

К ТЕОРИИ ДИНАМИЧЕСКОЙ СПИНОВОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ В РАМКАХ t - J - V -МОДЕЛИ. СОПОСТАВЛЕНИЕ С ДАННЫМИ ПО РАССЕЯНИЮ НЕЙТРОНОВ В $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ И $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

А. И. Андреев^{a*}, И. М. Ерёмин^{b,c}, М. В. Ерёмин^c

^a *Марийский государственный университет
424001, Йошкар-Ола, Россия*

^b *Max-Planck Institute for Physics of Complex Systems
D-01187, Dresden, Germany*

^c *Казанский государственный университет
420008, Казань, Россия*

Поступила в редакцию 19 мая 2008 г.

Выведена формула для динамической спиновой восприимчивости в рамках t - J - V -модели, позволяющая объяснить основные особенности недавних экспериментов по рассеянию нейтронов в электронно-допированных сверхпроводниках $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$. В частности, представленная теория хорошо воспроизводит V -образный рельеф в частотном поведении мнимой части восприимчивости $\chi''(Q, \omega)$ соединения $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ в окрестности волнового вектора $Q = (\pi, \pi)$ и скейлинговое поведение положения максимумов функции $\chi''(Q, \omega)T$ в зависимости от ω/T . Магнетизм рассматриваемых ВТСП является двойственным. С одной стороны, в них имеются носители тока, а с другой — локализованные спины на подрешетке ионов меди. Обе эти подсистемы сильно связаны между собой. Мода коллективных колебаний является общей. Магнетизм локализованных спинов «вымерзает» по мере появления сверхпроводящей щели. Объясняется недавно обнаруженная в сверхпроводниках типа $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$ двухпиковая структура $\chi''(Q, \omega)$. Низкочастотный пик поглощения находится внутри сверхпроводящей щели и интерпретируется проявлением ветви спиновых экситонов, а высокочастотный, главным образом, соответствует перенормированным коллективным колебаниям локализованных спинов.

PACS: 71.27.+a, 74.72.-h

1. ВВЕДЕНИЕ

Фазовая диаграмма ВТСП на основе слоистых купратов довольно богата. При малых индексах допирования они относятся к классу квазидвумерных антиферромагнетиков. Температурный ход магнитной восприимчивости в парамагнитной фазе подчиняется закону Кюри–Вейсса. При больших индексах допирования — это металлы с парамагнетизмом Паули–Ландау. Описание магнетизма переходной области между диэлектриком и металлом — одна из актуальных задач физики [1]. Базовой моделью для описания двойственного характера магнетизма в этих соединениях считается t - J -модель [2]. Параметр t соответствует перескоку электронов (допиро-

ванных дырок) с одного узла на другой, J — параметр суперобменного взаимодействия локализованных спинов меди. Параметр V кулоновского взаимодействия электронов обычно считается несущественным в теории магнетизма, и поэтому для краткости его опускают. Однако в общем случае кулоновское взаимодействие, конечно, важно. В частности, оно совершенно необходимо для описания спектра плазменных мод и фазовых расслоений в этих системах.

Имеющиеся работы по исследованию двойственного характера магнетизма в переходной области фазовой диаграммы ВТСП можно разделить на две группы. Авторы работ [3–7] и др. (см. ссылки в работе [7]) начинают рассмотрение со стороны диэлектрической фазы, когда носителей мало и сверхпроводимость еще не возникает, а восприимчивость кол-

*E-mail: aleksandreiv@yandex.ru

лективизированных электронов просто добавляют в качестве аддитивной компоненты [3]. В работах другой группы [8–12], напротив, исследователи берут в качестве базовой проводящую фазу. Акцент делается на исследование магнитной восприимчивости коллективизированных электронов, движение которых скоррелировано условием одновременного отсутствия двух носителей на одном и том же узле (нижняя хаббардовская подзона). При этом восприимчивость от локализованных спинов не учитывается.

В настоящей работе выводится новое выражение для динамической спиновой восприимчивости в рамках t - J - V -модели. В диэлектрическом пределе, когда концентрация носителей равна нулю, полученное выражение в точности соответствует спиновой восприимчивости двумерного антиферромагнетика, и в то же время, при равенстве нулю спин-спиновых корреляционных функций локализованных спинов (металлическая фаза), наша формула соответствует обобщенному приближению случайных фаз для металлов с сильными электронными корреляциями. В качестве приложения полученной формулы мы анализируем данные по рассеянию нейтронов в электронно-допированном сверхпроводнике типа $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$. Краткое сообщение на эту тему было опубликовано ранее [13]. Сейчас мы приводим подробности вывода полученной в работе [13] формулы для динамической спиновой восприимчивости и даем более обстоятельное сопоставление с экспериментом по рассеянию нейтронов на данной системе [14]. Новым является объяснение скейлингового поведения мнимой части восприимчивости, помноженной на температуру, в зависимости от отношения частоты к температуре как в нормальной, так и в сверхпроводящей фазах $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$. Это явление скейлинга в окрестности волнового вектора $Q = (\pi, \pi)$ в сверхпроводнике $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ было недавно обнаружено в работе [15]. Кроме того, мы показываем, что полученная формула после проведения электронно-дырочного преобразования позволяет объяснить происхождение двух пиков в рассеянии нейтронов в окрестности волнового вектора $Q = (\pi, \pi)$ и в дырочных сверхпроводниках типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.

2. ВЫВОД ФОРМУЛЫ ДЛЯ СПИНОВОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

Гамильтониан t - J - V -модели в представлении операторов Хаббарда имеет вид

$$H = H_t + H_J + H_V = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} X_i^{\sigma,0} X_j^{0,\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} \frac{1}{4} J_{ij} \left(X_i^{\sigma,\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma},\sigma} - X_i^{\sigma,\sigma} X_j^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}} \right) + \sum_{i,j} \frac{1}{2} V_{ij} X_i^{0,0} X_j^{0,0}. \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое описывает перескоки электронов по узлам двумерной решетки, второе слагаемое — суперобменное взаимодействие спинов, последнее соответствует кулоновскому взаимодействию носителей тока на разных узлах. При суммировании предполагается, что $i \neq j$. В формуле (1) $X_i^{p,s}$ — операторы Хаббарда, индексы « p » и « s » могут принимать значения 0, σ , $\bar{\sigma}$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$, $\bar{\sigma} = -\sigma$), $X_i^{\sigma,0}$ ($X_i^{0,\sigma}$) — операторы рождения (уничтожения) электронов на узле i со спином σ .

