Функция распределения хаббардовских квазичастиц в 2D-системах при учете динамических процессов спин-флуктуационного рассеяния

© В.В. Вальков, Д.М. Дзебисашвили

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук,
Красноярск, Россия

E-mail: vvv@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 30 июля 2008 г.)

Показано, что спин-флуктуационное рассеяние в ансамбле сильно коррелированных электронов CuO_2-плоскости высокотемпературных сверхпроводников существенно модифицирует функцию распределения хаббардовских квазичастиц. Математически влияние спин-флуктуационного рассеяния проявляется посредством возникновения в числителе однофермионной функции Грина, зависящей от мацубаровской частоты поправки к силовому оператору. Эта добавка, по-разному ренормируя спектральную интенсивность на различных энергетических масштабах, определяет зависимость скачка Мигдала от концентрации электронов в системе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 06-02-16100), программы ОФН РАН, Интеграционного проекта СО РАН.

PACS: 71.10.Fd, 71.10.Ay

1. Введение

Известно, что в газе свободных фермионов вероятность заполнения квантового состояния $(\mathbf{k}, \sigma)$ описывается функцией распределения Ферми–Дирака $f^{(0)}_{\mathbf{k},\sigma} = \{\exp[(\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} - \mu)/T] + 1\}^{-1}$. В этом выражении $\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma}$ — энергия одночастичного состояния $(\mathbf{k}, \sigma)$, $\mathbf{k}$ — квазиимпульс, σ — проекция спинового момента, принимающая два значения: $\sigma = \pm 1/2$, μ — химпотенциал системы, T — температура в энергетических единицах. При включении взаимодействия между фермионами физические свойства системы обсуждаются на языке квазичастичных возбуждений. При этом одним из ключевых вопросов теории является вопрос о функции распределения фермиевских квазичастиц [1–6]. Ранее было показано, что при включении взаимодействия между фермионами объем Ферми-сферы не изменяется (теорема Латтинжера) [3], а скачок в функции распределения на поверхности Ферми (скачок Мигдала) сохраняется и зависит от интенсивности взаимодействия [2].

В связи с открытием высокотемпературной сверхпроводимости особую актуальность приобрели исследования свойств двумерных электронных систем с сильными корреляциями. Считается, что такие модели хорошо описывают основные особенности электронного строения купратных сверхпроводников. Большинство работ этого направления выполнено в рамках модели Хаббарда [7] или ее редуцированного варианта, возникающего при построении эффективного гамильтониана, описывающего низкоэнергетическую область. Несмотря на свою относительную простоту, эта модель позволяет описать главные эффекты сильных внутриатомных взаимодействий, а именно фазовый переход металл–изолятор [8] в так называемых мотт-хаббардовских диэлектриках и нефононные механизмы куперовской неустойчивости в высокотемпературных сверхпроводниках [9–11] (см. обзоры [12,13]).

В последнее время появилось много работ, связанных с исследованиями как нормальной, так и сверхпроводящей фазы модели Хаббарда и ее модификаций, однако ряд принципиальных вопросов теории остается нерешенным и по сей день. В частности, остается открытым вопрос о функции распределения квазичастичных возбуждений в пределе сильных корреляций и главных факторов, определяющих ее характеристики. Одно из препятствий на пути корректного вычисления функции распределения заключается в сложности учета спиновой динамики в условиях сильных корреляций. Для модели Хаббарда это проявляется как проблема описания процессов спин-флуктуационного рассеяния (СФР). В этой связи представляется актуальным исследование влияния СФР на характеристики функции распределения фермиевских квазичастиц модели Хаббарда в режиме сильных корреляций.

В настоящей работе методом диаграммной техники в атомном представлении для модели Хаббарда при $U = \infty$ вычислена функция распределения хаббардовских квазичастиц $f_{\mathbf{k}}$ в рамках однопетлевого приближения. Это позволило изучить влияние динамических спин-флуктуационных процессов на вид $f_{\mathbf{k}}$. Показано, что процессы СФР приводят к качественным изменениям $f_{\mathbf{k}}$ по сравнению с часто используемым приближением Хаббард-I.

2. Связь функции Грина хаббардовских квазичастиц с их одночастичной функцией распределения

Гамильтониан модели Хаббарда при $U = \infty$ в атомном представлении имеет вид

$$H = \sum_{f\sigma} (\varepsilon_\sigma - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fg\sigma} t_{fg} X_f^{\sigma 0} X_g^{0\sigma}. \tag{1}$$

Здесь $\varepsilon_\sigma = \varepsilon - \sigma h$ — одноузельная энергия электрона в магнитном поле h, μ — химический потенциал, а t_{fg} — интеграл перескока. Операторы Хаббарда определены обычным образом на базисе одноузельных состояний: $X^{mn} = |m\rangle\langle n|$. В данном случае этот базис содержит два одноэлектронных состояния $|\sigma\rangle$ $(\sigma = \uparrow, \downarrow)$ и одно вакуумное состояние $|0\rangle$.

