quad (6.11)$$

где  $\theta$  — функция  $\mathbf{r}$  и  $\tau$ .

Для уяснения физического смысла флуктуаций, описываемых калибровочными полями  $\mathbf{a}$ , рассмотрим кор-

реляционную функцию

$$P_{1234} = \langle f_{1\alpha}^\dagger f_{2\alpha} f_{2\beta}^\dagger f_{3\beta} f_{3\gamma}^\dagger f_{4\gamma} f_{4\delta}^\dagger f_{1\delta} \rangle,$$

определенную на четырех точках 1, 2, 3, 4, образующих соответствующий плакет на квадратной решетке. Составим выражение

$$\langle P_{1234} - P_{1432} \rangle = \chi_0^4 \langle \exp[i(\vartheta_{12} + \vartheta_{23} + \vartheta_{34} + \vartheta_{41})] - \text{к.с.} \rangle, \quad (6.12)$$

являющееся калибровочным инвариантом, а потому могущее служить некоторым параметром порядка. С другой стороны, нетрудно показать, что

$$P_{1234} - P_{1432} = 2i[(2 - \rho_2)E_{134} + (2 - \rho_4)E_{123} + (2 - \rho_3)E_{124} - \rho_1 E_{234}], \quad (6.13)$$

где  $\rho_i = \sum_{\alpha} f_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha}$  — оператор плотности фермионов, а

$$E_{123} = \mathbf{S}_1 [\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3] \quad (6.14)$$

— оператор киральности для треугольного плакета, имеющего вершины в точках 1, 2 и 3. Этот оператор нарушает пространственную четность и инвариантность по отношению к обращению знака времени. Он играет важную роль в киральной теории спиновой жидкости, где среднее значение  $\langle E_{123} \rangle$  в основном состоянии отлично от нуля. Если  $\langle E_{123} \rangle \neq 0$ , то, в силу (6.13), среднее по квадратному плакету, проходимо по часовой стрелке и против часовой стрелки, также отлично от нуля. Таким образом, из (6.12) мы видим, что флуктуации калибровочных полей в модели (6.10) связаны с флуктуациями киральности плакетов на двумерной решетке.

Обсудим теперь границы применимости модели (6.10). Этот лагранжиан представляет систему фермионов и бозонов, взаимодействующих друг с другом через калибровочные поля  $a_0$  и  $\mathbf{a}$ . Он описывает флуктуации над однородным средним полем, вводимым соотношениями (6.7), в которых величины  $\lambda_0$ ,  $\chi_0$  и  $\eta_0$  не зависят от координат. Для этих величин можно записать уравнения самосогласования из условия минимума лагранжиана в стационарной точке [104]. Мы предполагаем при этом, что бозе-система, представляемая величинами  $b_i$  и  $b_i^*$ , находится выше температуры  $T_B$  бозе-эйнштейновской конденсации, так что  $b = 0$ . При  $T = 0$  следует учесть тот факт, что  $b \neq 0$ . После минимизации можно получить, что

$$b^2 = \delta.$$

Рассматриваемое однородное состояние устойчиво при условии  $t\delta > cJ$ , где  $c$  — безразмерная величина порядка 1. Таким образом, при не очень малых концентрациях дырок при  $T = 0$  основное состояние есть ферми-жидкость с большими флуктуациями киральности (при малых  $\delta$ , как мы знаем, возникает антиферромагнитное состояние неелевского типа). При  $T > T_B$  имеет место состояние, названное в [104] странным металлом. Флуктуации киральности играют там основную роль в формировании спектра возбужденного состояния.

## 6.2. Коллективная мода

Рассмотрим подробнее систему при  $T > T_B$ . Интегрирование в (6.10) по гассмановским переменным позволяет получить эффективное действие, зависящее от калибровочных полей. Выделим в нем часть, включающую векторные поля  $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ , тогда, ограничиваясь только членами, квадратичными по этим полям, приходим к следующему выражению для эффективного действия:

$$\int_0^\beta d\tau \mathcal{L}_f(\tau) = T \sum_{\omega_n} \int d^2\mathbf{q} a_\alpha(\mathbf{q}, \omega_n) P_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega_n) a_\beta(\mathbf{q}, \omega_n), \quad (6.15)$$

где

$$P_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega_n) = \int d^2\mathbf{k} \left\{ \frac{f[\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)] - f[\varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2)]}{i\omega_n - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) + \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2)} \frac{\partial \varepsilon}{\partial q_\alpha} \frac{\partial \varepsilon}{\partial q_\beta} + \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} f[\varepsilon(\mathbf{k})] \right\}. \quad (6.16)$$

Этот результат, очевидно, соответствует RPA-приближению в теории взаимодействующих фермионов. При малых частотах и импульсах

$$P_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega_n) = \left( \delta_{\alpha\beta} - \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2} \right) \left( \frac{\pi |\omega_n|}{v_F q} + \chi_F q^2 \right), \quad (6.17)$$

где  $v_F$  — скорость на поверхности Ферми, а  $\chi_F$  — диамагнитная восприимчивость в теории ферми-жидкости Ландау.

Функциональный интеграл (6.6) с эффективным действием (6.15) позволяет записать функцию Грина флуктуаций калибровочного поля:

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \tau) = \langle T a_\alpha(\mathbf{r}, \tau) a_\beta(\mathbf{0}, 0) \rangle. \quad (6.18)$$

Из выражений (6.15) и (6.17), определяющих температурную функцию Грина, после аналитического продолжения  $i\omega_n \rightarrow \omega$  находим запаздывающую функцию Грина [101]:

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\delta_{\alpha\beta} - q_\alpha q_\beta / q^2}{i\pi\omega / v_F q + \chi_F q^2}. \quad (6.19)$$

Это выражение соответствует непропагаторной релаксационной коллективной моде. Через эту моду осуществляется косвенное взаимодействие фермионов и бозонов в рассматриваемой системе. Взаимодействие фермионов с флуктуационной модой (6.19) уже в первом приближении приводит к аномалиям транспортных свойств системы и, в частности, к линейному по  $T$  закону электросопротивления, наблюдаемому в нормальной фазе ВТСП-материалов. Отметим для справки, что поведение системы ниже температуры бозе-конденсации, в частности при  $T = 0$ , было детально исследовано в работе [113] в технике анионной сверхпроводимости.

## 6.3. Магнитная восприимчивость

Детальное исследование магнитных свойств двумерной  $t$ - $J$ -модели в области критических значений концентрации проведено в работе [110]. В ней использовалось слэив-бозонное представление электронных операторов

(6.1), после чего гамильтониан брался в приближении среднего поля:

$$H_{MF} = \sum_{ij\sigma} (F_{ij}^* f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + \text{к.с.}) - \lambda_F \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \sum_{ij} (B_{ij}^* b_i^\dagger b_j + \text{к.с.}) - \lambda_B \sum_i b_i^\dagger b_i, \quad (6.20)$$

где

$$F_{ij} = -t \langle b_i^\dagger b_j \rangle + \frac{J}{2} \sum_{\sigma} \langle f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} \rangle, \quad B_{ij} = -t \sum_{\sigma} \langle f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} \rangle, \quad (6.21)$$

$$\lambda_F = \mu + \lambda + (1 - \delta)J, \quad \lambda_B = \lambda. \quad (6.22)$$

Этот гамильтониан описывает систему невзаимодействующих фермионов (спинов) и бозонов (холонов), связь между которыми осуществляется через эффективные параметры  $F_{ij}$  и  $B_{ij}$  перескоков этих частиц по решетке. Величины  $\lambda_F$  и  $\lambda_B$  играют роль химических потенциалов спинов и холонов.