При нахождении уравнения движения для фурье-образа спинового оператора

$$S_q^+ = \frac{1}{N} \sum_i X_i^{\uparrow,\downarrow} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i)$$

используем технику проекционных операторов (\mathbf{q} — вектор обратной решетки, \mathbf{R}_i — радиус-вектор i -го узла). Антиккоммутационные соотношения имеют вид

$$\{X_i^{0,\uparrow}, X_j^{\uparrow,0}\} = (X_i^{0,0} + X_i^{\uparrow,\uparrow})\delta_{ij} = \left(\frac{1 + \delta_i}{2} + S_i^z \right) \delta_{ij}, \quad (2)$$

$$\{X_i^{0,\downarrow}, X_j^{\downarrow,0}\} = (X_i^{0,0} + X_i^{\downarrow,\downarrow})\delta_{ij} = \left(\frac{1 + \delta_i}{2} - S_i^z \right) \delta_{ij}, \quad (3)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера. Они получаются при использовании условия полноты $X_i^{0,0} + X_i^{\uparrow,\uparrow} + X_i^{\downarrow,\downarrow} = 1$, формул для спиновых операторов

$$S_i^z = \frac{1}{2}(X_i^{\uparrow,\uparrow} - X_i^{\downarrow,\downarrow}), \quad S_i^+ = X_i^{\uparrow,\downarrow}, \quad S_i^- = X_i^{\downarrow,\uparrow}$$

и оператора плотности носителей тока в расчете на одну ячейку, $X_i^{0,0} = \delta_i$. В частотном представлении для функции Грина $\langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle$ имеем

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle &= \langle\langle [S_q^+, H] | S_{-q}^- \rangle\rangle = \\ &= -\frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \langle\langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle\rangle + \frac{1}{N} \times \\ &\times \sum_{i,j} J_{ij} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i) \langle\langle (S_i^+ S_i^z - S_i^z S_i^+) | S_{-q}^- \rangle\rangle. \quad (4) \end{aligned}$$

Здесь, как и в работах [3–7], учтено, что дальнего магнитного порядка нет, т. е. $\langle \sum_i S_i^z \rangle = 0$.

Сосредоточим вначале внимание на функции Грина

$$G_{it}(\omega, q) = -\frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle. \quad (5)$$

Она относится к подсистеме коллективизированных электронов (itinerant). Для ее вычисления рассмотрим произведение операторов

$$X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} X_j^{0,\downarrow} X_i^{\uparrow,0} \exp[-i(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_j] \times \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i). \quad (6)$$

Видно, что эти операторы удовлетворяют следующему тождеству:

$$\sum_k X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} = 0, \quad (7)$$

которое будем использовать в виде

$$\sum_k \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle = 0. \quad (8)$$

Для линейризации коммутатора $[X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0}, H]$ применяем схему расщепления [16], в которой комбинируется приближение случайных фаз (random phase approximation, RPA) и техника проектирования Цванцига–Мори так, чтобы получались результаты RPA в случае простых металлов. Так, например, для произведения операторов $X_j^{\uparrow,\downarrow} X_s^{\downarrow,0}$ в представлении узлов запишем

$$t_{js} X_j^{\uparrow,\downarrow} X_s^{\downarrow,0} = t_{js} X_j^{\uparrow,\downarrow} X_s^{\downarrow,0} (1-F_t) + t_{js} F_t X_j^{\uparrow,\downarrow} X_s^{\downarrow,0} = t_{js} (1-F_t) S_j^+ X_s^{\downarrow,0} + (\varepsilon_{jsn}^{tr} X_n^{\uparrow,0} + \Delta_{jsn}^{tr} X_n^{0,\downarrow}). \quad (9)$$

Коэффициенты ε_{jsn}^{tr} и Δ_{jsn}^{tr} находятся так же, как и в обычной технике проектирования на подпространство операторов рождения и уничтожения электронов. С физической точки зрения, параметр F_t предназначен для сохранения эффектов молекулярного поля со стороны спинов и допированных электронов, а также для обеспечения условия устойчивости. Мнимая часть восприимчивости должна быть положительной. В общем случае, следуя этой схеме, можно ввести три параметра расщепления, F_t , F_J и F_V .

Для $T > T_c$, используя данную методику, получаем

$$\begin{aligned} & \left[X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0}, (H_t + H_J + H_V) \right] = \\ & = (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} + (1-F_t) (t_k \langle X_k^{0,\uparrow} X_k^{\uparrow,0} \rangle - \\ & \quad - t_{k+q} \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_{k+q}^{\downarrow,0} \rangle) S_q^+ + \\ & \quad + \frac{J_q}{2} F_J \left(\langle X_k^{0,\uparrow} X_k^{\uparrow,0} \rangle - \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_{k+q}^{\downarrow,0} \rangle \right) S_q^+ - \\ & \quad - \frac{1}{N} \sum_{k'} (\varepsilon_{k'+q} - \varepsilon_{k'}) X_{k'+q}^{0,\downarrow} X_{k'}^{\uparrow,0}, \quad (10) \end{aligned}$$

где

$$J_q = 2J_1 \gamma_q \equiv 2J_1 [\cos(q_x a) + \cos(q_y a)], \\ t_k = \sum_j t_{lj} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_j)]$$

— фурье-образы соответственно суперобменного взаимодействия и интегралов перескока, a — постоянная решетки, а

$$\begin{aligned} \varepsilon_k = & \left\{ \sum_l t_{li} \left[\frac{1+\delta}{2} + \frac{2}{1+\delta} (1+2F_t) \langle S_l^z S_i^z \rangle \right] + \right. \\ & + \sum_l J_{li} (1-F_J) \frac{1}{1+\delta} \langle X_l^{0,\downarrow} X_i^{\downarrow,0} \rangle + \\ & \left. + \sum_l V_{li} (1-F_V) \frac{2}{1+\delta} \langle X_l^{0,\uparrow} X_i^{\uparrow,0} \rangle \right\} \times \\ & \times \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_j)] \quad (11) \end{aligned}$$

— закон дисперсии квазичастиц. Его удобно переписать в виде, типичном для случая сильной связи:

$$\begin{aligned} \varepsilon_k = & 2t_{eff}^{(1)} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + \\ & + 4t_{eff}^{(2)} \cos(k_x a) \cos(k_y a) + \\ & + 2t_{eff}^{(3)} [\cos(2k_x a) + \cos(2k_y a)]. \quad (12) \end{aligned}$$

Видно, что эффективные параметры зоны определяются следующими формулами:

$$\begin{aligned} t_{eff}^{(1)} = & t_1 \left(P + \frac{1/2 + F_t}{1+\delta} K_1 \right) - \\ & - \frac{J_1(1-F_J) + 2V_1(1-F_V)}{2N} \sum_{k'} f_{k'} \cos(k'_x a), \\ t_{eff}^{(2)} = & t_2 \left(P + \frac{1/2 + F_t}{1+\delta} K_2 \right) - \\ & - \frac{V_2(1-F_V)}{N} \sum_{k'} f_{k'} \cos(k'_x a) \cos(k'_y a), \\ t_{eff}^{(3)} = & t_3 \left(P + \frac{1/2 + F_t}{1+\delta} K_3 \right) - \\ & - \frac{V_3(1-F_V)}{N} \sum_{k'} f_{k'} \cos(2k'_x a), \quad (13) \end{aligned}$$

где $P = (1 + \delta)/2$, δ — среднее число носителей тока на элементарную ячейку, V_1 , V_2 и V_3 — параметры кулоновского взаимодействия соответственно первых, вторых и третьих соседей.

Расчет спин-спиновых корреляционных функций $K_n = 4\langle S_0^z S_n^z \rangle$ проводится самосогласованно через динамическую спиновую восприимчивость. Описание процедуры расчета приведено в Приложении А. В процессе расчета проверяется выполнение условия $\langle S_i^+ S_i^- \rangle = (1 - \delta)/2$ (правило сумм).