Вичисление функции распределения фермиевских квазичастиц в рассматриваемой модели проведем с помощью диаграммной техники для операторов Хаббарда [14–17]. При таком подходе в качестве затравочного гамильтониана H_0 выбирается первое слагаемое в (1), а в качестве оператора взаимодействия H_{int} — второе. Введем однофермионную функцию Грина и ее Фурье-образ

$$D_{0\sigma,0\sigma}(f\tau; g\tau') = -\langle T_\tau \tilde{X}_f^{0\sigma}(\tau) \tilde{X}_g^{\sigma 0}(\tau') \rangle$$
$$= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k},\omega_n} \exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_g) - i\omega_n(\tau - \tau')\}$$
$$\times D_{0\sigma,0\sigma}(k), \quad k = (\mathbf{k}, \omega_n). \tag{2}$$

Если известна $D_{0\sigma,0\sigma}(k)$, то вычисление функции распределения фермиевских квазичастиц сводится к вычислению суммы по мацубаровским частотам

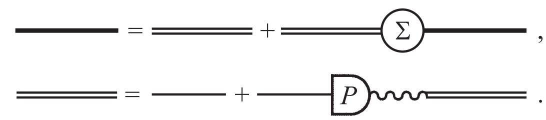
$$f_{\mathbf{k},\sigma} = \langle X_{\mathbf{k}\sigma}^+ X_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = T \sum_{\omega_n} \exp(i\omega_n \delta) D_{0\sigma,0\sigma}(k), \quad \delta \to +0. \tag{3}$$

При выводе этого результата был использован переход от представления Ванье к представлению Блоха для операторов Хаббарда

$$X_f^{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_f) X_{\mathbf{k}\sigma},$$

$$X_f^{\sigma 0} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}_f) X_{\mathbf{k}\sigma}^+.$$

Поскольку для функции $D_{0\sigma,0\sigma}(k)$ имеет место соотношение [14] $D_{0\sigma,0\sigma}(k) = G_{0\sigma,0\sigma}(k) P_{0\sigma,0\sigma}(k)$, задача сводится к вычислению функции $G_{0\sigma,0\sigma}(k)$ и силового оператора (или, иначе, концевого множителя) $P_{0\sigma,0\sigma}(k)$. В графической форме связь функции Грина $G_{0\sigma,0\sigma}(k)$ с массовым оператором $\Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k)$ и силовым оператором $P_{0\sigma,0\sigma}(k)$ определяется системой уравнений



(4)

Здесь жирной линии соответствует функция $G_{0\sigma,0\sigma}(k)$, кружку с символом Σ и полукругу с символом P отвечают массовый и силовой операторы соответственно. Двойная линия обозначает коллективную функцию Грина $G_{0\sigma,0\sigma}^{(0)}(k)$, волнистая — взаимодействие $t_{\mathbf{k}}$. Тонкая линия соответствует затравочному пропагатору

$$g_{0\sigma}(i\omega_n) = (i\omega_n - \varepsilon_\sigma + \mu)^{-1}. \tag{5}$$

Исключая из системы (4) функцию $G_{0\sigma,0\sigma}^{(0)}(k)$, приходим к точному соотношению, определяющему функции Грина $G_{0\sigma,0\sigma}(k)$ через массовый и силовой операторы

$$G_{0\sigma,0\sigma}(k) = \{i\omega_n - \varepsilon_\sigma + \mu - P_{0\sigma,0\sigma}(k) t_{\mathbf{k}} - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k)\}^{-1}. \tag{6}$$

Используя это представление и отмеченную выше связь $D_{0\sigma,0\sigma}(k)$ с $G_{0\sigma,0\sigma}(k)$, получим удобную для вычисления функции распределения формулу

$$f_{\mathbf{k},\sigma} = T \sum_{\omega_n} \exp(i\omega_n \delta)$$
$$\times \frac{1 - N_{\bar\sigma} + \delta P_{0\sigma,0\sigma}(k)}{i\omega_n - \tilde\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} + \mu - \delta P_{0\sigma,0\sigma}(k) t_{\mathbf{k}} - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k)}, \quad \delta \to +0. \tag{7}$$