При аппроксимации исходного гамильтониана  $t$ - $J$ -модели к выражению (6.20) мы заменили локальный констрейн глобальным, отчего лагранжеев множитель  $\lambda_i$  потерял зависимость от узла решетки. В дальнейшем будем предполагать пространственно-однородные состояния, отвечающие гамильтониану (6.20), тогда энергии спинов и холонов — квазичастиц модели — определяются выражениями

$$\varepsilon_F(\mathbf{k}) = 2F(\cos k_x + \cos k_y), \quad \varepsilon_B(\mathbf{k}) = 2B(\cos k_x + \cos k_y), \quad (6.23)$$

где  $F$  и  $B$  — величины  $F_{ij}$  и  $B_{ij}$  для ближайших соседей. Таким образом, соотношения (6.21), записанные для ближайших соседей, представляют систему самосогласованных уравнений для величин  $F$  и  $B$ . К ним необходимо приписать еще уравнения сохранения числа электронов и усредненное по ансамблю Гиббса условие констрейна (6.2). Как известно, приближение среднего поля было бы точным, если бы электронные состояния характеризовались индексом  $\sigma = 1, 2, \dots, N_F$  (цветом) в пределе  $N_F \rightarrow \infty$ . В нашем случае спиновый индекс  $\sigma$  принимает только два значения, поэтому уравнения (6.21) заведомо приближенные. Остается при этом верить, что их решения принадлежат к тому же универсальному классу, что и в пределе  $N_F \rightarrow \infty$ . Уравнения (6.22) и (6.23) определяют большую ферми-поверхность для квазичастиц, как и для свободных частиц. Напомним, что при малых концентрациях дырок мы использовали другое приближение, а именно, слэив-фермионное представление (концепция магнитного полярона), которое давало малую ферми-поверхность квазичастиц: четыре кармана в окрестностях точек  $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ . При  $\delta > \delta_c$  антиферромагнитные корреляции подавляются, так что мы имеем совершенно другое состояние системы (спиновую жидкость). Поскольку  $\delta_c$  при разумных значениях параметров модели составляет несколько процентов, можно предполагать, что при  $\delta \geq 0,1$  адекватно слэив-бозонное представление и, в его рамках, приближение среднего поля. Переходная область между состояниями спин-полярона и спиновой жидкости не поддается описанию в терминах вспомогательных частиц.

Как и в случае модели Хаббарда, в рамках RPA-приближения из гамильтониана  $t$ - $J$ -модели, используя слэив-бозонное представление, получаем динамическую магнитную восприимчивость [110]:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 + J(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (6.24)$$

где

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f(\xi_{\mathbf{k}})}{\omega + \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\delta}. \quad (6.25)$$

Здесь  $J(\mathbf{q}) = J(\cos q_x + \cos q_y)$ ,  $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_F(\mathbf{k}) - \lambda_F$ . Величина  $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$  является динамической восприимчивостью системы, описываемой гамильтонианом (6.20), т.е. системы невзаимодействующих фермионов. Однако ширина их зоны зависит от температуры и концентрации дырок через параметр  $F$ . Заметим, что формула (6.24) имеет ту же структуру, что и RPA-восприимчивость в модели Хаббарда. В последнем случае вместо  $J(\mathbf{q})$  стоит параметр  $U$  кулоновского отталкивания на узле, а вместо спектра фермионов  $\xi_{\mathbf{k}}$  стоит спектр невзаимодействующих электронов в решетке. Эти отличия приводят к существенному различию в поведении магнитной восприимчивости в  $t$ - $J$ -модели и модели Хаббарда.

Приведем результаты численного исследования уравнений (6.21)–(6.25) [110]. На рисунках 15 и 16 представлено поведение статической магнитной восприимчивости как функции волнового вектора и температуры. В численных расчетах использовалось типичное соотношение между параметрами модели  $t$  и  $J$ , а именно,  $t = 4J$ . Из рисунка 15а видим заметное возрастание восприимчиво-

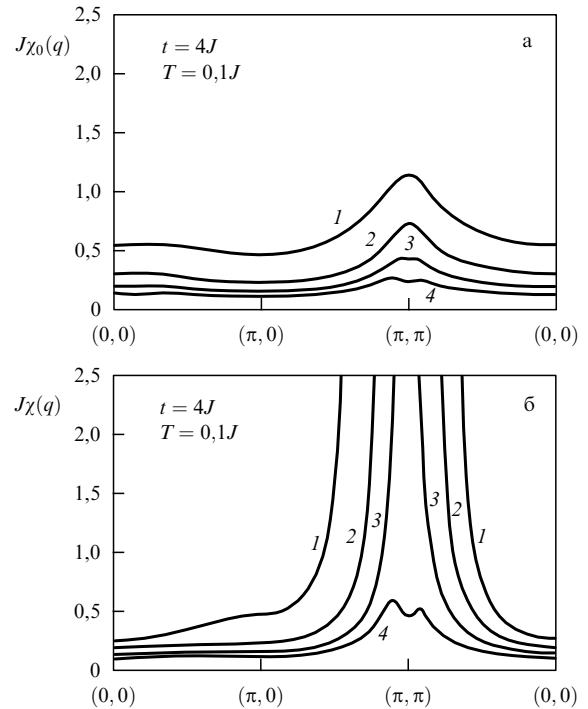
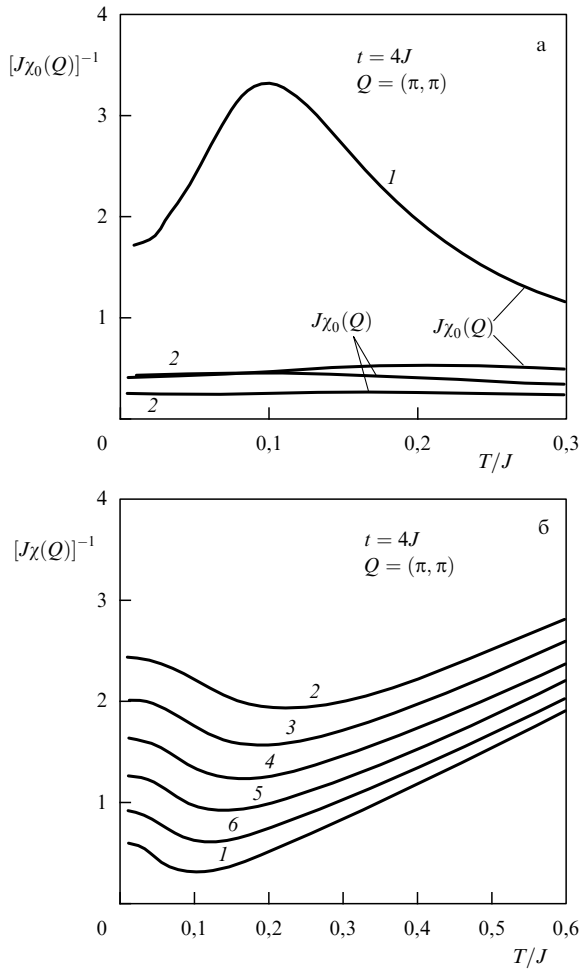


