

Коллективные спин-волновые возбуждения в t - J -модели

С.Ф. Миронова¹, Э.Е. Зубов^{1,2}

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина
E-mail: zubov@dyakon.fti.ac.donetsk.ua

²Луганский национальный педагогический университет им. Т.Г. Шевченко

Статья поступила в редакцию 29 февраля 2008 г.

В рамках диаграммного метода теории возмущения исследовано влияние кинематического взаимодействия и косвенного обмена d -электронов на магнитную структуру узкозонного хаббардовского магнетика. В первом порядке теории возмущения рассмотрены все вклады в комбинированную заселенность и спиновую функцию Грина. Найдено самосогласованное уравнение для параметра порядка фаз. С учетом эффективного «одевания» линий взаимодействия определены все вклады в масс-оператор. Для ферромагнитной и парамагнитной фаз исследовано влияние косвенного антиферромагнитного обмена на спин-волновой спектр и затухание элементарных возбуждений. Для ферромагнитной структуры вычислена поправка к частоте спин-волновых возбуждений при нулевой температуре и дырочной концентрации $c \ll 1$, пропорциональная c в степени $4/3$. С ростом величины косвенного обмена частоты спин-волновых возбуждений уменьшаются линейно, что согласуется с результатами Нагаока и Зайцева. Установлено, что вблизи уровня Ферми спектр спиновых волн является когерентным. Вычислена поперечная динамическая восприимчивость системы для однородных ферромагнитной и парамагнитной структур.

У рамках діаграмного методу теорії збурення досліджено вплив кінематичної взаємодії й непрямого обміну d -електронів на магнітну структуру вузькозонного хаббардівського магнетика. У першому порядку теорії збурення розглянуто всі внески в комбіновану заселеність і спінову функцію Гріна. Знайдено самоузгоджене рівняння для параметра порядку фаз. З урахуванням ефективного «вдягання» ліній взаємодії визначено всі внески в мас-оператор. Для ферромагнітної та парамагнітної фаз досліджено вплив непрямого антиферромагнітного обміну на спин-хвильовий спектр і загасання елементарних збурень. Для ферромагнітної структури обчислено поправку до частоти спин-хвильових збурень при нульовій температурі та діркової концентрації $c \ll 1$, яка пропорційна c в ступені $4/3$. З ростом величини непрямого обміну частоти спин-хвильових збурень зменшуються лінійно, що погодиться з результатами Нагаока і Зайцева. Встановлено, що поблизу рівня Фермі спектр спинових хвиль є когерентним. Обчислено поперечну динамічну сприйнятливості системи для однорідних ферромагнітної й парамагнітної структур.

PACS: 71.10.Fd Решеточные фермионные модели (модель Хаббарда, др.);
71.27.+a Сильно коррелированные электронные системы; тяжелые фермионы;
75.10.Lp Зонные и коллективизированные модели;
75.30.Fv Волны спиновой плотности.

Ключевые слова: спин; спиновые волны; косвенный обмен; химический потенциал; ферромагнетик.

Введение

Теоретические и экспериментальные исследования физических свойств и структуры основного состояния систем с сильными электронными корреляциями

являются актуальными до настоящего времени. Особенно возрос интерес к таким системам после открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП).

Несмотря на значительные усилия, направленные в последние десятилетия на выяснение механизмов ВТСП, до сих пор существуют противоречивые мнения относительно механизмов, лежащих в основе спаривательного эффекта [1]. В этом плане исследование динамических явлений в сильно коррелированных электронных системах представляет определенный интерес, так как экспериментальные данные ясно свидетельствуют о важности спин-волновых возбуждений как связующем звене при сверхпроводящем спаривании d -электронов [2].

Впервые спин-волновые возбуждения для простой кубической (ПК) решетки с избыточным электроном в модели Хаббарда в пределе большого кулоновского отталкивания $U \gg t$ (t — интеграл перескока) исследованы в работе Нагаока [3]. Было показано, что спектр спиновых волн ферромагнитной (ФМ) фазы в длинноволновом пределе пропорционален квадрату волнового вектора и энергия возбуждения подавляется с ростом величины антиферромагнитного (АФМ) косвенного обмена.

Дальнейшие исследования этого вопроса касались в основном термодинамического обобщения полученных результатов. Так, в работе [4] была построена диаграммная техника в модели Хаббарда и в газовом приближении рассмотрен спектр спин-волновых возбуждений при нулевой температуре. На основе анализа однопетлевых собственно энергетических частей было получено, что частота спиновых волн пропорциональна дырочной концентрации и область существования ФМ фазы в ПК решетке меньше, чем в других решетках.

В работе [5] на основе диаграммного метода суммировался вклад паркетных диаграмм в спиновую гриновскую функцию. Это приближение соответствовало пределу слабого рассеяния квазичастиц на зарядовых флуктуациях. Получен нагаоковский результат для спектра бозе-частиц, и на фазовой диаграмме установлена область термодинамической устойчивости ФМ фазы.

Следует отметить, что в указанных выше работах не рассматривалась проблема самосогласования параметра порядка и химического потенциала. Самосогласованные интегральные уравнения для динамической спиновой восприимчивости в приближении связанной моды изучались в работе [6]. Это позволило установить, что в гидродинамическом пределе (волновой вектор $\mathbf{k} \rightarrow 0$, частота $\omega \rightarrow 0$) спиновая восприимчивость описывает диффузионную спиновую динамику, тогда как в высокочастотном пределе реализуются когерентные спин-волновые возбуждения.

Сложность описания динамических свойств коллективизированных электронов в узкозонном хаббардовском магнетике связана с тем, что по-прежнему остается открытым вопрос о его основном магнитном

состоянии. В работах [7–9] авторы представили систему самосогласованных уравнений для параметра порядка и химического потенциала, суммируя бесконечный ряд однопетлевых диаграмм для комбинированных заселенностей. На фазовой диаграмме установлены области существования ФМ и парамагнитной (ПМ) фаз. Как будет показано ниже, уже простейший анализ системы уравнений доказывает наличие диамагнитного вклада в статическую восприимчивость ПМ фазы. Это коррелирует с аналогичными результатами работы [10], полученными из анализа динамической восприимчивости в пределе $\omega \rightarrow 0$.