При записи этого выражения силовой оператор был представлен в виде суммы двух слагаемых: $P_{0\sigma,0\sigma}(k) = 1 - N_{\bar\sigma} + \delta P_{0\sigma,0\sigma}(k)$, Слагаемое $1 - N_{\bar\sigma} = 1 - (1/N)\Sigma_f \langle X_f^{\bar\sigma\bar\sigma} \rangle$ соответствует приближению Хаббард-I, а $\delta P_{0\sigma,0\sigma}(k)$ описывает поправку к силовому оператору. Аналогично этому в знаменателе выделяется спектр коллективных возбуждений $\tilde\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} = \varepsilon_\sigma - (1 - N_{\bar\sigma}) t_{\mathbf{k}}$, соответствующий приближению Хаббард-I. В этом простейшем случае массовый оператор $\Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k)$ и поправка $\delta P_{0\sigma,0\sigma}(k)$ равны нулю. Тогда суммирование по мацубаровским частотам осуществляется в аналитическом виде, и для парафазы при учете соотношений $N_{\bar\sigma} = N_\sigma = n/2$ возникает хорошо известное выражение для функции распределения хаббардовских квазичастиц

$$f_{\mathbf{k},\sigma} = (1 - n/2) \left\{ \exp\left(\frac{\tilde\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu}{T} \right) + 1 \right\}^{-1}. \tag{8}$$

Для получения функции распределения при учете динамических и кинетических взаимодействий в рассматриваемой системе необходимо вычислить в некотором приближении массовый оператор, а также добавку $\delta P_{0\sigma,0\sigma}(k)$ для силового оператора. При этом возникающая зависимость этих величин от мацубаровских частот приводит к существенным ренормировкам функции распределения, отражающим влияние динамических процессов рассеяния. Интенсивность таких ренормировок оказывается зависящей от энергии квазичастиц. Это обстоятельство и приводит к качественным модификациям в функции распределения по сравнению с функцией распределения, полученной в приближении Хаббард-I.

3. Однопетлевое приближение для силового и массового операторов

Первые поправки к функции распределения, связанные с учетом влияния спин-флуктуационных процессов рассеяния, появляются в однопетлевом приближении. В графической форме вклады для $\Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k)$ и $\delta P_{0\sigma,0\sigma}(k)$ определяются диаграммами, показанными на рис. 1. При получении этих диаграмм использовались принцип топологической непрерывности [15,17] и принцип старшинства фермиподобных операторов Хаббарда над бозеподобными. Последнее означает, что при расписывании T_τ — упорядоченного термодинамического среднего от произведения произвольного числа операторов Хаббарда по теореме Вика — при всех прочих равных условиях спаривание начинается с фермиподобного оператора. Для массового оператора в рассматриваемом приближении имеется только одна диаграмма, а для силового — две.

Сопоставляя графическим элементам диаграмм аналитические выражения и вводя необходимые суммирования, получаем

$$\Sigma_{0\sigma,0\sigma} = -\frac{T}{N}\sum_q t_{\mathbf{q}}\, G_{0\bar\sigma,0\bar\sigma}(q), \tag{9}$$

$$\delta P_{0\sigma,0\sigma}(k) = -\frac{T}{N}\sum_q t_{\mathbf{q}}\Big\{G_{0\bar\sigma,0\bar\sigma}(q)\cdot D_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(k-q) + G_{0\sigma,0\sigma}(q)\cdot D^{(irr)}_{\sigma\sigma,\sigma\sigma}(k-q)\Big\}. \tag{10}$$

Аналогичные выражения для массового и силового операторов были выведены ранее методом производящего функционала [16]. Следует отметить, что массовый оператор не зависит ни от частоты, ни от импульса, и поэтому его учет сводится к ренормировке химпотенциала. Поправка же к силовому оператору содержит зависимость как от мацубаровской частоты, так и от квазиимпульса, и ее значение определяется, вообще говоря, спиновыми и зарядовыми флуктуациями. Последнее утверждение связано с тем, что в уравнение (10) входит как Фурье-образ поперечный квазиспиновой функции Грина

$$\begin{aligned} D_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(f\tau; g\tau') &= -\langle T_\tau \tilde X_f^{\bar\sigma\sigma}(\tau)\tilde X_g^{\sigma\bar\sigma}(\tau')\rangle \\ &= \frac{T}{N}\sum_{\mathbf{k},\omega_n}\exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_f-\mathbf{R}_g)-i\omega_n(\tau-\tau')\} \\ &\quad\times D_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(k),\quad k=(\mathbf{k},\omega_n), \end{aligned} \tag{11}$$