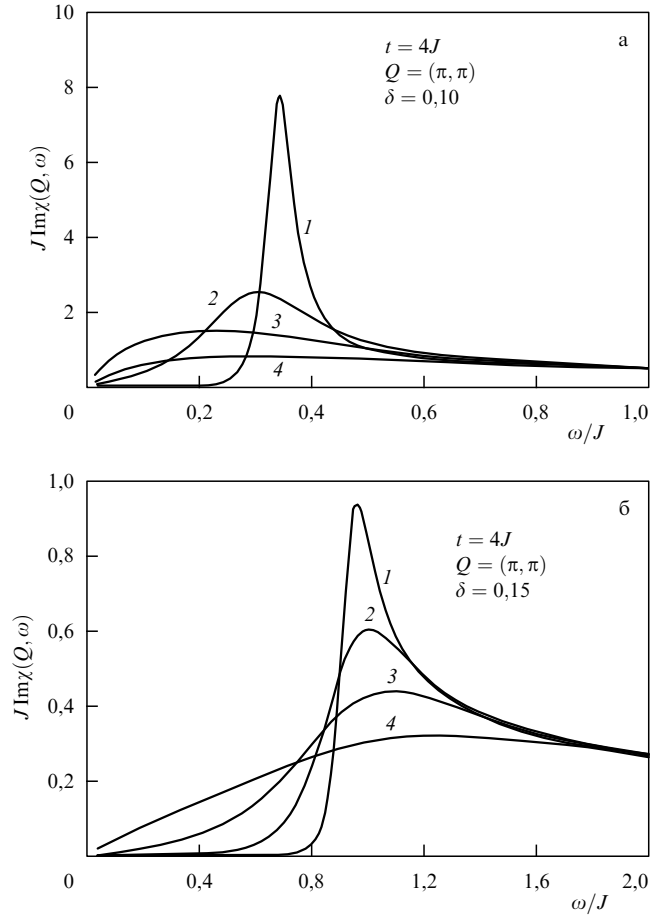
Рис. 15.  $q$ -зависимость статической спиновой восприимчивости (а)  $\chi_0(\mathbf{q})$  и (б)  $\chi(\mathbf{q})$  для нескольких значений  $\delta$  [110]: 1 —  $\delta = 0$ ; 2 —  $\delta = 0,05$ ; 3 —  $\delta = 0,10$ ; 4 —  $\delta = 0,15$ .



**Рис. 16.** Температурная зависимость статической спиновой восприимчивости (а)  $\chi_0(\mathbf{q})$  и (б)  $\chi(\mathbf{q})$  при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  для нескольких значений  $\delta$  [110]: 1 —  $\delta = 0,10$ ; 2 —  $\delta = 0,15$ ; 3 —  $\delta = 0,14$ ; 4 —  $\delta = 0,13$ ; 5 —  $\delta = 0,12$ ; 6 —  $\delta = 0,11$ .

сти в окрестности точки  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  для величины  $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$  в интервале концентраций  $\delta = 0,10 \div 0,15$ . Рисунок 15б показывает резкое усиление восприимчивости при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ , свидетельствующее о приближении неустойчивости немагнитного состояния. При малых  $\delta$  и низких  $T$   $\chi(\mathbf{q})$  расходится в некоторой точке вблизи  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ , что указывает на неустойчивость относительно образования несоизмеримой антиферромагнитной структуры. С увеличением  $\delta$  расходимости нет, хотя максимум  $\chi(\mathbf{q}, 0)$  быстро убывает. Таким образом, в интервале концентраций  $\delta = 0,10 \div 0,15$  система остается немагнитной при низких температурах. Как видно из рис. 16а, с ростом  $T$  восприимчивость проходит через максимум при  $\delta = 0,10$ , но он исчезает уже при  $\delta = 0,15$ . Температурная зависимость обратной восприимчивости (рис. 16б) соответствует закону Кюри–Вейсса  $\chi \propto 1/T$  в широком интервале температур, однако  $\chi(\mathbf{q}, 0)$  при  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  практически не зависит от температуры. Таким образом, в рассматриваемом состоянии спиновой жидкости система ведет себя в однородном поле как паулиевский магнетик, а в неоднородном поле ( $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ ) — как магнетик с локализованными магнитными моментами.

Перейдем теперь к частотной зависимости  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ . Спектральная плотность спиновых возбуждений опреде-



**Рис. 17.**  $\omega$ -зависимость  $\text{Im } \chi(\mathbf{Q}, \omega)$  для (а)  $\delta = 0,10$  и (б)  $\delta = 0,15$  [110]: 1 —  $T = 0,02J$ ; 2 —  $T = 0,05J$ ; 3 —  $T = 0,10J$ ; 4 —  $T = 0,20J$ .

ляется величиной

$$\text{Im } \chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\text{Im } \chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{[1 + J(\mathbf{q}) \text{Re } \chi_0(\mathbf{q}, \omega)]^2 + [J(\mathbf{q}) \text{Im } \chi_0(\mathbf{q}, \omega)]^2}, \quad (6.26)$$

где

$$\text{Im } \chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \pi \sum_{\mathbf{k}} \delta[\varepsilon_{\mathbf{F}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon_{\mathbf{F}}(\mathbf{k}) - \omega] \times \\ \times [f(\varepsilon_{\mathbf{F}}(\mathbf{k}) - \lambda_{\mathbf{F}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{F}}(\mathbf{k}) + \omega - \lambda_{\mathbf{F}})]. \quad (6.27)$$

Из последней формулы видно, что  $\text{Im } \chi_0(\mathbf{q}, \omega)$  имеет пик вблизи  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_{\mathbf{M}}$ , где  $\mathbf{q}_{\mathbf{M}}$  — вектор нестинга. Этот пик сдвигается при увеличении  $\omega$ , и для  $\omega \sim 2|\lambda_{\mathbf{F}}|$  пик приходится на  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ , так что в этом случае имеется эффективный нестинг при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ . Частотная зависимость  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  на волновом векторе  $\mathbf{Q}$  показана на рис. 17 для двух значений  $\delta$ . В обоих случаях при низких температурах низкочастотная ветвь спиновых флуктуаций отсутствует, как если бы была щель в спектре коллективных движений спин-системы. Понять это можно, если представить формулу (6.27) в виде

$$\text{Im } \chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\pi}{2} \rho\left(\frac{\omega}{2}\right) \left[ f\left(|\lambda_{\mathbf{F}}| - \frac{\omega}{2}\right) - f\left(|\lambda_{\mathbf{F}}| + \frac{\omega}{2}\right) \right], \quad (6.28)$$

где  $\rho(\omega)$  — плотность состояний спинов. Из нее следует, что при низких температурах  $\text{Im} \chi_0(\mathbf{Q}, \omega)$  при  $|\omega| < 2|\lambda_F|$  очень мала. При  $\omega \sim 2|\lambda_F|$  эта величина быстро увеличивается, как показано на рис. 17. С ростом температуры псевдощель в спектре зашатаивается. Кроме того, при увеличении  $\delta$  пороговая частота в спектре увеличивается, однако величина пика существенно уменьшается.

Подавление низкочастотного участка спектра флуктуаций при низких температурах было обнаружено в работах по неупругому рассеянию нейтронов на ВТСП-материалах. Эта проблема интенсивно обсуждалась в ряде теоретических работ, однако, как было предложено в [110], это явление не связано с истинной псевдощелью в спектре, а является прямым следствием нарушения нестинга при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  в случае малых концентраций дырок.

## 7. Фазовая диаграмма

### 7.1. Фазовое расслоение

До сих пор мы предполагали, что в системе реализуются пространственно однородные фазы, независимо от вида магнитного упорядочения: электронная плотность предполагалась постоянной в каждой точке. Однако простые физические соображения позволяют предполагать возможность расслоения системы на фазы с различной плотностью электронов (дырок). Впервые идея фазового расслоения в модели Хаббарда была высказана в ранних работах [115, 116], затем для  $t$ - $J$ -модели реализована в [117, 118]. Почувствовать тенденцию к фазовому расслоению при достаточно больших  $J$  можно из простых соображений. Если в антиферромагнетик внедряется дырка, то обменная энергия увеличивается на величину  $zJ$ . При двух дырках, расположенных далеко друг от друга, изменение энергии будет  $2zJ$ , а если дырки являются ближайшими соседями, — то только  $2(z-1)J$ , откуда ясно, что с точки зрения обменной энергии выгодна организация областей с повышенной концентрацией дырок. Разумеется, структура расслоенной двухфазной системы должна определяться минимизацией полной энергии, т.е. с учетом энергии перескоков по решетке.