Ниже в рамках диаграммного метода [11,12] проводится анализ всех вкладов диаграмм в причинную спиновую функцию Грина, возникающих в первом порядке по обратному эффективному радиусу взаимодействия $1/z$ (z — число ближайших соседей). Исследуется спектр спиновых волн в ФМ и ПМ фазах и степень его когерентности. Представленная теория позволила установить поправки к резонансным частотам, которые отсутствовали в предшествующих теориях.

Самосогласованное уравнение для параметра порядка фаз

Рассмотрим узкозонный хаббардовский магнетик в режиме сильных электронных корреляций, когда число частиц несколько меньше числа ячеек. Предположим, что одночастичный уровень со спином вверх (\uparrow) имеет наименьшую энергию и является основным состоянием. Уровень со спином вниз (\downarrow) лежит несколько выше. В случае почти полузаполненной зоны в пределе сильного кулоновского отталкивания, когда среднее число электронов на одном узле $1-n \ll 1$, двухчастичным уровнем можно пренебречь.

В рамках t - J -модели гамильтониан такой системы в пространстве электронных состояний $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ и дырки $|0\rangle$ может быть представлен в терминах операторов Хаббарда в следующем виде [12]:

$$\hat{H} = \sum_{l,m,\sigma} t_{lm} X_l^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \kappa \sum_{l,m} t_{lm} (X_l^{-+} X_m^{+-} - X_l^{++} X_m^{--}) - \mu \sum_{l,\sigma} X_l^{\sigma\sigma}, \quad (1)$$

где t_{lm} — интеграл перескока между ближайшими узлами l и m в решетке, κt_{lm} — параметр АФМ обменного взаимодействия ($0 < \kappa < 1$); μ — химический потенциал, при слабом допировании магнетика дырками он находится почти у верхнего края энергетической зоны; $\sigma = +1$ — спиновый индекс для направления электронного спина вверх и $\sigma = -1$ — вниз.

Выражение (1) легко можно свести к следующему виду:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (2)$$

если гамильтониан нулевого приближения \hat{H}_0 рассматривать в виде

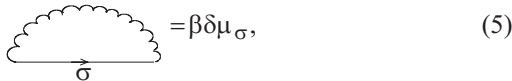
$$\hat{H}_0 = \sum_{l,\sigma} \varepsilon_\sigma X_l^{\sigma\sigma}, \quad (3)$$

а в качестве возмущения \hat{H}_{int} взять кинетическую часть

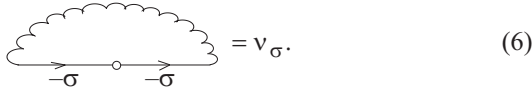
$$\hat{H}_{int} = \sum_{l,m,\sigma} t_{lm} X_l^{\sigma 0} X_m^{0\sigma}. \quad (4)$$

Следует отметить, что $\varepsilon_\sigma = -\sigma(h/2) - \mu - kt(0) \times [n/2 - \sigma \langle S^z \rangle]$ — уровни энергии на узле с учетом внешнего магнитного поля h для ФМ фазы, $t(0) = zt$ — фурье-компонента интеграла перескока для ПК решетки с параметром a в приближении ближайших соседей, когда $t_{lm} = t$; $z = 6$ — число ближайших соседей для ПК решетки; $\langle S^z \rangle$ — модуль среднего спина. Кроме того, второе слагаемое гамильтониана (1), связанное с косвенным АФМ обменом взаимодействия d -электронов, рассматривается в приближении молекулярного поля (МП). При этом предполагается выполнение основного условия теории возмущения $\hat{H}_0 \gg \hat{H}_{int}$.

Рассмотрим простейшие однородные ФМ структуры. С помощью матрицы рассеяния учтем взаимодействие (4) в линейном приближении по параметру t . В первом неисчезающем приближении по обратному эффективному радиусу взаимодействия $r \sim 1/z$ вклад в комбинированную электронно-дырочную заселенность $\langle F^{\sigma 0} \rangle = \langle X^{\sigma\sigma} + X^{00} \rangle = 1 - \frac{n}{2} + \sigma \langle S^z \rangle$ вносят диаграммы вида



$$= \beta \delta \mu_\sigma, \quad (5)$$



$$= \nu_\sigma. \quad (6)$$

Волнистая и прямая линии обозначают соответственно эффективное взаимодействие $\beta B^{\sigma 0,0\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_n)$, пропорциональное интегралу перескока $t(\mathbf{q})$, которое мы получили путем эффективного «одевания» элементарной линии взаимодействия:

$$\beta B^{\sigma 0,0\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \beta \frac{t(\mathbf{q})(i\omega_n - \varepsilon_\sigma)}{i\omega_n - E_{\mathbf{q}\sigma}} \quad (7)$$

и гриновскую функцию нулевого приближения, определяющуюся в виде

$$G^{0\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{\beta(i\omega_n - \varepsilon_\sigma)}, \quad (8)$$

где $\omega_n = (2n+1)\pi T$, $E_{\mathbf{q}\sigma} = \varepsilon_\sigma + t(\mathbf{q}) \langle F^{\sigma 0} \rangle$, $T = \frac{1}{\beta}$ — температура.

Простейшие блоки $\beta \delta \mu_\sigma$ и ν_σ аналитически представляются для ФМ фазы в виде [7,8]:

$$\begin{aligned} \beta \delta \mu &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\omega_n} \beta B^{\sigma 0,0\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_n) G^{0\sigma}(i\omega_n) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \beta t(\mathbf{q}) f(E_{\mathbf{q}\sigma}), \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \nu_\sigma \langle F^{\sigma 0} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\omega_n} \beta B^{\sigma 0,0\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_n) (G^{0\sigma}(i\omega_n))^2 \langle F^{\sigma 0} \rangle = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} f(E_{\mathbf{q}\sigma}) - f(\varepsilon_\sigma), \end{aligned}$$

где $f(x) = \frac{1}{[\exp(\beta x) + 1]}$ — функция распределения Ферми.