Видно, что в формулу (10) вошло слагаемое, которое приведет к появлению новой функции Грина:

$$D_{it}(\omega, q) = -\frac{1}{N} \sum_k (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{0,\downarrow} | S_{-q}^- \rangle \rangle.$$

Используем выражение (10) для нахождения соотношения между функциями Грина:

$$\begin{aligned} \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle &= \frac{i}{2\pi} \chi_{0kq} + [(1 - F_t)\pi_{kq} + \\ &+ J_1 \gamma_q F_J \chi_{0kq}] \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle + D_{it}(\omega, q) \zeta_{kq}. \end{aligned} \quad (14)$$

Суммируя по k и используя условие (8), получаем

$$\begin{aligned} D_{it}(\omega, q) &= \frac{1}{\zeta(\omega, q)} \times \\ &\times \left[-\frac{i}{2\pi} \chi_0(\omega, q) - \eta(\omega, q) \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle \right], \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\eta(\omega, q) = (1 - F_t)\pi(\omega, q) + J_1 \gamma_q F_J \chi_0(\omega, q),$$

$$\begin{aligned} \chi_0(\omega, q) &= \frac{1}{N} \sum_k \chi_{0kq}, \\ \chi_{0kq} &= \frac{P(f_k^h - f_{k+q}^h)}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}, \\ \pi(\omega, q) &= \frac{1}{N} \sum_k \pi_{kq}, \\ \pi_{kq} &= \frac{P(t_k f_k^h - t_{k+q} f_{k+q}^h)}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}, \\ \zeta(\omega, q) &= \frac{1}{N} \sum_k \zeta_{kq}, \\ \zeta_{kq} &= \frac{1}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь $P f_k^h = n_k^h = \langle X_k^{0,\sigma} X_k^{\sigma,0} \rangle$ — числа заполнения, $f_k^h = \{1 + \exp[(\mu - \varepsilon_k)/k_B T]\}^{-1}$ — ферми-функции в

дырочном представлении, μ — химический потенциал. Это представление сейчас более удобно, так как в родительском соединении купратов, когда носителей тока нет, нижняя хаббардовская зона состояний полностью заполнена.

Продифференцировав выражение (4) по времени еще раз, для фурье-образа функции Грина получаем

$$\begin{aligned} \omega^2 \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle &= \omega \langle \langle [S_q^+, H] | S_{-q}^- \rangle \rangle = \\ &= \frac{i}{2\pi} \langle \langle [S_q^+, H], S_{-q}^- \rangle \rangle - \\ &- \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \langle \langle [X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0}, H] | S_{-q}^- \rangle \rangle + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{i,l} J_{il} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i) \times \\ &\times \langle \langle [(S_i^+ S_i^z - S_i^z S_i^+), H] | S_{-q}^- \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \langle \langle [S_q^+, H], S_{-q}^- \rangle \rangle &= -2J_1 K_1 (2 - \gamma_q) + \\ &+ \frac{P}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (f_{k+q}^h - f_k^h), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{i,l} J_{il} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i) \langle \langle [(S_i^+ S_i^z - S_i^z S_i^+), H] | S_{-q}^- \rangle \rangle &= \\ = \Omega_q^2 \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (19)$$

где

$$\Omega_q^2 = J_1^2 (2 - \gamma_q) [1 - \delta + 2K_2 + K_3 - K_1 (1 + 2\gamma_q)]$$

— квадрат частоты колебаний локализованных спинов при учете лишь трех ближайших соседей. Вспомогательную функцию Грина, входящую в (17), вычисляем, используя правила, описанные выше:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \langle \langle [X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0}, H] | S_{-q}^- \rangle \rangle &= \\ = -\frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle - \\ - \frac{P}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \left\{ \left[\frac{J_q}{2} F_J + (1 - F_t) \varepsilon_k \right] f_k^h - \right. \\ \left. - \left[\frac{J_q}{2} F_J + (1 - F_t) \varepsilon_{k+q} \right] f_{k+q}^h \right\} \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

В последнее выражение вошла новая функция Грина

$$\frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle,$$

которая может быть посчитана на основе выражения (14):

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle = \\ = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \chi_{0kq} + \\ + \left[(1 - F_t) \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \pi_{kq} + \right. \\ \left. + J_1 \gamma_q F_J \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \chi_{0kq} \right] \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle + \\ + D_{it}(\omega, q) \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \zeta_{kq}. \quad (21) \end{aligned}$$

Решая совместно уравнения (15), (17), (20) и (21) с учетом (18) и (19), делая упрощения вида

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \zeta_{kq} = \\ = \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - \omega) \frac{1}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}} + \\ + \frac{\omega}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \zeta_{kq} = \frac{\omega}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \zeta_{kq} = \\ = \omega \zeta_t(\omega, q), \quad (22) \end{aligned}$$

приходим к следующей формуле для динамической спиновой восприимчивости:

$$\chi_{total}^{+,-}(\omega, q) = 2\pi i \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle = \frac{\omega \chi_0(\omega, q) \zeta_t(\omega, q) - [\omega \chi_t(\omega, q) + 2J_1 K_1 (2 - \gamma_q)] \zeta(\omega, q)}{\omega \eta(\omega, q) \zeta_t(\omega, q) + [\Omega_q^2 - \omega^2 - \omega \eta_t(\omega, q)] \zeta(\omega, q)}, \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} \zeta_t(\omega, q) &= \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \zeta_{kq}, \\ \chi_t(\omega, q) &= \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \chi_{0kq}, \\ \eta_t(\omega, q) &= \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \eta_{kq}. \end{aligned}$$

Обсудим некоторые особенности формулы (23). В отсутствие носителей функции $\chi_t(\omega, q)$, $\eta_t(\omega, q)$ и $\chi_0(\omega, q)$, $\eta(\omega, q)$ обращаются в нуль, а функция $\zeta(\omega, q)$, фигурирующая в числителе и знаменателе выражения (23), сокращается. В результате получается формула

$$\chi_{local}^{+,-}(\omega, q) = \frac{2J_1 K_1 (2 - \gamma_q)}{\omega^2 - \Omega_q^2}, \quad (24)$$

соответствующая двумерному антиферромагнетiku. Данная формула совпадает с полученной в работах [3–7, 17], где имеется ее подробное обсуждение и сопоставление с результатами кластерных расчетов.

Далее рассмотрим предел широкой зоны. В этом случае функция $\zeta(\omega, q)$ становится малой, члены с множителями в квадратных скобках в (23) могут быть отброшены, а функция $\omega \zeta_t(\omega, q)$ сокращается. Получается следующее выражение:

$$\begin{aligned} \chi_{itinerant}^{+,-}(\omega, q) = \\ = \frac{\chi_0(\omega, q)}{(1 - F_t) \pi(\omega, q) + J_1 \gamma_q F_J \chi_0(\omega, q)}. \quad (25) \end{aligned}$$

При $F_t = 0$ и $F_J = 1$ оно в точности совпадает с формулой, выведенной в работах [8, 10–12]. По терминологии, принятой в книге [1], — это обобщенная РРА-формула для нижней подзоны. Соответствующая формула для верхней хаббардовской подзоны была получена в работе [9]. Следует, однако, подчеркнуть, что при $F_t = 0$ формула (25) не удовлетворяет условию устойчивости. Мнимая часть функции в этом случае, при параметрах зоны, определенных по данным ARPES, как показали наши расчеты, оказывается отрицательной. Это обстоятельство и оправдывает введение параметра $F_t \neq 0$, так чтобы удовлетворить условиям устойчивости как по спиновой, так и по зарядовой восприимчивостям.