Ввиду сложности задачи большое значение имеют численные расчеты. Результаты первых расчетов представлены на рис. 18. На нем изображена фазовая диаграмма на плоскости  $(n, J/t)$ , построенная для двумерной  $t$ - $J$ -модели с помощью точной диагонализации  $4 \times 4$ -кластера [118] и с помощью высокотемпературных

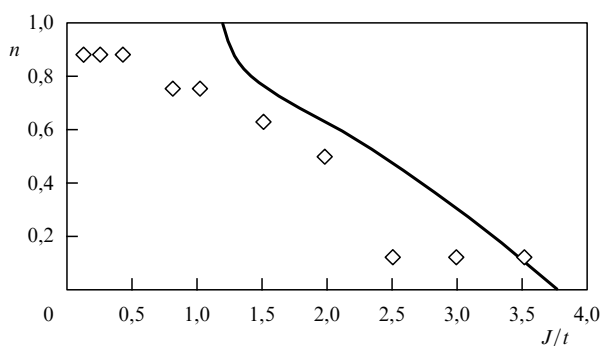


Рис. 18. Фазовая диаграмма для двумерной  $t$ - $J$ -модели [2].

разложений вплоть до десятого порядка по  $1/T$  [119]. Граница раздела однородной и расслоенной фаз отмечена ромбиками (по результатам [118]) и сплошной линией [119]. Как видно, оба метода показывают, что фазовое расслоение занимает большую площадь фазовой диаграммы. Однако между ними имеется расхождение в области малых  $J$  и вблизи  $n = 1$ . Вблизи половинного заполнения, по данным [119], расслоение происходит при  $J/t \gtrsim 1$ , вопреки результатам [118]. В работе [120] были проведены проверочные вычисления, и авторы пришли к заключению, что точки на рис. 18 следует трактовать не как линию, отсекающую область фазового расслоения, а как край области, где происходит связывание дырок в пары, но не в кластеры, что должно было бы происходить при больших значениях  $J$ . К аналогичным заключениям, используя кластеры больших размеров, пришли авторы [121, 122].

Вопрос об образовании связанных состояний двух или большего числа дырок исследовался в работах [123–126]. До численных результатов работы [123] была исследована проблема взаимодействия двух дырок в антиферромагнитной матрице вариационными способами [126, 127], при этом волновая функция включала пять состояний: дырка на узле и на четырех ближайших соседях. Решение двухчастичного уравнения Бете–Солпитера показало, что имеются связанные состояния двух дырок  $d$ - и  $p$ -типа, причем энергия связи как функция  $J/t$  хорошо согласуется с численными расчетами [129]. При малых значениях  $J$ , таких что  $t/J \gtrsim 2 \div 3$ , связанные состояния не существуют. В работе [123] на кластерах, содержащих до 26 узлов, было показано, что ниже  $J_c$  ( $J/t > 0,5$ ) возникают стабильные связанные состояния из четырех частиц; при дальнейшем уменьшении  $J$  ( $J/t > 0,02$ ) они сменяются связанными состояниями дырочных пар  $d$ -симметрии. Таким образом, система дырок, внедренных в антиферромагнитную матрицу, в интервале значений  $0,02 < J/t < J_c$  представляет собой жидкость, состоящую из связанных совокупностей дырок числом 4 или 2, в зависимости от величины  $J$ . При  $J/t < 0,02$  имеет место парамагнитное состояние дырочной жидкости, которое при очень малых  $J$  сменяется на ферромагнитное. Таким образом, если идти со стороны малых  $J$ , фиксируя дырочную концентрацию, мы имеем дело с дырочной жидкостью, состоящей из связанных пар, потом из четверок и т.д., и, наконец, переходим в режим фазового расслоения. Наличие же области ферромагнитного состояния при очень малых  $J$  подтверждается высокотемпературным разложением [130], равно как и явление расслоения фаз [119].

Результаты [123] относятся к весьма большим концентрациям дырок  $\delta \approx 0,15$ , когда при  $T = 0$  дальнего порядка не существует. Для выяснения влияния ближнего магнитного порядка в [123] была вычислена статическая магнитная восприимчивость. Оказалось, что вблизи точки  $(\pi, \pi)$  имеется большой пик, из которого можно оценить длину магнитных коротковолновых корреляций. Он составляет примерно три параметра решетки. На такой длине пара дырок должна вести себя так же, как в антиферромагнитной матрице. Эти коротковолновые спиновые флуктуации генерируют притяжение между дырками, связывая их по парам, четверкам и т.д.

Вопрос о том, будут ли возникать такие связанные состояния в  $t$ - $J$ -модели с очень большой концентрацией дырок (низкой электронной плотностью), исследовался в

работе [131] с помощью численных расчетов по квантовому методу Монте-Карло и с использованием аналитических результатов [132, 133]. При больших  $J/t \gtrsim 3,5$  возникает расслоение фаз. При понижении  $J/t$  появляется фаза со связанными электронными парами s-типа, сменяющаяся парами d-типа, а затем, при  $J/t \lesssim 1$ , — p-типа. Устойчивые связанные кластеры с большим числом частиц не появляются ни при каких значениях  $J/t$ .

## 7.2. От модели Хаббарда к $t$ - $J$ -модели

В гайзенберговской модели часто используют квазиклассический подход, основанный на рассмотрении предела большого атомного спина  $S \gg 1$  и разложения по степеням  $1/S$  с последующим формальным переходом к  $S = 1/2$ . Одной из реализаций такого подхода является формализм Гольдштейна–Примакова, в котором спиновые операторы приближенно заменяют на бозевские операторы спиновых отклонений. Подобный подход применяется в ряде работ к  $t$ - $J$ -модели [134–136], где  $X$ -операторы Хаббарда приближенно выражаются через бозевские и фермиевские операторы с помощью формального разложения по степеням  $1/\mathcal{N}$ , где  $\mathcal{N}$  — число разрешенных электронов на узле, которое в собственно  $t$ - $J$ -модели равно единице. В конце вычислений, использующих разложение по  $1/\mathcal{N}$ , полагается  $\mathcal{N} = 1$ . В рамках этого приближения был исследован вопрос о спиральной фазе в  $t$ - $J$ -модели. В [137] впервые было показано, что при отклонении от половинного заполнения неелевский антиферромагнитный порядок может искажаться длинноволновой модуляцией, так что возникает спиральная структура с волновым вектором  $\mathbf{Q}$ , уменьшенным на величину, пропорциональную концентрации дырок. Аналогичные результаты были получены и в других подходах [138–144]. Мы воспользуемся изложением этого вопроса в рамках квазиклассического приближения [136].

При обсуждении магнитной фазовой диаграммы  $t$ - $J$ -модели следует также привлекать фазовые диаграммы модели Хаббарда, поскольку в пределе  $U \gg W$  они должны согласовываться друг с другом. Следует напомнить, что при выводе гамильтониана  $t$ - $J$ -модели из модели Хаббарда пренебрегается трехцентровыми членами, которые могут давать некоторые специфические эффекты.