Поскольку в качестве параметра самосогласования выступает средний спин $\langle S^z \rangle$, в формулах (7)–(9) осуществлена естественная замена $\langle F^{\sigma 0} \rangle_0 \rightarrow \langle F^{\sigma 0} \rangle$, где символ $\langle \dots \rangle_0$ обозначает усреднение по гамильтониану (3) в приближении МП.

Необходимо отметить, что в первом порядке теории возмущения возникает всего два вклада в комбинированную заселенность $\langle F^{\sigma 0} \rangle$, которые графически представляются диаграммами (5) и (6). Однако один из этих блоков пропорционален $\beta = 1/T$. Чтобы получить самосогласованные уравнения для химического потенциала и среднего узельного спина $\langle S_l^z \rangle = \frac{1}{2} \langle X_l^{++} - X_l^{--} \rangle$ и устранить расходимость при $T=0$, будем использовать приближение, в котором суммируются все вклады в $\langle F^{\sigma 0} \rangle$ от диаграмм $\beta \delta \mu_\sigma$ и их произведений, а также вклады от диаграмм ν_σ . В аналитическом виде эта сумма является рядом Тейлора для функции $\langle F^{\sigma 0} \rangle_1$, который легко суммируется [7,8,11]:

$$\langle F^{\sigma 0} \rangle_1 = \frac{\exp(\beta E_\sigma) + 1}{1 + \exp(\beta E_\sigma) + \exp(\beta E_{-\sigma})}, \quad (10)$$

где $E_\sigma = -\varepsilon_\sigma + \delta \mu_{-\sigma}$.

Теперь с учетом диаграмм ν_σ запишем систему самосогласованных уравнений для химического потенциала и намагниченности:

$$1 - \frac{n}{2} + \sigma \langle S^z \rangle = \langle F^{\sigma 0} \rangle_1 - \nu_{-\sigma} \langle F^{-\sigma 0} \rangle. \quad (11)$$

Проанализируем решение полученной системы для ФМ и ПМ структур.

Численный анализ (11) показывает, что с увеличением параметра к область существования ФМ фазы по темпе-

ратуре сужается. При $T=0$ и условии $-6\varepsilon_- / \langle F^{-0} \rangle \geq 3$ имеем $\langle F^{+0} \rangle_1 = 1, \langle F^{-0} \rangle_1 = 0$, что дает решение $\langle S^z \rangle = n/2$, соответствующее насыщенному ФМ с химическим потенциалом, не зависящим от параметра косвенного обмена:

$$\frac{\mu_F}{W} = \frac{1}{6} I^{-1}(n), \quad (12)$$

где $I^{-1}(n)$ — функция обратная к $I(x) = \int_{-3}^x \rho(x) dx$ и $\rho(x)$

— плотность электронных состояний, которая определяется в виде:

$$\rho(x) = \frac{1}{N} \sum_q \delta(x - \frac{t(\mathbf{k})}{2t}), \quad (13)$$

где $t(\mathbf{k}) = 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a))$ — ф у рье-компонента интеграла перескока для ПК решетки, $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака. Графическое представление $I(x)$ для ПК решетки дано в [9].

Для ПМ структуры при $T=0$ $\frac{\mu}{W} + \frac{1}{4} \kappa n > 0$ и $\mu + \frac{\delta\mu}{W} > 0$, когда $\langle S^z \rangle = 0$. Тогда для химического потенциала в такой ПМ2 фазе имеем

$$\frac{\mu_{PM2}}{W} = -\frac{1}{4} \kappa n + \tilde{\mu}_0, \quad (14)$$

где

$$\tilde{\mu}_0 = \frac{1}{6} \left(1 - \frac{n}{2}\right) I^{-1} \left(\frac{1+n}{2}\right), \quad \frac{\delta\mu}{W} = \frac{\delta\mu_{PM2}}{W} = E \left(I^{-1} \left(\frac{1+n}{2}\right) \right),$$

а

$$E(x) = \frac{1}{6} \int_{-3}^x x \rho(x) dx.$$

ПМ2 фаза соответствует газовому пределу по дырочной концентрации.

В ПМ1 фазе, соответствующей газовому пределу по электронной концентрации, имеем $\frac{\mu}{W} + \frac{1}{4} \kappa n < 0$ и $\mu + \frac{\delta\mu}{W} < 0$, что дает для химического потенциала выражение

$$\frac{\mu_{PM1}}{W} = -\frac{1}{4} \kappa n + \frac{1}{6} \left(1 - \frac{n}{2}\right) I^{-1} \left(\frac{n}{2}\right), \quad (15)$$

при этом $\frac{\delta\mu}{W} = \frac{\delta\mu_{PM1}}{W} = E \left(I^{-1} \left(\frac{n}{2}\right) \right)$. Таким образом, косвенный обмен понижает величину химического потенциала в ПМ фазе.

Используя самосогласованные уравнения для параметра порядка фаз (11), можно численно рассчитать

продольную статическую восприимчивость системы. Дифференцируя два уравнения (11) по полю h для $\sigma = 1$ и $\sigma = -1$, получаем систему из двух линейных уравнений относительно неизвестных производных $\chi_{\parallel} = \frac{d\langle S^z \rangle}{dh}$ и

$\mu' = \frac{d\mu}{dh}$. Введем обозначения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \Delta_{\sigma} &= \rho \left(-\frac{6\varepsilon_{\sigma}}{\langle F^{\sigma 0} \rangle W} \right) \frac{6}{\langle F^{\sigma 0} \rangle W}, \\ \frac{1}{\beta} \Phi_{\sigma} &= \rho \left(-\frac{6\varepsilon_{\sigma}}{\langle F^{\sigma 0} \rangle W} \right) \frac{-6\varepsilon_{\sigma}}{[\langle F^{\sigma 0} \rangle W]^2}, \\ \frac{1}{\beta} \Psi_{\sigma} &= \rho \left(-\frac{6\varepsilon_{\sigma}}{\langle F^{\sigma 0} \rangle W} \right) \frac{6}{\langle F^{\sigma 0} \rangle W} \left[\frac{-\varepsilon_{\sigma}}{\langle F^{\sigma 0} \rangle} \right]^2. \end{aligned} \quad (16)$$

Тогда выражение для продольной статической восприимчивости в однородной ФМ фазе при $T=0$ записывается так:

$$\chi_{\parallel F} = \frac{0,5a - \mu'_{FM} b}{2 + \kappa t(0)a + c}, \quad (17)$$

где

$$\mu'_{FM} = \frac{b(1+0,5c) - 0,5ad}{\kappa t(0)[a^2 - b^2] - bd + a(2+c)} \quad (18)$$

и коэффициенты $a = \beta(\Delta_- + \Delta_+)$, $b = \beta(\Delta_- - \Delta_+)$, $c = \beta(\varphi_- + \varphi_+)$, $d = \beta(\varphi_- - \varphi_+)$, $f = \beta(\psi_- + \psi_+)$.