Формула (23) имеет много общего с выражением для восприимчивости, приведенным в работах [6],

$$\chi_{[6]}^{+,-}(\omega, q) = \frac{2(\gamma_q - 1)(J_1 K_1 + tF_1/2)}{\omega^2 - \omega \Pi(\omega, q) - \Omega_q^2}. \quad (26)$$

Видно, что здесь отсутствует характерная для коллективизированных электронов функция восприимчивости $\chi_0(\omega, q)$. Аналогична ситуация и с формулами работ [18]. Это объясняется тем, что использованы разные методы проектирования. При выводе

закона дисперсии квазичастиц в работе [6], как и в нашей, в качестве скалярного произведения используется среднее значение антикоммутаторов. Но при выводе формулы для спиновой восприимчивости в работах [6, 18] используются корреляционные функции Кубо. В нашем случае при нахождении дисперсии и функций восприимчивости метод проектирования один и тот же. Кроме того, в нашем случае мы можем провести обобщение формулы (23) на случай сверхпроводящей фазы. При $T < T_c$ общая схема вывода выражения для восприимчивости остается такой же, но значительно усложняются технические расчеты. Они вынесены в Приложение Б.

В заключение данного раздела отметим, что при принятом выше способе проектирования формула для зарядовой восприимчивости имеет вид

$$\chi_{ch}(\omega, q) = 2\pi i \langle \langle X_q^{0,0} | X_{-q}^{0,0} \rangle \rangle = \frac{\chi_0(\omega, q) \zeta_t(\omega, q) - \chi_t(\omega, q) \zeta(\omega, q)}{[1 + \varphi(\omega, q)] \zeta_t(\omega, q) - [\omega/2 + \varphi_t(\omega, q)] \zeta(\omega, q)}, \quad (27)$$

где

$$\varphi_{kq} = \frac{M_{k,q} n_k^h - M_{k+q,q} n_{k+q}^h}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}, \quad \varphi(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k \varphi_{kq},$$

$$\varphi_t(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \varphi_{kq},$$

$$M_{k,q} = F_V V_q - \frac{1}{4} F_J J_q - \frac{1}{2} (1 - F_t) t_k.$$

Остальные обозначения такие же, как и для спиновой восприимчивости.

3. СОПОСТАВЛЕНИЕ С ДАННЫМИ ПО НЕУПРУГОМУ РАССЕЯНИЮ НЕЙТРОНОВ В СВЕРХПРОВОДНИКЕ $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$

В экспериментах, представленных в работе [14], ярко выделяются две особенности: 1) в сверхпроводящем состоянии мнимая часть спиновой восприимчивости имеет резкий пик при низких энергиях (рис. 1); 2) по мере увеличения энергии нейтронов пик интенсивности рассеяния раздваивается, приобретая V-образный вид около волнового вектора $Q = (\pi, \pi)$, напоминая сильно ослабленное магннное рассеяние в родительском соединении La_2CuO_4 .

Эффективные параметры зоны в нашем расчете брались в соответствии с экспериментально наблюдаемой поверхностью Ферми: $t_{eff}^{(1)} = 270$ мэВ, $t_{eff}^{(2)} = -108$ мэВ, $t_{eff}^{(3)} = 27$ мэВ. Самосогласованные по формулам (13) параметры гамильтониана

оказались равными $t_1 = 473$ мэВ, $t_2 = -136.1$ мэВ, $t_3 = 34.7$ мэВ, $\mu = 50$ мэВ.

Зависимость экранированного кулоновского взаимодействия от расстояния задавалась формулой $V(R) = (e^2/R) \exp(-\sigma_0 R)$, где $\sigma_0 \approx 10^{10} \text{ м}^{-1}$ — параметр экранирования. При этом следует отметить, что результаты расчета мало чувствительны к возможным изменениям вида кулоновского псевдопотенциала. Квадрат частоты локализованных спинов на узлах меди в отсутствие носителей тока брался, как и в работе [6], равным $\Omega_q^2 = 2J_1^2 \alpha |K_1| (2 - \gamma_q) (2\Delta + 2 + \gamma_q)$. В результате самосогласования (см. Приложение А) мы нашли значения $K_1 = 4 \langle S_0^z S_1^z \rangle = -0.4$ для спин-спиновой корреляционной функции первых соседей, $\alpha = 1.5$ для параметра расщепления и $\Delta = 5 \cdot 10^{-4}$ для параметра спиновой щели. Для численных оценок брали значение $J_1 = 140$ мэВ, т.е. такое же, как в родительском соединении La_2CuO_4 , а зависимость сверхпроводящей щели от волнового вектора задавали в соответствии с экспериментальными данными, как и в работах [19], т.е.

$$\Delta_k = \Delta_1 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)] + \Delta_4 [\cos(3k_x a) - \cos(3k_y a)],$$

где $\Delta_1 = 3.9$ мэВ, $\Delta_4 = -2.0$ мэВ. Параметры расщепления F_t , F_J и F_V брались равными соответственно 0.65, 1 и 1. Эти значения согласовывались с условием положительности мнимой части спиновой и зарядовой восприимчивостей.

Результаты численного расчета мнимой части спиновой восприимчивости для $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ при использовании параметра заполнения $P = 0.7$ и при температуре $T = 10$ К представлены на рис. 2. Видно, что при волновом векторе $Q = (\pi, \pi)$ в низкочастотной области имеется хорошо выраженный пик в соответствии с данными эксперимента [14]. Расходящийся V-образный рельеф напоминает соответствующий рельеф в родительском соединении La_2CuO_4 , обусловленный магннной модой.

На рис. 3 при тех же параметрах расчета показано скейлинговое поведение мнимой части спиновой восприимчивости, умноженной на температуру, в зависимости от отношения частоты к температуре в нормальной и сверхпроводящей фазах. Как и в работе [7], считалось, что параметр затухания Γ пропорционален температуре: $\Gamma = \beta T$, где $\beta = (1/3) \cdot 10^{-4} \text{ эВ/К}$.

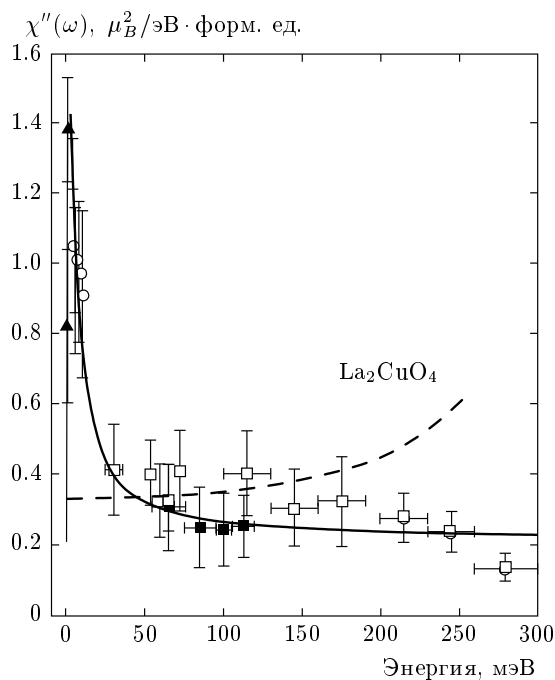


Рис. 1. Зависимость мнимой части восприимчивости сверхпроводника $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ от частоты по данным работы [14]