Мы рассмотрим здесь лишь частные аспекты сравнения фазовой диаграммы  $t$ - $J$ -модели с той областью фазовой диаграммы модели Хаббарда, для которой  $U \gg W$ . Прежде всего рассмотрим, как зависит температура Нееля  $T_N$  от величины кулоновского отталкивания  $U$ , когда она переходит из режима слабых корреляций  $U \ll W$  в режим сильных корреляций  $U \gg W$ . Этому вопросу было посвящено много исследований; мы приведем данные численных расчетов для половинного заполнения в модели Хаббарда по методу точной диагонализации малых кластеров [145] (рис. 19, светлые кружки). Темные кружки на рис. 19 — результаты ранних вычислений по QMC-методу [146]. Штриховая кривая получена для малых  $U \ll W$  по методу среднего поля, приводящего к уравнению на  $T_N$ :

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tanh[\varepsilon(\mathbf{k})/2T_N]}{2\varepsilon(\mathbf{k})}, \quad (7.1)$$

а сплошная кривая — из высокотемпературных разложений для модели Гайзенберга с обменным интегралом

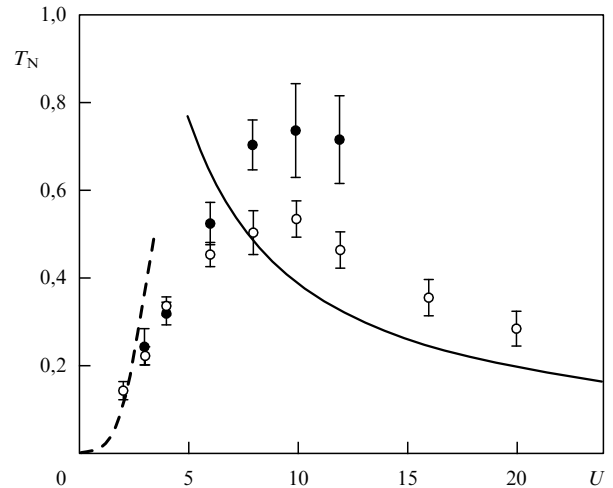


Рис. 19. Температура Нееля  $T_N$  как функция  $U$  для модели Хаббарда [145].

$J = 2t^2/U$ . Последние приводят к результату

$$T_N = 3,8 \frac{t^2}{U}. \quad (7.2)$$

Теоретические кривые могут рассматриваться как асимптотики к истинной кривой, описывающей кроссовер из режима слабых в режим сильных корреляций. В области  $U \gg W$  формула (7.2), относящаяся к  $t$ - $J$ -модели при  $n = 1$ , описывает поведение, качественно согласующееся с поведением модели Хаббарда в соответствующей области.

Другой аспект, в котором следует сравнить эти две модели, есть фазовая диаграмма на плоскости  $(U/t, n)$  при  $T = 0$  (рис. 20) [138]. Мы выбрали эту работу потому, что в ней, наряду с антиферромагнитной фазой, существующей, в частности, для  $n = 1$  при всех  $U$ , обнаружена в области  $U \gg W$  особая фаза — парамагнитная с ближним порядком (SRO-P). В работе [138] использовалось слэив-бозонное четырехполюсное представление [139] и приближение седловой точки в континуальном интеграле для статистической суммы. Этот подход давал результаты для различных электронных и магнитных свойств модели, хорошо согласующиеся с численными методами точной диагонализации малых кластеров и QMC-методом. В [138] разработана процедура включения ближнего порядка в приближении седловой точки. Это привело к существенному изменению фазовой диаграммы в области больших  $U \gtrsim W$ . Вместо часто получаемой в области  $U \gg W$  и  $\delta \ll 1$  ферромагнитной фазы возникает парамагнитная фаза с ближним порядком. Эта фаза оказывается локально устойчивой относительно фазового расслоения. За счет этой фазы область антиферромагнитной фазы сокращается по сравнению со случаем, когда эффект ближнего порядка не учитывается. Однако новая граница антиферромагнитной фазы согласуется с результатами, представленными в разделе 5. Так, при  $U/t = 8$  критическая концентрация  $\delta_c \sim 0,03$ .

Фазовую диаграмму, представленную на рис. 20, следует рассматривать как типичный пример, в котором только основные контуры имеют общие черты, слабо зависящие от выбранных приближений. При других приближениях на плоскости  $(U/t, n)$  могут появиться также другие фазы, например спиральная, ферромагнит-

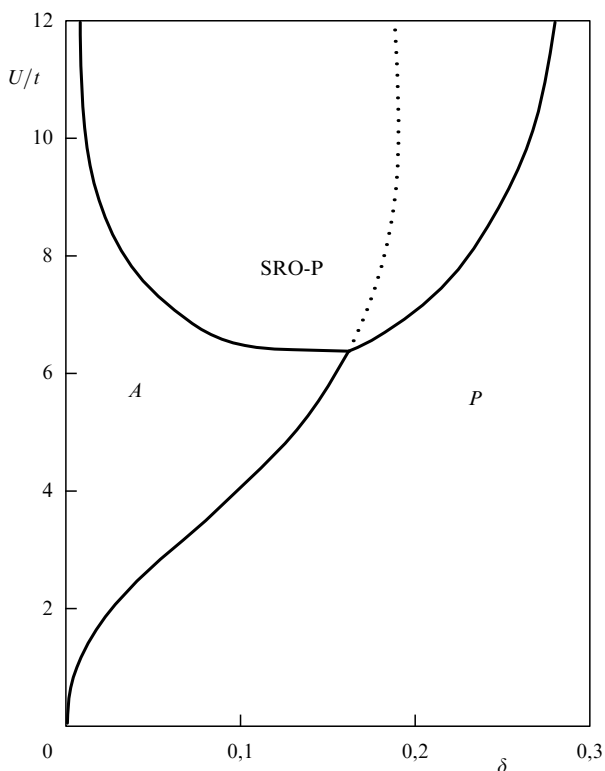


Рис. 20. Фазовая диаграмма при  $T=0$  для модели Хаббарда с областью парамагнитной фазы с ближним порядком [138].

ная или области фазового расслоения. Вопрос о полной фазовой диаграмме модели Хаббарда, или даже  $t$ - $J$ -модели остается пока открытым, и в этой ситуации следует скорее доверять численным методам типа точной диагонализации малых кластеров или QMC-методу, чем аналитическим.

## 8. Заключение

В данном обзоре мы старались дать систематическое исследование  $t$ - $J$ -модели преимущественно вблизи половинного заполнения и в пространстве размерности  $d=2$ . Такой выбор отражает основное направление исследований, нацеленных главным образом на изучение ВТСП-соединений медно-оксидной группы. Прогресс, достигнутый в понимании основных свойств модели, обусловлен комплексным характером исследований, в которых наряду с аналитическими методами широко используются численные методы, в первую очередь по точной диагонализации малых кластеров и по квантовому методу Монте-Карло. Результаты численных исследований содержатся в известном обзоре Даготто [7], где также дается детальное сравнение с экспериментальными данными по ВТСП-соединениям. По этой причине в нашем обзоре преобладают аналитические подходы.

Следует констатировать, что ввиду сложности гамильтониана  $t$ - $J$ -модели не существует единого математического подхода, пригодного для описания модели в широкой области параметров  $t$ ,  $J$ ,  $n$  и  $T$ . Гамильтониан модели достаточно просто выражается в терминах  $X$ -операторов Хаббарда как квадратичная форма этих операторов, однако эта простота иллюзорна ввиду сложности перестановочных соотношений для  $X$ -опера-

торов. По этой причине обычно  $X$ -операторы выражают в виде произведения ферми- и бозе-операторов с привлечением некоторых констрейнов, отражающих простые физические требования: при больших  $U$  на каждом узле не может быть более одного электрона. Подобная процедура реализует конкретное представление алгебры  $X$ -операторов, однако таких представлений может быть много, отсюда неоднозначность получаемых эффективных гамильтонианов. Выбор конкретного представления априори имеет слабое обоснование, и его адекватность заданным физическим условиям определяется разумностью физических результатов. Опыт показывает, что при малых концентрациях  $\delta < \delta_c$ , где реализуется антиферромагнитное состояние, хорошо работает слэив-фермионное представление, а при больших концентрациях  $\delta > \delta_c$ , в состоянии спиновой жидкости, скорее эффективны слэив-бозонные представления.