Для ПМ1 и ПМ2 структур при $T=0$ производная химического потенциала по полю $\mu' = 0$, а продольная статическая восприимчивость системы имеет вид

$$\chi_{\parallel P1} = \frac{0,5a}{2 + \kappa t(0)a + c}, \quad (19)$$

$$\chi_{\parallel P2} = \frac{0,5(1-0,5c)}{\kappa t(0)[1-0,5c] - 0,5f}. \quad (20)$$

Зная средний спин $\langle S^z \rangle$ и μ электрона, легко по формулам (17)–(20) рассчитать восприимчивость электронной подсистемы в ФМ и ПМ фазах. На рис. 1 представлена концентрационная зависимость продольной статической восприимчивости системы для однородных ФМ и ПМ структур при нулевой температуре и без учета косвенного антиферромагнитного обмена $\kappa=0$. На рисунке видно, что в ПМ2 фазе продольная статическая восприимчивость системы диамагнитна. Это соответствует результатам, полученным в работе [10] при анализе динамической восприимчивости в пределе $\omega \rightarrow 0$.

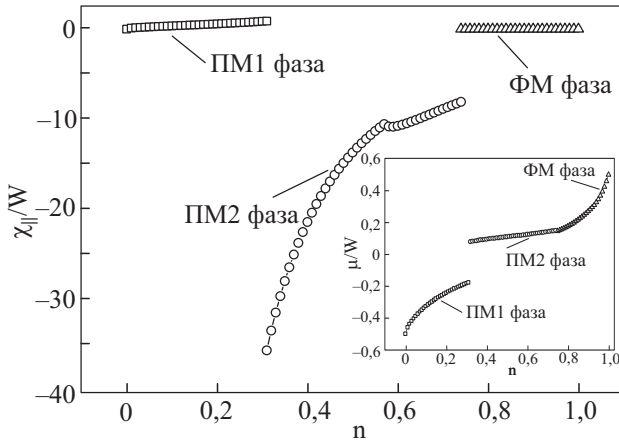


Рис. 1. Концентрационная зависимость продольной статической восприимчивости системы для однородных ФМ и ПМ структур при $T = 0$ и $\kappa = 0$. На вставке — концентрационная зависимость химического потенциала в ФМ, ПМ1 и ПМ2 фазах при $T = 0$ и $\kappa = 0$.

Спин-волновые возбуждения в ферромагнитной и парамагнитной фазах

Исследуем спиновую динамику электронов для однородных ФМ и ПМ2 фаз. Спектральные свойства коллективизированной системы электронов при ненулевой температуре описывает мацубаровская функция Грина:

$$G_{+-}(\tau, r_l - r_m) = -\langle T_\tau X_l^{+-}(\tau) X_m^+(0) \rangle, \quad (21)$$

где T_τ — комбинированный оператор упорядочения по времени. Операторы Хаббарда $X_l^{+-}(\tau)$ выражены в представлении Гейзенберга. Угловые скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по большому каноническому ансамблю Гиббса, используя полный гамильтониан (1).

В первом порядке теории возмущения по обратному эффективному радиусу взаимодействия с \hat{H}_{int} из (4) для $G_{+-}(\tau, r_l - r_m)$ имеем связанные диаграммы, изображенные на рис. 2. Фермионным \longrightarrow и бозонным \dashrightarrow линиям на этих диаграммах соответствуют нулевые функции Грина $G^{0\sigma}(i\omega_p)$ (см. выражение (8) и последующие обозначения) и

$$G^{\sigma-\sigma}(i\omega_p) = \frac{1}{\beta(i\omega_p + \varepsilon_\sigma - \varepsilon_{-\sigma})}, \quad (22)$$

где $\omega_p = 2\pi/\beta$. Эффективной линией взаимодействия \sim сопоставляется аналитическое выражение (7) для $\beta V^{\sigma_0, 0\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_n)$. Первый блок на рис. 2 включает две диаграммы для $\sigma = +1$ и $\sigma = -1$, пропорциональные коррелятору $\langle (X_q^{--} - X_q^{++}) F_l^{\sigma 0} \rangle$. Диаграммы подобного вида в более высоких порядках те-

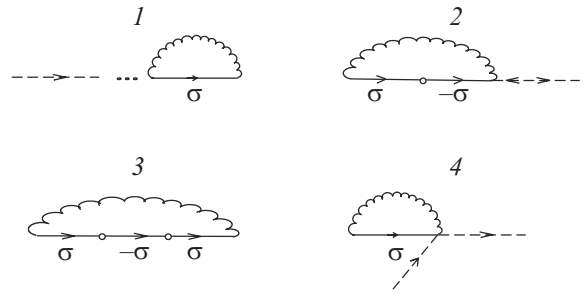


Рис. 2. Связные диаграммы в первом порядке теории возмущения по обратному эффективному радиусу взаимодействия для спиновой функции Грина $G_{+-}(\tau, r_l - r_m)$.