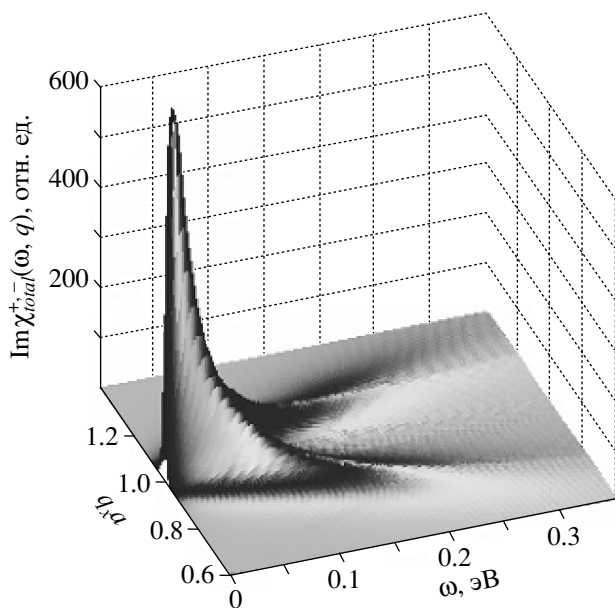


Рис. 2. Мнимая часть восприимчивости сверхпроводника $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$, рассчитанная по формуле (23), как функция частоты и волнового вектора $q_x a$ (в единицах π) при $q_y = q_x$

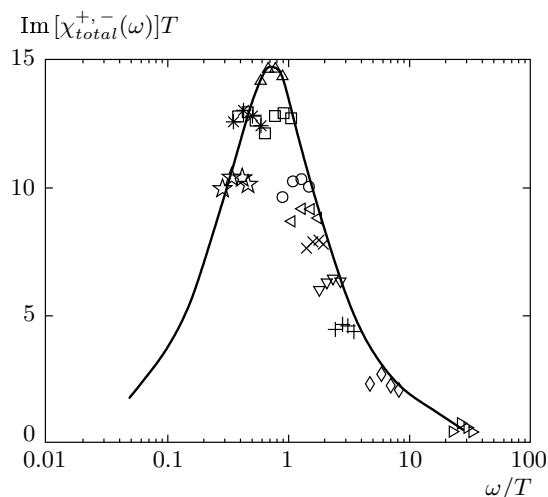


Рис. 3. Скейлинговое поведение мнимой части восприимчивости, умноженной на температуру, в зависимости от отношения частоты к температуре. Показаны положения максимумов функции $\text{Im}[\chi''_{total}(\omega)T]$ при различных температурах в сверхпроводящей ($T = 2 \text{ K}$ (\triangleright), 10 K (\diamond), 20 K ($+$)) и нормальной ($T = 30 \text{ K}$ (∇), 40 K (\times), 50 K (\triangleleft), 60 K (\circ), 90 K (\square), 120 K (\triangle), 300 K ($*$), 600 K (\star)) фазах

Для сравнения на рис. 4 мы приводим данные из работы [15]. Видно, что наш расчет воспроизводит особенности частотно-температурной зависимости рассеяния нейтронов в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$.

4. О ПРОИСХОЖДЕНИИ ДВУХ ПИКОВ В РАССЕЙАНИИ НЕЙТРОНОВ В $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ И ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

В качестве еще одного примера применения развитой теории проанализируем новые данные по рассеянию нейтронов в сверхпроводниках типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Недавние эксперименты [20, 21] на $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$ и $\text{La}_{1.90}\text{Sr}_{0.10}\text{CuO}_4$ показали, что в интенсивности неупругого рассеяния нейтронов имеется не один (как ранее считалось), а два пика (рис. 5a). Один из них (низкочастотный) наиболее четко выражен в сверхпроводящей фазе. В образцах, соответствующих оптимальному допированию ($x = 0.16$), он наблюдается при энергии примерно 18 мэВ [20]. Ни одна из существующих теорий спиновой восприимчивости, как подчеркивается в работе [21], не может объяснить факт одновременного наблюдения указанных пиков. В этой связи интерес-

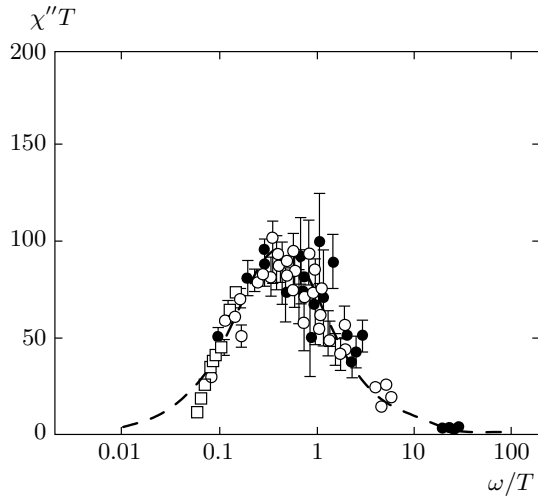


Рис. 4. Данные по рассеянию нейтронов из работы [15]

но узнать, можно ли описать это явление в рамках формулы (23).

Соединение $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ относится к группе сверхпроводников дырочного типа. Носители тока распределены по позициям кислорода. Максимально упрощенный исходный гамильтониан дырочных ВТСП имеет вид [16]

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \psi_i^{\sigma,pd} \psi_j^{pd,\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} \frac{1}{4} J_{ij} \left(\psi_i^{\sigma,\bar{\sigma}} \psi_j^{\bar{\sigma},\sigma} - \psi_i^{\sigma,\sigma} \psi_j^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}} \right) + \sum_{i,j} \frac{1}{2} V_{ij} \psi_i^{pd,pd} \psi_j^{pd,pd}. \quad (28)$$

Здесь $\psi_i^{pd,\sigma}$ ($\psi_j^{\sigma,pd}$) — операторы рождения (уничтожения) композитных квазичастиц в зоне проводимости. Например, оператор $\psi_i^{pd,\uparrow}$ приближенно записывается в виде

$$\psi_i^{pd,\uparrow} \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left(X_i^{\uparrow,\downarrow} P_i^{\uparrow,0} - X_i^{\uparrow,\uparrow} P_i^{\downarrow,0} \right),$$

где $X_i^{p,q}$ и $P_i^{p,q}$ — хаббардовские операторы, относящиеся соответственно к d -дыркам Cu^{2+} и p -дыркам O^{1-} . Формально оператор энергии (28) можно получить из гамильтониана (1) преобразованием

$$X^{0,\uparrow} \rightarrow \psi^{pd,\downarrow}, \quad \psi^{pd,\uparrow} \rightarrow -X^{0,\downarrow}, \quad X_i^{0,0} \rightarrow \psi_i^{pd,pd}$$

и сменой знака интеграла перескока, т. е. $t_{ij} \rightarrow -t_{ji}$. Легко проверить, что функции $\chi_0(\omega, q)$ и $\zeta(\omega, q)$

в формулах (16) инвариантны относительно этого преобразования. Однако следует подчеркнуть, что при данном преобразовании функция $\pi(\omega, q)$ в (16) меняет знак. В частности, для сверхпроводников $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ она будет записываться в виде (для краткости приводим лишь в нормальной фазе)

$$\pi(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{P(t_k f_k - t_{k+q} f_{k+q})}{\omega - \varepsilon_k + \varepsilon_{k+q}},$$

где $f_k = \{1 + \exp[(\varepsilon_k - \mu)/k_B T]\}^{-1}$ — электронная ферми-функция, P определяется значением антикоммулятора

$$\{\psi_i^{pd,\uparrow}, \psi_j^{\uparrow,pd}\} = (\psi_i^{pd,pd} + \psi_i^{\uparrow,\uparrow}) \delta_{ij} = (P + S_i^z) \delta_{ij}.$$

С учетом этих преобразований формула (23) может быть использована и для анализа магнитной восприимчивости $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Во избежание недоразумений отметим, что указанное преобразование следует отличать от стандартного преобразования электрон-дырка в пределах состояний одной зоны проводимости. Сейчас речь идет о свойствах симметрии между формулами для восприимчивостей из разных зон, а именно, между хаббардовскими подзонами нижнего и верхнего типа.