В первом случае возникает эффективный гамильтониан типа гамильтониана Фрѐлиха, где бесспиновые фермионы взаимодействуют со спиновыми волнами. В результате этого взаимодействия формируется магнитный полярон — квазичастица, переносящая электрический заряд. Во втором случае обычно приходят к представлению, в котором фермионы и бозоны взаимодействуют друг с другом посредством калибровочных полей, возникающих из-за констрейнов. В этой ситуации в системе возникает коллективная релаксационная мода, которая определяет всю динамику системы в состоянии спиновой жидкости. Вот эти две области фазовой диаграммы — антиферромагнитное состояние и состояние спиновой жидкости — наиболее надежно установлены для  $t$ - $J$ -модели.

В отношении магнитного поларона большинство работ приводит к единому результату: ферми-поверхность дырок образует четыре кармана, центрированные в точках  $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$  обратного пространства. Зона квазичастичных состояний имеет ширину порядка  $J$ , а интенсивность квазичастичных пиков  $Z \sim J/t$ . Кроме того, имеется широкая область некогерентных состояний порядка  $zt$ , которая соответствует возбуждению внутренней структуры поларона. Именно эти некогерентные состояния дают основной вклад в одну из функций динамического отклика — магнитную восприимчивость. Описанная картина возникает в SCBA-приближении и хорошо подтверждается численными методами. Область спиновой жидкости, соответствующая концентрациям дырок  $\delta > \delta_c$ , когда антиферромагнитный порядок подавлен, характеризуется флуктуациями киральности. Обе области соответствуют допированным состояниям ВТСП-соединений. Различные транспортные свойства  $t$ - $J$ -модели в этих состояниях удовлетворительно описывают многие физические свойства ВТСП-соединений (см. обзор [7]).

Описанная картина имеет место в области параметров  $\delta \ll 1$  и  $J \ll t$ . С ростом  $J$  появляются новые явления: дырки начинают связываться в пары, затем в четверки частиц и, наконец, при  $J \sim t$  в системе возникает фазовое расслоение, когда дырки группируются в кластеры с ферромагнитным локальным порядком, включенные в антиферромагнитную матрицу, свободную от дырок. Таким образом, в определенной части фазовой диаграммы на плоскости  $(J/t, n)$  существует область, где возникает притяжение между дырками, связывающее их в пары. Конденсация этих пар означала бы появление

сверхпроводящего состояния. Проблема сверхпроводимости в  $t-J$ -модели интенсивно исследуется в настоящее время. Мы опустили обсуждение этого вопроса, поскольку он может составить тему отдельного большого обзора. Ранние исследования этой проблемы см. в обзорах [9,7], современные результаты — в работах [147–174]. Отметим, что в настоящее время формируется представление о том, что взаимодействие дырок через спиновые флуктуации приводит в  $t-J$ -модели к сверхпроводящему состоянию с симметрией параметра порядка  $d$ -типа и величиной  $T_c$  в несколько десятков градусов (см. также новейшие работы [175–180]).

Поведение  $t-J$ -модели в широком интервале электронных концентраций  $0 < n < 1$  хотя и менее актуально для проблем ВТСП-соединений, тем не менее представляет несомненный теоретический интерес. Центральной проблемой здесь является описание кроссовера при увеличении электронной концентрации от режима коллективизированного магнетизма к режиму с появлением локализованных магнитных моментов. Эта проблема исследовалась нами ранее в терминах диаграммной техники с  $X$ -операторами (см. книгу [181]). С помощью этой техники было разработано обобщенное приближение хаотических фаз (GRPA) [182–185], в рамках которого показано, что, начиная с некоторой критической концентрации  $n_c \sim 0,6$ , динамическая магнитная восприимчивость модели содержит оба вклада: типа Паули, не зависящего от температуры, и типа Кюри–Вейсса  $\sim 1/T$ . Появление последнего вклада свидетельствует о возникновении локализованных магнитных моментов. Эти результаты были представлены нами в обзоре [9]. Было бы важным подтвердить их другими методами, в особенности численными методами типа молекулярной динамики или точной диагонализации малых кластеров.