рии возмущения, объединяясь с нулевым приближением для фурье-компоненты $G_{+-}(i\omega_p, \mathbf{k})$, дают вклад $2 \langle S^z \rangle_1 G^{+-}(i\omega_p)$, где $2 \langle S^z \rangle_1 = \langle F^{+0} \rangle_1 - \langle F^{-0} \rangle_1$ и $\langle F^{\sigma 0} \rangle_1$ определено в (10). Одна из диаграмм 2-го блока с $\sigma = +1$ и выходящей бозонной линией $G^{+-}(i\omega_p)$ в сумме с диаграммой 3 при $\sigma = +1$ дают вклад в собственно энергетический оператор:

$$D1(i\omega_p) = -G^{+-}(i\omega_p) \times \left[v_+ \langle F^{+0} \rangle + \frac{1}{N} \sum_q t(\mathbf{q}) \langle F^{-0} \rangle \frac{f(E_{+q}) - f(\varepsilon_-)}{i\omega_p - E_{+q} + \varepsilon_-} \right]. \quad (23)$$

Аналогичным образом, объединяя две диаграммы 4-го блока на рис. 2, имеем соответствующее аналитическое выражение:

$$D2(i\omega_p) = -2[G^{+-}(i\omega_p)]^2 \langle S^z \rangle \beta(\delta\mu_+ - \delta\mu_-). \quad (24)$$

Оставшиеся вклады от диаграмм 2-го и 3-го блоков с входящей бозонной линией $G^{+-}(i\omega_p)$ и $\sigma = -1$ на рис. 2 выражаются соответственно в виде:

$$D3(i\omega_p) = -G^{+-}(i\omega_p) \times \left[v_- \langle F^{-0} \rangle + \frac{1}{N} \sum_q t(\mathbf{q}) \langle F^{-0} \rangle \frac{f(E_{-q}) - f(\varepsilon_+)}{i\omega_p - E_{-q} + \varepsilon_+} \right], \quad (25)$$

$$D4(i\omega_p) = 2 \langle S^z \rangle G^{+-}(i\omega_p) \frac{1}{N} \sum_q t(\mathbf{q}) \frac{f(E_{-q}) - f(\varepsilon_+)}{i\omega_p - E_{-q} + \varepsilon_+}. \quad (26)$$

В дальнейшем будем определять функцию Грина $G_{+-}(i\omega_p, \mathbf{k})$ с помощью уравнения Ларкина [14], решение которого можно представить следующим образом:

$$G_{+-}(i\omega_p, \mathbf{k}) = \frac{\sum^{+-}(i\omega_p)}{1 - \beta t(\mathbf{k}) \sum^{+-}(i\omega_p)}, \quad (27)$$

где собственно энергетический оператор $\sum^{+-}(i\omega_p)$ выражается в виде суммы члена $2 \langle S^z \rangle_1 G^{+-}(i\omega_p)$ с нулевым приближением и вкладов (23)–(26). Следует отметить, что если в (27) для ФМ фазы рассматривать только нулевой вклад в собственно энергетический оператор, то мы не получим из (27) спиновую функцию Грина в нулевом приближении эффективного самосогласованного поля. Это связано с видом \hat{H}_{int} , который зависит только от произведения разноузельных операторов рождения и уничтожения. Однако легко увидеть, что вклад нулевого приближения $\sum_0^{+-}(i\omega_p) = 2 \langle S^z \rangle_0 G^{+-}(i\omega_p) = 0$ при $\mathbf{k} = 0$, так как в ФМ фазе $\langle S^z \rangle_0 = 0$. Если считать, что $\kappa t(0)/T \ll 1$, то можно положить $\sum_0^{+-}(i\omega_p) \approx 0$. В работе [4] также использована функция Грина в виде (27), где для собственно энергетического оператора учтено несколько диаграмм специального вида. В работе [5] авторы получили спиновую функцию Грина на основе решения уравнения Дайсона, используя уравнение Бете-Солпитера для вершинной части. Результаты указанных работ справедливы в пределе слабого магнетонного рассеяния и соответствуют спин-волновому спектру для одного перевернутого спина [3].

Используя выражения (23)–(26), запишем собственно-энергетический оператор для ФМ фазы в виде:

$$\begin{aligned} \sum_F^{+-}(i\omega_p) &= D1(i\omega_p) + D2(i\omega_p) + D3(i\omega_p) + D4(i\omega_p) = \\ &= \frac{2 \langle S^z \rangle - \Delta a}{\beta(i\omega_p + \varepsilon_{+-})} + \frac{\Delta b}{\beta(i\omega_p - \varepsilon_{+-})} + \frac{\Delta c}{\beta(i\omega_p + \varepsilon_{+-})^2}, \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\Delta a = v_+ \langle F^{+0} \rangle - \frac{1}{N} \sum_q t(\mathbf{q}) \langle F^{-0} \rangle \frac{f(E_{-q}) - f(\varepsilon_+)}{i\omega_p - E_{-q} + \varepsilon_+},$$

$$\Delta b = \frac{1}{N} \sum_q 2 \langle S^z \rangle t(\mathbf{q}) \frac{f(E_{-q}) - f(\varepsilon_+)}{i\omega_p - E_{-q} + \varepsilon_+} -$$

$$- \frac{1}{N} \sum_q t(\mathbf{q}) \langle F^{-0} \rangle \frac{f(E_{+q}) - f(\varepsilon_-)}{i\omega_p - E_{+q} + \varepsilon_-} - v_+ \langle F^{+0} \rangle,$$

$$\Delta c = 2 \langle S^z \rangle (\delta\mu_- - \delta\mu_+).$$

Для ПМ структуры комбинированная электронно-дырочная заселенность $\langle F^{+0} \rangle = \langle F^{-0} \rangle = 1 - n/2$, а $\langle S^z \rangle = 0$, поэтому вклад в собственно энергетический оператор в ПМ2 фазе будут вносить диаграммы только 3-го блока рис. 2:

$$\sum_P^{+-}(i\omega_p) = \frac{2}{\beta} \frac{1}{N} \sum_q \frac{f(\varepsilon) - f(E_q)}{i\omega_p - \langle F \rangle t(\mathbf{q})}. \quad (29)$$

С помощью уравнения Ларкина (27) получаем полную функцию Грина $G_{+-}(i\omega_p, \mathbf{k})$, анализ которой может дать сведения об отклике системы. Динамическую восприимчивость системы выразим через фурье-образ запаздывающей спиновой функции Грина с помощью известного соотношения и аналитического продолжения $i\omega_p \rightarrow \omega + i\delta$ в (27):

$$\chi_{\perp}^{+-}(\omega, \mathbf{k}) = \beta g^2 \mu_0^2 G_{+-}(\omega, \mathbf{k}), \quad (30)$$