Форма ферми-поверхности в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ задавалась в соответствии с данными работы [22]. Эффективные интегралы перескока равны $t_{eff}^{(1)} = 250$ мэВ, $t_{eff}^{(2)} = -37.5$ мэВ, $t_{eff}^{(3)} = 18.75$ мэВ. Результаты численных расчетов мнимой части восприимчивости в сверхпроводящей фазе изображены на рис. 5. Использовались следующие параметры: суперобменное взаимодействие $J_1 = 0.13$ эВ; параметр затухания $\Gamma = 0.003$ эВ; параметр щели $\Delta_1 = 0.01$ эВ в выражении $\Delta_k = \Delta_1 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]$; $K_1 = -0.424$, $K_2 = 0.178$, $K_3 = K_2$; $F_t = 0.01$, $F_J = 0.80$; число носителей тока в расчете на элементарную ячейку $\delta = 0.25$ и, соответственно, $P = 0.6250$; химический потенциал $\mu = 202.5$ мэВ.

Из сравнений рис. 5а и 5б видно, что наш расчет воспроизводит двухпиковую структуру интенсивности рассеяния нейтронов в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Нижний пик находится внутри энергетического интервала, соответствующего сверхпроводящей щели. Его не будет, если обратить в нуль функции $\eta(\omega, q)$ и $\eta_i(\omega, q)$ в знаменателе выражения (23), что соответствует отключению корреляций в движении коллективизированных дырок. Интересно отметить при этом, что функция $\zeta(\omega, q)$, стоящая перед частотами колебаний локализованных спинов, блокирует их проявление. Из-за когерентных факторов в функции $\zeta(\omega, q)$ вклад в восприимчивость локализованных колебаний «выталкивается» в сторону высоких

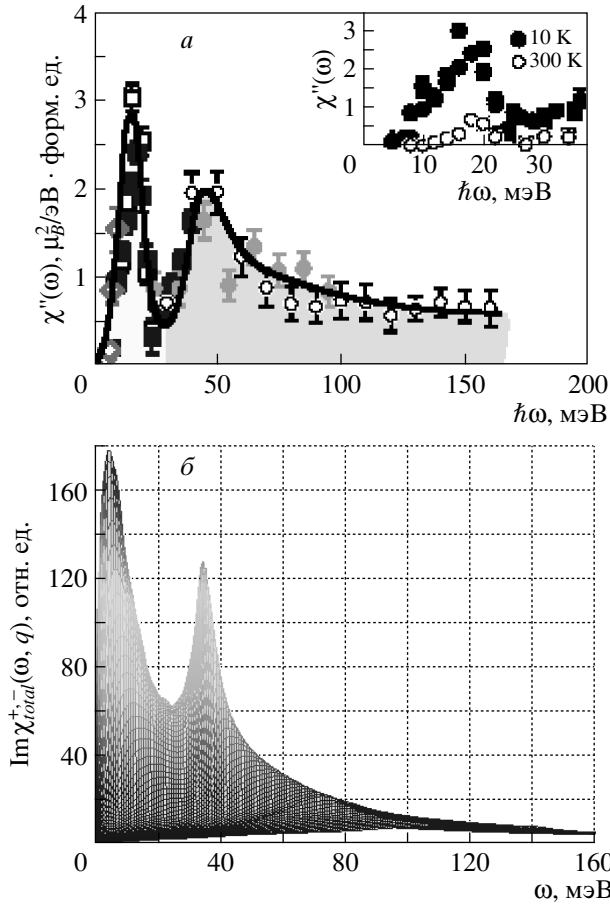


Рис. 5. Мнимая часть восприимчивости сверхпроводника $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$: *a* — данные нейтронного рассеяния [20]; *b* — результаты численных расчетов по формуле (23)

частот, за энергетическую щель. Или, иными словами, восприимчивость на низких частотах «вымерзает». Таким образом, происхождение нижнего пика, как и в рамках RPA, может быть интерпретировано как проявление коллективных спиновых колебаний внутри сверхпроводящей щели (по терминологии работы [23], спиновых экситонов). Дисперсия же высокочастотного пика около волнового вектора $Q = (\pi, \pi)$ напоминает магннное рассеяние в двумерной системе локализованных спинов с сильными антиферромагнитными корреляциями, причем эти колебания существенно перенормированы из-за связи с коллективизированными спинами. Рельеф высокочастотного пика похож на V-образный рельеф, изображенный на рис. 1, однако в случае $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ его положение существенно сдвинуто в сторону высоких частот. Причина этого сдвига

становится понятной, если учесть, что эффективный радиус носителей тока (дырки кислорода, синглетным образом скоррелированные со спином меди) значительно больше, чем в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$, где носители распределены по позициям меди. В последнем случае возмущение антиферромагнитных корреляций слабее и параметр спиновой щели Δ_1 меньше, чем в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.

Итак, проведенное сопоставление с экспериментом показывает, что выведенная формула позволяет описать обнаруженные недавно особенности в рассеянии нейтронов в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ и $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Можно надеяться, что предложенная формула для восприимчивости окажется полезной для интерпретации не только экспериментов по рассеянию нейтронов, но и данных магнитного резонанса на различных ядрах в ВТСП, а также и для оценки эффективности механизма спаривания квазичастиц через спиновые флуктуации.

Авторы благодарны Н. М. Плакиде и А. Ф. Барабанову за обсуждение работы и полезные замечания. Работа одного из авторов (М. В. Е.) выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 06-0217197-а).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Спин-спиновые корреляционные функции

Расчет спин-спиновых корреляционных функций проводится следующим образом:

$$\langle S_i^- S_j^+ \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_q \langle S_{-q}^- S_q^+ \rangle \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{ij}), \quad (\text{A.1})$$

где $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$. Далее используем функции Грина

$$\begin{aligned} \langle S_{-q}^- S_q^+ \rangle &= \int \frac{d\omega}{e^{\beta\omega} - 1} \times \\ &\times [\langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle_{\omega+i\varepsilon} - \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle_{\omega-i\varepsilon}] = \frac{N}{2\pi i} \times \\ &\times \int \frac{d\omega}{e^{\beta\omega} - 1} [\chi^{+,-}(q, \omega + i\varepsilon) - \chi^{+,-}(q, \omega - i\varepsilon)] = \\ &= \frac{N}{\pi} \int \frac{d\omega}{e^{\beta\omega} - 1} \text{Im} \chi^{+,-}(q, \omega). \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

Поскольку

$$\text{Im} \chi^{+,-}(q, \omega) = -\text{Im} \chi^{+,-}(q, -\omega), \quad (\text{A.3})$$

интегрирование можно проводить только по положительным ω . С учетом этого находим

$$\begin{aligned} \langle S_i^- S_j^+ \rangle &= \frac{1}{N\pi} \sum_q \frac{d\omega}{e^{\beta\omega} - 1} \text{Im} \chi^{+,-}(q, \omega) \times \\ &\times \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{ij}) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \times \\ &\times \iiint \left[\frac{d\omega}{e^{\beta\omega} - 1} \text{Im} \chi^{+,-}(q, \omega) - \right. \\ &\left. - \frac{d\omega}{e^{-\beta\omega} - 1} \text{Im} \chi^{+,-}(q, -\omega) \right] \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{ij}) dq_x dq_y = \\ &= \frac{1}{\pi} \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \iiint \text{cth} \left(\frac{\beta\omega}{2} \right) \text{Im} \chi^{+,-}(q, \omega) \times \\ &\times \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{ij}) d\omega dq_x dq_y. \quad (\text{A.4}) \end{aligned}$$

В общем случае зависимость от расстояния корреляционных функций (как и обменного интеграла во взаимодействии РККИ) имеет осциллирующий характер.