## Список литературы

- Hubbard J *Proc. R. Soc. London Ser. A* **276** 238 (1963)
- Hubbard J *Proc. R. Soc. London Ser. A* **281** 401 (1964)
- Изюмов Ю А *УФН* **165** 403 (1995)
- Herring C, in *Magnetism IV* (Eds G T Rado, H Suhl) (New York: Academic, 1966)
- Anderson P W *Phys. Rev.* **115** 2 (1959)
- Anderson P W *Science* **235** 1196 (1987)
- Dagotto E *Rev. Mod. Phys.* **66** 763 (1994)
- Zhang F C, Rice T M *Phys. Rev. B* **37** 3759 (1988)
- Изюмов Ю А *УФН* **161** 3 (1991)
- Harris A B, Lange R V *Phys. Rev.* **157** 295 (1967)
- Chao K A, Spalek J, Oles A M *J. Phys. C* **10** L271 (1977)
- Gros C, Joynt R, Rice T M *Phys. Rev. B* **36** 381 (1987)
- Hubbard J *Proc. R. Soc. London Ser. A* **285** 542 (1965); **296** 82 (1967)
- Barnes S E *J. Phys. F* **6** 1375 (1976); **7** 2637 (1977)
- Coleman P *Phys. Rev. B* **29** 3035 (1984)
- Read N, Newns D M *J. Phys. C* **16** 3273 (1983)
- Kotliar G, Ruckenstein A E *Phys. Rev. Lett.* **57** 1362 (1986)
- Lee P A, Nagaosa N *Phys. Rev. B* **46** 5621 (1992)
- Zou Z, Anderson P W *Phys. Rev. B* **37** 627 (1988)
- Richard J L, Yushankhai V Yu *Phys. Rev. B* **47** 1103 (1993)
- Wang Y R, Rice M J *Phys. Rev. B* **49** 4360 (1994)
- Халиуллин Г *Письма в ЖЭТФ* **52** 999 (1990)
- Wang Y R *Phys. Rev. B* **51** 234 (1995)
- Loos J *Phys. Rev. B* **53** 12556 (1996)
- Chang Z *Phys. Rev. B* **53** 1171 (1996)
- Le Guillou J C, Ragoucy E *Phys. Rev. B* **52** 2403 (1995)
- Arrigoni E, Strinati G C *Phys. Rev. B* **52** 2428 (1995)
- Булаевский Л Н, Хомский Д И *ЖЭТФ* **52** 1603 (1967)
- Булаевский Л Н, Нагаев Э Л, Хомский Д И *ЖЭТФ* **54** 1562 (1968)
- Brinkman W F, Rice T M *Phys. Rev. B* **2** 1324 (1970)
- Metzner W, Schmit P, Vollhardt D *Phys. Rev. B* **45** 2237 (1992)
- Metzner W, Vollhardt D *Phys. Rev. Lett.* **62** 324 (1989)
- Strack R, Vollhardt D *Phys. Rev. B* **46** 13852 (1992)
- Mohan M M *J. Phys.: Condens. Matter* **3** 4307 (1991)
- Dagotto E et al. *Phys. Rev. B* **41** 9049 (1990)
- Vlaming R, Vollhardt D *Phys. Rev. B* **45** 4637 (1992)
- Lifshitz I M *Adv. Phys.* **13** 483 (1964)
- Horsch P et al. *Physica C* **162–164** 783 (1989)
- Horsch P *Helv. Phys. Acta* **63** 346 (1990)
- Trugman S A *Phys. Rev. B* **41** 892 (1990)
- von Szczepanski K J et al. *Phys. Rev. B* **41** 2017 (1990)
- Sega I, Prelovsek P *Phys. Rev. B* **42** 892 (1990)
- Dagotto E, Riera J *Phys. Rev. Lett.* **70** 682 (1993)
- Inoue J, Maekawa S *J. Phys. Soc. Jpn.* **59** 2110 (1990)
- Liu Z, Manousakis E *Phys. Rev. B* **45** 2425 (1992)
- Marsiglio F et al. *Phys. Rev. B* **43** 10882 (1991)
- Kane C L, Lee P A, Read N *Phys. Rev. B* **39** 6880 (1989)
- Martinez G, Horsch P *Phys. Rev. B* **44** 317 (1991)
- Plakida N M, Oudovenko V S, Yushankhai V Yu *Phys. Rev. B* **50** 6431 (1994)
- Richard J L, Yushankhai V Yu *Phys. Rev. B* **50** 12927 (1994)
- Richard J L, Yushankhai V Yu *Phys. Rev. B* **47** 1103 (1993)
- Jian-Xin Li, Chang-De Gong *Phys. Rev. B* **51** 6343 (1995)
- Igarashi J, Fulde P *Phys. Rev. B* **45** 12357 (1992)
- Khaliullin G, Horsch P *Phys. Rev. B* **47** 463 (1993)
- Schmitt-Rink S, Varma C M, Ruckenstein A E *Phys. Rev. Lett.* **60** 2793 (1988)
- Церковников Ю А *ТМФ* **7** 250 (1971); **49** 219 (1981)
- Ramsak A, Horsch P *Phys. Rev. B* **48** 10559 (1993)
- de Alcantara Bonfim O F, Reiter G, in *High Temperature Superconductivity* (Eds J Ashkenazi et al.) (New York: Plenum Press, 1991)
- Igarashi J, Fulde P *Phys. Rev. B* **48** 998 (1993)
- Sherman A, Schreiber M *Phys. Rev. B* **48** 7492 (1993)
- Varma C M et al. *Phys. Rev. Lett.* **63** 1996 (1989)
- Нагаев Э Л *ЖЭТФ* **54** 228 (1968)
- Нагаев Э Л *Физика магнитных полупроводников* (М.: Наука, 1979)
- Sabczynski J, Schreiber M, Sherman A *Philos. Mag. B* **65** 881 (1992)
- Sabczynski J, Schreiber M, Sherman A *Phys. Rev. B* **48** 543 (1993)
- Nagaoka Y *Phys. Rev. Lett.* **147** 392 (1966)
- Pines D, in *Polarons and Excitons* (Eds C G Kuper, D Wkifield) (Edinburgh: Oliver and Boyd, 1962)
- Barentzen H *Phys. Rev. B* **53** 5598 (1996)
- Barentzen H *Z. Phys. B* **94** 161 (1994)
- Barentzen H, Wrobel P *Z. Phys. B* **93** 375 (1994)
- Dagotto E, Nazarenko A, Boninsegni M *Phys. Rev. Lett.* **73** 728 (1994)
- Bulut N, Scalapino D J, White S R *Phys. Rev. B* **50** 7215 (1994)
- Tanamoto T, Kohno H, Fukuyama H *J. Phys. Soc. Jpn.* **62** 717 (1993)
- Benard P, Chen L, Tremblay A M S *Phys. Rev. B* **47** 15217 (1993)
- Si Q et al. *Phys. Rev. B* **47** 9055 (1993)
- Lee P A *Phys. Rev. Lett.* **63** 680 (1989)
- Tohyama T, Maekawa S *Phys. Rev. B* **49** 3596 (1994)
- Gooding R J, Vos K J E, Leung P W *Phys. Rev. B* **50** 12866 (1994)
- Lavagna M, Stemmman G *Phys. Rev. B* **49** 4235 (1994)
- Bala J, Oles A M, Zaanen J *Phys. Rev. B* **52** 4597 (1995)
- Deeg M, Fehske H, Buttner H *Europhys. Lett.* **26** 109 (1994)
- Deeg M, Fehske H *Phys. Rev. B* **50** 17874 (1994)
- Deeg M et al. *Z. Phys. B* **95** 87 (1994)
- Chubukov A V, Musaelian K A *Phys. Rev. B* **50** 6238 (1994)
- Lin H Q, Hirsch J E *Phys. Rev. B* **35** 3359 (1987)
- Duffy D, Moreo A *Phys. Rev. B* **52** 15607 (1995)
- Kotliar G, Ruckenstein A E *Phys. Rev. Lett.* **57** 1362 (1986)
- Li T, Wolfe P, Hirschfeld P J *Phys. Rev. B* **40** 6817 (1989)
- Horsch P, Stephan W *Phys. Rev. B* **48** 10595 (1993)
- Belinicher V I, Chernyshev A L, Shubin V A *Phys. Rev. B* **53** 335 (1996)
- Eskes H, Oles A M *Phys. Rev. Lett.* **73** 1279 (1994)
- Тябликов С В *Методы квантовой теории магнетизма* (М.: Наука, 1964)
- Richard J L, Yushankhai V Yu *Physica C* **235–240** 2193 (1994)
- Rossat-Mignot J et al. *Physica C* **185–189** 86 (1991)
- Shirane G *Physica C* **185–189** 80 (1991)
- Belkasri A, Richard J L *Phys. Rev. B* **50** 12896 (1994)
- Sherman A, Schreiber M *Phys. Rev. B* **50** 12887 (1994)