в нашем случае $g^2 \mu_0^2 = 1$, где g — фактор Ланде, μ_0 — магнетон Бора. На рис. 3 представлена частотная зависимость действительной поперечной динамической восприимчивости системы в ФМ фазе при нулевой температуре и без учета косвенного антиферромагнитного обмена $\kappa = 0$ для концентрации электронов $n = 0,9$. На рисунке видно, что в определенной области частот и волновых векторов имеются аномалии, обусловленные коллективными спин-волновыми возбуждениями. При определенных значениях $t(\mathbf{k})$ и ω восприимчивость системы диамагнитна. На рис. 4 представлена частотная зависимость мнимой поперечной динамической восприимчивости системы для ФМ упорядочения при $T = 0$, $n = 0,9$ и $\kappa = 0$. На вставке к этому рисунку показана частотная зависимость мнимой части собственно энергетического оператора для

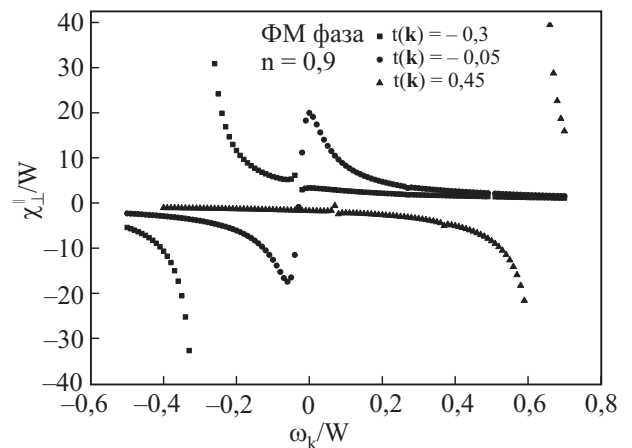


Рис. 3. Частотная зависимость действительной поперечной динамической восприимчивости системы в ФМ фазе при $T = 0$, $n = 0,9$, $\kappa = 0$ и различных $t(\mathbf{k})$.

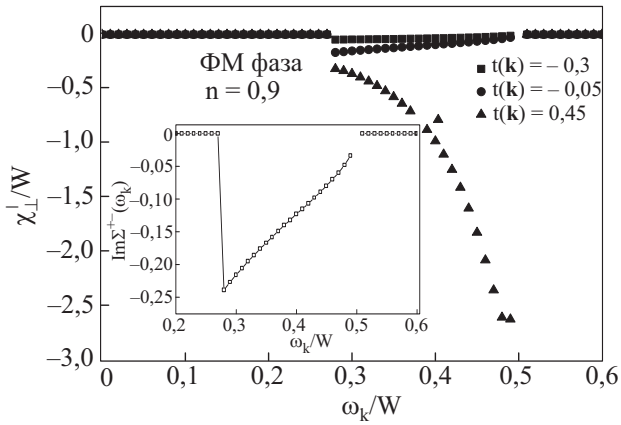


Рис. 4. Частотная зависимость мнимой поперечной динамической восприимчивости системы в ФМ фазе при $T = 0$, $n = 0,9$, $\kappa = 0$ и различных $t(\mathbf{k})$. На вставке — частотная зависимость мнимой части собственно энергетического оператора для насыщенного состояния однородной ФМ фазы при $T = 0$ и $n = 0,9$.

насыщенного состояния однородной ФМ фазы при $T = 0$ и $n = 0,9$. Видно, что мнимая динамическая восприимчивость системы в данном случае связана с рассеянием в системе и некогерентностью спин-волновых возбуждений.

Спектр спин-волновых возбуждений находится из уравнения

$$1 - \beta t(\mathbf{k}) \operatorname{Re} \left[\sum^{+-} (\omega + i\delta) \right] = 0, \quad (31)$$

где $\operatorname{Re} \left[\sum^{+-} (\omega + i\delta) \right]$ — реальная часть собственно энергетического оператора. На рис. 5 представлен спектр спин-волновых возбуждений в зависимости от $t(\mathbf{k})$ для насыщенного состояния однородной ФМ фазы и однородной ПМ2 фазы при $T = 0$ и $\kappa = 0$. В нулевом приближении при $\Delta a = \Delta b = \Delta c = 0$ из (31) для ФМ фазы имеем решение:

$$\omega_{0k}(\kappa) = 2 \langle S^z \rangle (t(\mathbf{k}) - \kappa t(0)). \quad (32)$$

Спектр (32) характерен для электронных возбуждений, заполняющих практически полностью нижнюю хаббардовскую зону при электронной концентрации $n \sim 1$. Отметим, что в работе Нагаока [3] рассмотрены дырочные возбуждения и заполнение зоны в этом случае происходит вблизи ее дна. Из (32) следует, что частота спиновых переориентаций в узле связана с частотой межузельных электронных перескоков, когда для переворота спина в узле достаточно сначала уничтожить спин σ , а затем родить его с противоположным направлением. В длинноволновом пределе эти частоты очень велики по сравнению с существующими экспериментальными частотами резонансных полей. Очевидно, что пространственное распространение не-

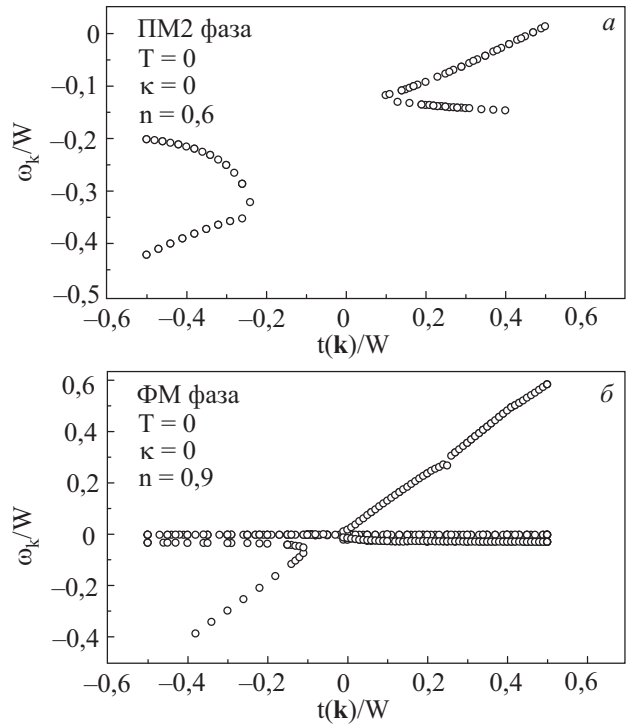


Рис. 5. Спектр спин-волновых возбуждений в зависимости от $t(\mathbf{k})$

больших спиновых отклонений связано с вкладом диаграмм на рис. 2.