Отметим, что при совпадении индексов узлов ($i = j$) левая часть выражения (A.4) должна быть равна

$$\langle S_i^- S_i^+ \rangle = \frac{1}{2}(1 - \delta),$$

а не просто 1/2, как в работе [17]. Для вычисления интеграла по частотам, как это предложено в [17], можно перейти к суммированию по мацубаровским частотам $\omega_n = 2n\pi/\beta$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ — целые числа. Для этого используется разложение

$$\begin{aligned} \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1} - \frac{1}{e^{-\beta\omega} - 1} &= \\ &= \frac{1}{\beta} \left[\sum_i \frac{1}{2\pi n_i/\beta - \omega} - \sum_i \frac{1}{2\pi n_i/\beta + \omega} \right]. \quad (\text{A.5}) \end{aligned}$$

Затем проводится почленное интегрирование с помощью соотношений Крамерса–Кронига. При этом интеграл по частотам от мнимой части восприимчивости выражается через вещественную часть и формула приобретает вид

$$\begin{aligned} \langle S_i^- S_j^+ \rangle &= k_B T \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \times \\ &\times \iint \sum_n \text{Re} \chi^{+,-}(q, i\omega_n) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{ij}). \quad (\text{A.6}) \end{aligned}$$

Слагаемое в правой части с $\omega_n = 0$ соответствует высокотемпературному приближению [24]. В нашем случае характерные частоты могут составлять примерно 40 мэВ, т. е. больше величины $k_B T_c$, поэтому необходим учет и последующих членов суммы.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Вывод формулы при $T < T_c$

Вообще говоря, так как механизм спаривания остается неизвестным, постановка данной задачи может показаться преждевременной. Однако возможен эвристический вариант рассмотрения, основанный на предположении, что операторы рождения и уничтожения квазичастиц в ВТСП являются боголюбовскими. Записав оператор энергии через боголюбовские операторы в качестве исходного, нам остается лишь учесть поправочные члены, пропорциональные намагниченности. Отметим, что в рамках однозонной модели переход к боголюбовским операторам композитного типа не нарушает коммутационных соотношений.

Итак, ищем уравнение движения для оператора $X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0}$, выраженного через операторы Боголюбова:

$$\begin{aligned} X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} &= u_{k+q} u_k \alpha_{k+q}^{0,\downarrow} \alpha_k^{\uparrow,0} - u_{k+q} v_k \alpha_{k+q}^{0,\downarrow} \alpha_{-k}^{0,\downarrow} + \\ &+ v_{k+q} u_k \alpha_{-(k+q)}^{\uparrow,0} \alpha_k^{\uparrow,0} - v_{k+q} v_k \alpha_{-(k+q)}^{\uparrow,0} \alpha_{-k}^{0,\downarrow}, \quad (\text{B.1}) \end{aligned}$$

где

$$x_k = u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_k - \mu}{E_k} \right),$$

$$y_k = v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_k - \mu}{E_k} \right), \quad z_k = u_k v_k = \frac{\Delta_k}{2E_k},$$

$$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + |\Delta_k|^2}, \quad \alpha_k^{0,\uparrow} = u_k X_k^{0,\uparrow} - v_k X_{-k}^{\downarrow,0},$$

$$\alpha_k^{\downarrow,0} = u_k X_k^{\downarrow,0} + v_k X_{-k}^{0,\uparrow}.$$

Для функций Грина, составленных из операторов Боголюбова, имеем

$$\begin{aligned} (\omega - E_k + E_{k+q}) \langle \langle \alpha_{k+q}^{0,\downarrow} \alpha_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle &= \\ &= \frac{i}{2\pi} (u_{k+q} u_k - v_{k+q} v_k) (n_k^h - n_{k+q}^h) + \\ &+ (u_{k+q} u_k - v_{k+q} v_k) \left\{ \left[F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_k \right] n_k^h - \right. \\ &- \left. \left[F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_{k+q} \right] n_{k+q}^h \right\} \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle - \\ &- (u_{k+q} u_k - v_{k+q} v_k) \frac{1}{N} \sum_{k'} (t_{k'+q} - t_{k'}) \times \\ &\times \langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle, \quad (\text{B.2}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (\omega + E_{-k} + E_{k+q}) \langle \langle \alpha_{k+q}^{0,\downarrow} \alpha_{-k}^{0,\downarrow} | S_{-q}^- \rangle \rangle = \\
& = \frac{i}{2\pi} (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) (n_{-k}^h - n_{k+q}^h - P) + \\
& + (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) \left\{ \left[F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_{k+q} \right] n_{k+q}^h - \right. \\
& - \left. \left[F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_k \right] (P - n_{-k}^h) \right\} \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle + \\
& + (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) \frac{1}{N} \sum_{k'} (t_{k'+q} - t_{k'}) \times \\
& \times \langle \langle X_{k'+q}^{0,\downarrow} X_{k'}^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle, \quad (\text{Б.3})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (\omega - E_k - E_{-(k+q)}) \langle \langle \alpha_{-(k+q)}^{\uparrow,0} \alpha_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle = \\
& = \frac{i}{2\pi} (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) (P - n_k^h - n_{-(k+q)}^h) + \\
& + (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) \left\{ \left[F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_{k+q} \right] \times \right. \\
& \times (P - n_{-(k+q)}^h) - \left. \left[F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_k \right] n_k^h \right\} \times \\
& \times \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle + (u_{k+q} v_k - v_{k+q} u_k) \times \\
& \times \frac{1}{N} \sum_{k'} (t_{k'+q} - t_{k'}) \langle \langle X_{k'+q}^{0,\downarrow} X_{k'}^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle, \quad (\text{Б.4})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (\omega + E_{-k} - E_{-(k+q)}) \langle \langle \alpha_{-(k+q)}^{\uparrow,0} \alpha_{-k}^{0,\downarrow} | S_{-q}^- \rangle \rangle = \\
& = \frac{i}{2\pi} (u_{k+q} u_k + v_{k+q} v_k) (n_{-k}^h - n_{-(k+q)}^h) + \\
& + (u_{k+q} u_k + v_{k+q} v_k) \left\{ \left[F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_{k+q} \right] \times \right. \\
& \times (P - n_{-(k+q)}^h) - \left. \left[F_J \frac{J_q}{2} + (1 - F_t) t_k \right] (P - n_{-k}^h) \right\} \times \\
& \times \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle + (u_{k+q} u_k + v_{k+q} v_k) \times \\
& \times \frac{1}{N} \sum_{k'} (t_{k'+q} - t_{k'}) \langle \langle X_{k'+q}^{0,\downarrow} X_{k'}^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle. \quad (\text{Б.5})
\end{aligned}$$

В выражениях (Б.2)–(Б.5) числа заполнения вычисляются по правилу

$$\begin{aligned}
n_k^h & = \langle X_k^{0,\uparrow} X_k^{\uparrow,0} \rangle = P \langle (u_k \alpha_k^{0,\uparrow} - v_k \alpha_{-k}^{\downarrow,0}) \times \\
& \times (u_k \alpha_k^{\uparrow,0} - v_k \alpha_{-k}^{0,\downarrow}) \rangle = u_k^2 P (1 - f_k^h) + v_k^2 P f_k^h,
\end{aligned}$$

где $f_k^h = [1 + \exp(-E_k/k_B T)]^{-1}$.