98. Onufrieva F P, Kushnir V P, Toperverg B P *Phys. Rev. B* **50** 12935 (1994)
99. Tusch M A, Szczech Y H, Logan D E *Phys. Rev. B* **53** 5505 (1996)
100. Ioffe L B, Larkin A I *Int. J. Mod. Phys. B* **2** 203 (1988)
101. Ioffe L B, Larkin A I *Phys. Rev. B* **39** 8988 (1989)
102. Grilli M, Kotliar G *Phys. Rev. Lett.* **64** 1170 (1990)
103. Nagaosa N, Lee P A *Phys. Rev. Lett.* **64** 2450 (1990)
104. Lee P A, Nagaosa N *Phys. Rev. B* **46** 5621 (1992)
105. Liu Yu-Liang, Su Zhao-Bin *Phys. Rev. B* **48** 13018 (1993)
106. Ioffe L B, Kalmeyer V *Phys. Rev. B* **44** 750 (1991)
107. Ioffe L B, Wiegmann P *Phys. Rev. Lett.* **65** 653 (1990)
108. Ioffe L B, Kotliar G *Phys. Rev. B* **42** 10348 (1990)
109. Wen X G, Wilczek F, Zee A *Phys. Rev. B* **39** 11413 (1989)
110. Tanamoto T, Kuboki K, Fukuyama H *J. Phys. Soc. Jpn.* **60** 3072 (1991)
111. Sa de Melo C A R, Wang Z, Doniach S *Phys. Rev. Lett.* **68** 2078 (1992)
112. Raykin M *Phys. Rev. B* **51** 3856 (1995)
113. Tikofsky A M, Laughlin R B *Phys. Rev. B* **50** 10165 (1994)
114. Baskaran G, Anderson P W *Phys. Rev. B* **37** 580 (1988)
115. Haraeb О Л ЖЭТФ **54** 228 (1968)
116. Visscher P B *Phys. Rev. B* **10** 943 (1974)
117. Ioffe L B, Larkin A I *Phys. Rev. B* **37** 5730 (1988)
118. Emery V J, Kivelson S A, Lin H Q *Phys. Rev. Lett.* **64** 475 (1990)
119. Putikka W O, Luchini M, Rice T M *Phys. Rev. Lett.* **68** 538 (1992)
120. Dagotto E et al. *Phys. Rev. B* **45** 10741 (1992)
121. Fehske H, Waas V, Roder H, Buttner H *Phys. Rev. B* **44** 8473 (1991)
122. Prelovsek P, Zotos X *Phys. Rev. B* **47** 5984 (1993)
123. Poilblanc D *Phys. Rev. B* **52** 9201 (1995)
124. Hasegawa Y, Poilblanc D *Phys. Rev. B* **40** 9035 (1989)
125. Poilblanc D, Riera J, Dagotto E *Phys. Rev. B* **49** 12318 (1994)
126. Poilblanc D *Phys. Rev. B* **49** 1477 (1994)
127. Chernyshev A L, Dotsenko A V, Sushkov O P *Phys. Rev. B* **49** 6197 (1994)
128. Sushkov O P *Solid State Commun.* **83** 303 (1992)
129. Eder R *Phys. Rev. B* **45** 319 (1992)
130. Putikka W O, Luchini M U, Ogata M *Phys. Rev. Lett.* **69** 2288 (1992)
131. Hellberg C S, Manousakis E *Phys. Rev. B* **52** 4639 (1995)
132. Kagan M Y, Rice T M *J. Phys.: Condens. Matter* **6** 3771 (1994)
133. Chubukov A V *Phys. Rev. B* **48** 1097 (1993)
134. Marder M, Papanicolaou N, Psaltakis G C *Phys. Rev. B* **41** 6920 (1990)
135. Angelucci A, Sorella S *Phys. Rev. B* **47** 8858 (1993)
136. Psaltakis G C, Papanicolaou N *Phys. Rev. B* **48** 456 (1993)
137. Shraiman B T, Siggia E D *Phys. Rev. Lett.* **62** 1564 (1989)
138. Trapper U, Ihle D, Fehske H *Phys. Rev. B* **52** 11553 (1995)
139. Kotliar G, Ruckenstein A E *Phys. Rev. Lett.* **57** 1362 (1986)
140. Zhou C, Schulz H J *Phys. Rev. B* **52** R11557 (1995)
141. Yoshioka D J. *Phys. Soc. Jpn.* **58** 1516 (1989)
142. Jayaprakash C, Krishnamurthy H R, Sarker S *Phys. Rev. B* **40** 2610 (1989)
143. Flensberg K, Hedegard P, Pedersen M Brix *Phys. Rev. B* **40** 850 (1989)
144. Chakraborty B, Read N, Kane C, Lee P A *Phys. Rev. B* **42** 4819 (1990)
145. Scalettar R T, Scalapino D J, Sugar R L, Toussaint D *Phys. Rev. B* **39** 4711 (1989)
146. Hirsch J E *Phys. Rev. B* **35** 1851 (1987)
147. Puig-Puig L, Lopez-Aguilar F *Phys. Rev. B* **52** 17143 (1995)
148. Abrahams E, Balatsky A, Scalapino D J, Schrieffer J R *Phys. Rev. B* **52** 1271 (1995)
149. Mierzejewski M, Zielinski J *Phys. Rev. B* **52** 3079 (1995)
150. Batista C D, Lema F, Aligia A A *Phys. Rev. B* **52** 6223 (1995)
151. Altshuler B L, Ioffe L B, Millis A J *Phys. Rev. B* **53** 415 (1996)
152. Belinicher V I et al. *Phys. Rev. B* **51** 6076 (1995)
153. Quinlan S M, Hirschfeld P J, Scalapino D J *Phys. Rev. B* **53** 8575 (1996)
154. Brawner D A, Ott H R *Phys. Rev. B* **53** 8249 (1996)
155. Maly J, Liu D Z, Levin K *Phys. Rev. B* **53** 6786 (1996)
156. Franz M et al. *Phys. Rev. B* **53** 5795 (1996)
157. Radtke R J, Liechtenstein A I, Yakovenko V M, Das Sarma S *Phys. Rev. B* **53** 5137 (1996)
158. Beal-Monod M T, Maki K *Phys. Rev. B* **53** 5775 (1996)
159. Xu J H, Ren Y, Ting C S *Phys. Rev. B* **53** R2991 (1996)
160. Nazarenko A, Dagotto E *Phys. Rev. B* **53** R2987 (1996)
161. Zeyher R, Kulic M L *Phys. Rev. B* **53** 2850 (1996)
162. Normand B, Kohno H, Fukuyama H *Phys. Rev. B* **53** 856 (1996)
163. Tanaka Y, Kashiwaya S *Phys. Rev. B* **53** R11957 (1996)
164. Shimahara H, Matsuo S, Nagai K *Phys. Rev. B* **53** 12284 (1996)
165. Xu W, Ren Y, Ting C S *Phys. Rev. B* **53** 12481 (1996)
166. Hayn R et al. *Phys. Rev. B* **53** 11714 (1996)
167. Kuklov A B, Krakovsky A, Birman J L *Phys. Rev. B* **52** R7002 (1995)
168. Hwang E H, Das Sarma S *Phys. Rev. B* **52** R7010 (1995)
169. Xu J H, Ren Y, Ting C S *Phys. Rev. B* **52** 7663 (1995)
170. Bulut N, Scalapino D J *Phys. Rev. B* **53** 5149 (1996)
171. Onufrieva F, Rossat-Mignod J *Phys. Rev. B* **52** 7572 (1995)
172. Carbotte J P, Jiang C, Basov D N, Timusk T *Phys. Rev. B* **51** 11798 (1995)
173. Nazarenko A, Moreo A, Dagotto E, Riera J *Phys. Rev. B* **54** R768 (1996)
174. Heeb R, van Otterlo A, Sigrist M, Blatter J *Phys. Rev. B* **54** 9385 (1996)
175. Terrmann T, Nolting W *Phys. Rev. B* **53** 10579 (1996)
176. Sushkov O P *Phys. Rev. B* **54** 9988 (1996)
177. Khaliullin G, Horsch *Phys. Rev. B* **54** R9600 (1996)
178. Change Z *Phys. Rev. B* **54** 10046 (1996)
179. Zeyher R, Kulic M L *Phys. Rev. B* **54** 8985 (1996)
180. Bala J, Oles A M, Zaanen J *Phys. Rev. B* **54** 10161 (1996)
181. Изюмов Ю А, Кацнельсон М И, Скрябин Ю Н *Магнетизм коллективизированных электронов* (М.: Физматлит, 1994)
182. Izyumov Yu A, Letfulov B M *J. Phys.: Condens. Matter* **2** 8905 (1990)
183. Izyumov Yu A, Letfulov B M, Shipitsyn E V *J. Phys.: Condens. Matter* **4** 9955 (1992)
184. Izyumov Yu A, Letfulov B M, Shipitsyn E V *J. Phys.: Condens. Matter* **6** 5137 (1994)
185. Izyumov Yu A, Henderson J A *Int. J. Mod. Phys. B* **8** 1877 (1994)

### The $t$ - $J$ model for strongly correlated electrons and high- $T_c$ superconductors

Yu. A. Izyumov

*Institute of Metal Physics, Ural Division of the Russian Academy of Sciences  
ul. S. Kovalevskoi 18, 620219 Ekaterinburg, Russia  
Tel. (7-3432) 44-41 93. Fax (7-3432) 44-52 44  
E-mail: izyumov@ifm.e-burg.su*

A systematic study is made of the  $t$ - $J$  model as a working model for the copper oxide high- $T_c$  superconductors. The main focus is on the near-half-filling region (low hole concentrations) relevant to these materials. The theory of the magnetic polaron, which is a charge carrier traveling in an antiferromagnetic matrix, and that of antiferromagnetic ordering are discussed in a unified framework. The spin liquid state beyond the antiferromagnetic phase is examined. The Hamiltonian parameters-hole concentration phase diagram for the model is described and compared with that for the Hubbard model in the strong correlation limit. Two extensions of the  $t$ - $J$  model, the  $t$ - $t'$ - $J$  model and the one with the three-centre interaction, are discussed. Analytical strong correlation techniques are mostly employed in this review.

PACS numbers: **71.27.+a**, **74.90.+n**, **75.10.Lp**

Bibliography — 185 references

Received 30 September 1996