Для определения частоты спин-волновых возбуждений для ФМ структуры будем искать дисперсионную поправку $\Delta\omega_k(\kappa)$ к частоте $\omega_{0k}(\kappa)$, подставляя в выражение (31) $\omega_k(\kappa) = \omega_{0k} + \Delta\omega_k(\kappa)$ и рассматривая члены только первого порядка малости, пропорциональные $\Delta\omega_k(\kappa)$. Тогда имеем

$$\Delta\omega_k(\kappa) = [-\langle F^{-0} \rangle I - 2v_+ \langle F^{+0} \rangle] t(\mathbf{k}) - \delta\mu_+ - \frac{[\langle F^{-0} \rangle I + v_+ \langle F^{+0} \rangle] 2\kappa t(\mathbf{k}) t(0)}{t(\mathbf{k}) - 2\kappa t(0)}, \quad (33)$$

где

$$I = \frac{1}{N} \sum_q t(\mathbf{q}) \frac{f(E_{+q}) - f(\epsilon_-)}{n(t(\mathbf{k}) - \kappa t(0)) - t(\mathbf{q})}.$$

В случае почти полузаполненной зоны при $T = 0$, когда среднее число дырок на одном узле $1 - n \ll 1$, выражение (33) существенно упростится, если для его решения воспользоваться разложениями в ряд по малым параметрам $(1 - n)$ и $(3 - x)$ для химического потенциала и электронной плотности состояний $\rho(x)$ соответственно. Действительно, функцию $\rho(x)$ можно представить в виде [15]

$$\rho(x) = \frac{1}{\pi^3} \int_0^{\arccos(x-2)} dy K \left(\frac{\sqrt{k^2(x,y)-1}}{k(x,y)} \right), \quad (34)$$

где $K(x)$ — полный эллиптический интеграл 1-го рода с модулем $k(x,y) = \frac{2}{x - \cos(y)}$. При $x \sim 3$ эллиптический интеграл раскладываем в ряд

$$K(x) \approx \frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{1}{4} x^2 + \dots \right). \quad (35)$$

Подставляя (35) в (34) и выполняя интегрирование с верхним пределом $\arccos(x-2) \gg \sqrt{2(3-x)}$, имеем

$$\rho(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2}\pi^2} \sqrt{3-x}. \quad (36)$$

Отметим, что учет членов более высокого порядка в разложении (35) и $\arccos(x-2)$ приводит к умножению (36) на множитель $4591/4608 \approx 0,996$ и появлению слагаемых, пропорциональных $(3-x)\sqrt{3-x}$. Будем пренебрегать указанными поправками ввиду их малости. Тогда вблизи потолка нижней зоны в однородной ФМ фазе при $n \sim 1$ выражение для химического потенциала принимает вид

$$\frac{\mu_F}{W} = \frac{1}{2} - \left(\frac{\pi^4}{48} \right)^{\frac{1}{3}} (1-n)^{\frac{2}{3}}. \quad (37)$$

Теперь не составляет труда вычислить интеграл I , входящий в выражение (33), что дает следующий закон дисперсии для коллективных возбуждений в ФМ фазе с косвенным обменом при $T = 0$:

$$\omega_k(\kappa) = \omega_k(0) - \kappa \frac{W}{2} \times \left\{ n - 2t(\mathbf{k}) \left[-3A + \frac{6(t(\mathbf{k}) - \kappa t(0))A - (1-n)}{t(\mathbf{k}) - 2\kappa t(0)} \right] \right\}, \quad (38)$$

где

$$A = \frac{\sqrt{2}n}{W\pi^2} \left(\frac{9\pi^4}{2} \right)^{\frac{1}{6}} (1-n)^{\frac{4}{3}} \quad (39)$$

и частота $\omega_k(0)$ коллективных возбуждений в отсутствие косвенного обмена имеет вид:

$$\omega_k(0) = \frac{W}{2} + n(t(\mathbf{k}) - t(0)) + \Delta\omega_k(0), \quad (40)$$

где

$$\Delta\omega_k(0) = 2(1-n)t(\mathbf{k}) + 3Wt(\mathbf{k})A \left\{ 1 - \frac{2}{W} [t(0) - t(\mathbf{k})] \right\}.$$

Видно, что в дисперсионной поправке к ω_{0k} первое слагаемое совпадает с соответствующим вкладом, полученным в работе [4], а второе дает вклад, связанный с влиянием эффективного самосогласованного поля и пропорционально $(1-n)^{4/3}$. Также в соответствии с результатом Нагаока [3] для малых κ с ростом величины косвенного АФМ обмена энергия спиновой волны в первом приближении уменьшается линейно.