Складывая эти четыре уравнения в соответствии с формулой (Б.1), получаем обобщение выражения (14) на случай сверхпроводящей фазы:

$$\begin{aligned}
\langle \langle X_{k+q}^{0,\downarrow} X_k^{\uparrow,0} | S_{-q}^- \rangle \rangle & = \frac{i}{2\pi} \chi_{0kq} + \left[F_J \frac{J_q}{2} \chi_{0kq} + \right. \\
& + (1 - F_t) \pi_{kq} \rangle \langle \langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle \rangle + \zeta_{kq} D_{it}(\omega, q), \quad (\text{Б.6})
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
\chi_{0kq}(\omega, q) & = S_{xx} \frac{P(f_k^h - f_{k+q}^h)}{\omega + E_k - E_{k+q}} + \\
& + S_{yy} \frac{P(f_{k+q}^h - f_k^h)}{\omega - E_k + E_{k+q}} + S_{yx}^{(-)} \frac{P(1 - f_k^h - f_{k+q}^h)}{\omega - E_k - E_{k+q}} + \\
& + S_{xy}^{(+)} \frac{P(f_k^h + f_{k+q}^h - 1)}{\omega + E_k + E_{k+q}}, \quad (\text{Б.7})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\pi_{kq}(\omega, q) & = S_{xx} \frac{P(t_k f_k^h - t_{k+q} f_{k+q}^h)}{\omega + E_k - E_{k+q}} + \\
& + S_{yx}^{(-)} \frac{P(t_k(1 - f_k^h) - t_{k+q} f_{k+q}^h)}{\omega - E_k - E_{k+q}} + \\
& + S_{xy}^{(+)} \frac{P(t_k f_k^h - t_{k+q}(1 - f_{k+q}^h))}{\omega + E_k + E_{k+q}} + \\
& + S_{yy} \frac{P(t_k(1 - f_k^h) - t_{k+q}(1 - f_{k+q}^h))}{\omega - E_k + E_{k+q}}, \quad (\text{Б.8})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\zeta_{kq}(\omega, q) & = \frac{S_{xx}}{\omega + E_k - E_{k+q}} + \frac{S_{yx}^{(-)}}{\omega - E_k - E_{k+q}} + \\
& + \frac{S_{xy}^{(+)}}{\omega + E_k + E_{k+q}} + \frac{S_{yy}}{\omega - E_k + E_{k+q}}. \quad (\text{Б.9})
\end{aligned}$$

Здесь для сокращения записи введены факторы когерентности:

$$S_{xx} = x_k x_{k+q} + z_k z_{k+q}, \quad S_{yy} = y_k y_{k+q} + z_k z_{k+q},$$

$$S_{xy}^{(+)} = x_k y_{k+q} - z_k z_{k+q}, \quad S_{yx}^{(-)} = y_k x_{k+q} - z_k z_{k+q}.$$

Формулы (17)–(22) в сверхпроводящей фазе несколько изменяются, в них необходимо сделать формальную замену ε_k на E_k и иметь в виду замену функций (16) на (Б.7)–(Б.9). Кроме того, в уравнениях (17)–(21) нужно учитывать (Б.1). При всем этом формула для спиновой восприимчивости будет иметь такой же вид, как и (23), но теперь в ней функции

$$\zeta(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k \zeta_{kq}, \quad \chi_0(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k \chi_{0kq},$$

$$\pi(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k \pi_{kq},$$

$$\zeta_t(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \zeta_{kq},$$

$$\chi_t(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \chi_{0kq},$$

$$\pi_t(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \pi_{kq},$$

$$n_t(\omega, q) = F_J J_1 \gamma_q \chi_t(\omega, q) + (1 - F_t) \pi_t(\omega, q)$$

определяются выражениями (Б.7)–(Б.9).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Базовые модели в квантовой теории магнетизма*, Изд-во УрО РАН, Екатеринбург (2002).
2. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997); **169**, 225 (1999).
3. H. Shimahara and S. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 989 (1992).
4. S. Winterfeld and D. Ihle, Phys. Rev. B **58**, 9402 (1998).
5. Г. Джакели, Н. М. Плакида, ТМФ **114**, 426 (1998).
6. A. Sherman and M. Schreiber, Phys. Rev. B **68**, 094519 (2003); Eur. Phys. J. B **32**, 203 (2003); A. Sherman, Phys. Rev. B **70**, 184512 (2004).
7. А. В. Михеенков, А. Ф. Барабанов, ЖЭТФ **132**, 392 (2007).
8. J. Hubbard and K. P. Jain, J. Phys. C **1**, 1650 (1968).
9. I. Eremin, Physica B **232**, 793 (1997).
10. V. Yu. Yushankhai, R. Наун, and D. Ihle, Dubna preprint No. E13-1996-81 (1996).
11. Е. В. Кузьмин, ФТТ **39**, 193 (1997).
12. Б. М. Летфуллов, *Метод функций Грина в теории магнетизма*, Типолаборатория УрГУ, Екатеринбург (1997).
13. М. В. Ерёмин, А. И. Андреев, И. М. Ерёмин, Письма в ЖЭТФ **86**, 386 (2007).
14. Stephen D. Wilson, Shiliang Li, Hyungje Woo et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 157001 (2006).
15. Stephen D. Wilson, Shiliang Li, Pencheng Dai et al., Phys. Rev. B **74**, 144514 (2006).
16. М. В. Ерёмин, А. А. Алеев, И. М. Ерёмин, Письма в ЖЭТФ **84**, 197 (2006); ЖЭТФ **133**, 862 (2008).
17. A. Yu. Zavidonov and D. Brinkmann, Phys. Rev. B **58**, 12486 (1998).
18. I. Sega, P. Prelovsek, and J. Bonca, Phys. Rev. B **68**, 054524 (2003); P. Prelovsek, I. Sega, and J. Bonca, Phys. Rev. Lett. **92**, 027002 (2004); I. Sega and P. Prelovsek, Phys. Rev. B **73**, 092516 (2006).
19. G. Blumberg, A. Koitzsch, A. Gozar et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 107002 (2002); H. Matsui, T. Terashima, T. Sato et al., Phys. Rev. Lett. **95**, 017003 (2005); М. В. Ерёмин, И. Е. Любин, А. А. Алеев, в *Сб. трудов конф. «Фундаментальные проблемы сверхпроводимости»*, ФПС'06, ФИАН, Москва (2006), с. 48.
20. B. Vignole, S. M. Hayden, D. F. McMorrow et al., Nature Phys. **3**, 163 (2007).
21. M. Kofu, T. Yokoo, F. Trouw, and K. Yamada, arXiv:cond-mat/0710.5766v1.
22. T. Yoshida, X. J. Zhou, K. Tanaka et al., Phys. Rev. B **74**, 224510 (2006).
23. Р. Уайт, *Квантовая теория магнетизма*, Мир, Москва (1985), с. 184.
24. I. M. Eremin, D. K. Morr, A. V. Chubukov et al., Phys. Rev. Lett. **94**, 147001 (2005).