Мнимая часть собственно энергетического оператора определяет затухание спин-волновых возбуждений. Для насыщенного состояния однородной ФМ фазы с косвенным обменом и однородной ПМ2 фазы ее можно представить в виде следующих выражений соответственно:

$$\beta \text{Im}_F \left(\sum_F^{+-} (\omega + i\delta) \right) = \pi \frac{6(1-n)}{W} \rho \left(\frac{6\omega}{W} - 3\kappa n \right) \left[f \left(\omega - \mu_F - W\kappa \frac{n}{2} \right) - 1 \right], \quad (41)$$

$$\beta \text{Im}_P \left(\sum_P^{+-} (\omega + i\delta) \right) = \pi \frac{48(1-0,5n)}{W} \rho \left(\frac{12\omega}{W} \right) \left[f \left(\omega - \mu_P - W\kappa \frac{n}{2} \right) - 1 \right]. \quad (42)$$

В случае слабого допирования дырками область длинноволновых некогерентных возбуждений $ka \ll 1$ при нулевой температуре определяется из условия $\text{Im} \left(\sum^{+-} (\omega + i\delta) \right) \neq 0$, что дает для волновых векторов в ФМ фазе неравенство

$$(1-n) \left(1 - \frac{\kappa}{1-2\kappa} \right) - \kappa \leq \frac{(ka)^2}{12} \leq \left(\frac{\pi^4}{48} \right)^{\frac{1}{3}} (1-n)^{\frac{2}{3}} - \kappa. \quad (43)$$

Таким образом, при достаточно малых величинах волновых векторов вблизи уровня Ферми в ФМ насыщенной фазе слабодопированного узкозонного хаббардовского магнетика существуют когерентные спин-волновые возбуждения.

Имея закон дисперсии для когерентных возбуждений в однородной ФМ фазе с косвенным обменом (38), можно получить коэффициент спин-волновой жесткости SC . Для этого разложим в ряд по малому параметру $(t(\mathbf{k}) - t(0)) \rightarrow 0$ спин-волновой спектр (38) и рассмотрим все члены ряда, пропорциональные квадрату волнового вектора k^2 :

$$SC(\kappa=0) = -ta^2 [2(1-n) + 6AW],$$

$$SC(\kappa) = \frac{-ta^2 [(2-8\kappa+12\kappa^2)(1-n) + (6-21\kappa+12\kappa^2)AW]}{(-1+2\kappa)^2}. \quad (44)$$

С точностью до членов порядка $(1-n)$ наш результат совпадает с коэффициентом спин-волновой жесткости для спектра, полученного Зайцевым [4].

Заключение

Исследованы различные решения самосогласованных уравнений для намагниченности и химического потенциала для однородных ФМ и ПМ структур с учетом вклада простейших диаграмм.

Проведено изучение спектра и затухания коллективных спин-волновых возбуждений в однородных ФМ и ПМ фазах при нулевых температурах. Для слабодопированной системы с ФМ структурой в первом неисчезающем приближении по дырочной концентрации спектр согласуется с аналогичными результатами, полученными другими авторами. Вычисленная в данной работе поправка более высокого порядка к частоте спиновых волн пропорциональна $(1-n)^{4/3}$. Показано, что вблизи уровня Ферми спектр длинноволновых коллективных возбуждений является когерентным.

Вычисленная поперечная динамическая восприимчивость системы для однородных ферромагнитных и парамагнитных структур в определенной области частот и волновых векторов имеет аномалии, обусловленные коллективными спин-волновыми возбуждениями. При определенных значениях $t(\mathbf{k})$ и ω она диамагнитна.

1. P.W. Anderson, *Fiz. Nizk. Temp.* **4/5**, 381 (2006).
2. J.M. Tranquada, H. Woo, T.G. Perring, H. Goka, G.D. Gu, G. Xu, M. Fujita, and K. Yamada, *Nature* **429**, 534 (2004).
3. Y. Nagaoka, *Phys. Rev.* **147**, 392 (1966).
4. P.O. Зайцев, *ЖЭТФ* **70**, 1100 (1976).
5. M.Yu. Nikolaev, N.V. Ryzhanova, A.V. Vedyayev, and S.M. Zubritskii, *Phys. Status Solidi* **B128**, 513 (1985).
6. G. Jackeli and N.M. Plakida, cond-mat 9909019.
7. Э.Е. Зубов, *ФНТ* **19**, 274 (1993).
8. Э.Е. Зубов, *ТМФ* **105**, 311 (1995).
9. E. Zubov, V. Dyakonov, and H. Szymczak, *J. Phys.: Cond. Matter.* **18**, 6699 (2006).
10. Е.В. Кузьмин, *ФНТ* **31**, 191 (2005).
11. Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987).
12. Ю.А. Изюмов, М.И. Кацнельсон, Ю.Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, изд. фирма «Физ.-мат. литература», Москва (1994).

13. Yu.A. Izyumov, B.M. Letfulov, and E.V. Shipitsyn, *J. Phys.: Cond. Matter.* **6**, 5137 (1994).
14. А.И. Ларкин, *ЖЭТФ* **37**, 264 (1959).
15. T. Morita and T. Horiguchi, *J. Math. Phys.* **12**, 981 (1970).

Collective spin-wave excitations in a t-J-model

S.F. Myronova and E.E. Zubov.

Within the framework of the diagrammatic method of the perturbation theory, the influence of effective kinematic interaction and indirect antiferromagnetic exchange of d -electrons on magnetic structure of a narrow-band Hubbard magnet has been examined. All contributions to the combined occupancy and the Green function of transverse spin components are considered in the first order non-vanishing approximation of the perturbation theory. A self-consistent equation for order parameter of phases is derived. Using the effective «dressing» of the interaction lines, all contributions to the self-energy are determined. The influence of indirect antiferromagnetic exchange on spin-wave spectrum and elementary excitations damping is examined for ferromagnetic and paramagnetic phases. For the ferromagnetic phase at temperature $T=0$ and hole concentration $c \ll 1$ the spin-wave frequency includes an additional term which is proportional to $c^{4/3}$. The spin-wave frequency of excitations decreases linearly with increasing the indirect exchange. This is in agreement with the result obtained by Nagaoka and Zaitsev. It is found that the spin-wave spectrum of excitations near the Fermi level is coherent. A transverse dynamic susceptibility of the system for homogeneous ferromagnetic and paramagnetic structures is obtained.

PACS: 71.10.Fd Lattice fermion models (Hubbard model, etc.);

71.27.+a Strongly correlated electron system, heavy fermions;

75.10.Lp Band and itinerant models;

75.30.Fv Spin-density waves.

Keywords: spin, spin wave, indirect exchange, chemical potential, ferromagnetic.