так и Фурье-образ неприводимой продольной функции Грина

$$D^{(irr)}_{\sigma\sigma,\sigma\sigma}(f\tau; g\tau') = -\langle T_\tau \Delta\big(\tilde X_f^{\bar\sigma\bar\sigma}(\tau)\big)\Delta\big(\tilde X_g^{\bar\sigma\bar\sigma}(\tau')\big)\rangle,$$
$$\Delta A = A - \langle A\rangle. \tag{12}$$

В парамагнитной фазе эта функция Грина с учетом условия полноты базиса одноузельных состояний $X_f^{00}+X_f^{\sigma\sigma}+X_f^{\bar\sigma\bar\sigma}=1$ и операторного тождества $X_f^{\sigma\sigma}=\hat N_f/2+2\sigma S_f^z$ $(\sigma=\pm 1/2)$ может быть представлена в виде

$$D^{(irr)}_{\sigma\sigma,\sigma\sigma}(f\tau; g\tau') = -\frac{1}{4}\langle T_\tau \Delta\tilde{\hat N}_f(\tau)\Delta\tilde{\hat N}_g(\tau')\rangle - \langle T_\tau \tilde S_f^z(\tau)\tilde S_g^z(\tau')\rangle. \tag{13}$$

В сильно коррелированной системе характерные энергии зарядовых флуктуаций превосходят характерные энергии спиновых флуктуаций. Поэтому термодинамический вклад зарядовых флуктуаций меньше по сравнению с вкладом от спиновых флуктуаций. Имея это в виду, в дальнейшем неприводимую функцию Грина будем вычислять с учетом только спиновых флуктуаций. Принимая во внимание свойство сферической симметрии квазиспиновых функций Грина в парафазе, из (13) получаем связь неприводимой функции Грина с поперечной квазиспиновой функцией

$$D^{(irr)}_{\sigma\sigma,\sigma\sigma}(f\tau; g\tau') = \frac{1}{2}D_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(f\tau; g\tau'). \tag{14}$$

При учете этого равенства однопетлевая поправка для электронного силового оператора в парафазе может быть записана в виде

$$\delta P_{0\sigma,0\sigma}(k) = -\frac{3}{2}\frac{T}{N}\sum_q t_{\mathbf{q}}\, D_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(k-q)G_{0\bar\sigma,0\bar\sigma}(q). \tag{15}$$

Наличие в этом выражении квазиспиновой функции Грина отражает вклад спиновых степеней свободы в энергетические характеристики спектра хаббардовских квазичастиц. В рассматриваемом приближении процессы спин-флуктуационного рассеяния проявляются только

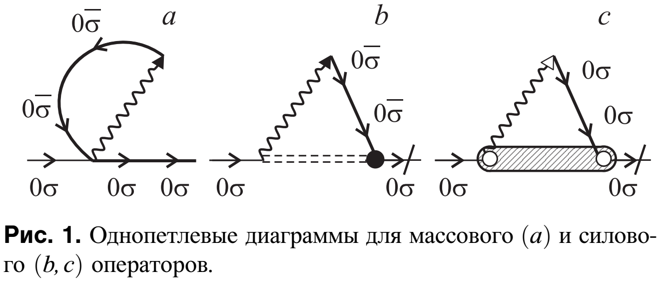
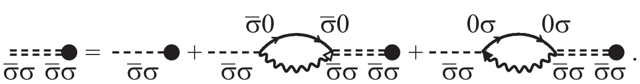


Рис. 1. Однопетлевые диаграммы для массового (a) и силового (b, c) операторов.

через добавку к силовому оператору, и для окончательного определения их роли необходимо вычислить поперечную квазиспиновую функцию Грина в том же однопетлевом приближении. Заметим, что в работе [18] методом уравнений движения для запаздывающих функций Грина были получены близкие выражения для функции Грина (6) и силового оператора (15). Однако используемый авторами метод расцепления для высших функций Грина позволил учесть динамику спиновых флуктуаций лишь посредством введения усредненной по зоне Бриллюэна спектральной функции магнонов со спектром ω_k, соответствующим спиновым возбуждениям ферромагнитного типа. В нашем подходе спиновая динамика учитывается непосредственно через спиновые функции Грина, вычисляемые в парамагнитной фазе.

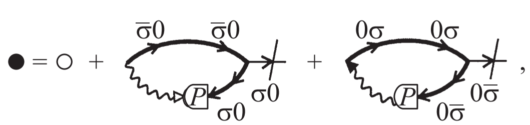
4. Динамическая магнитная восприимчивость

Вычисление поперечной спиновой функции Грина $D_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(k)$ проведем тем же методом диаграммной техники для операторов Хаббарда. Вводя для этой функции обозначение в виде двойной пунктирной линии, напишем в графической форме в однопетлевом приближении уравнение Дайсона



(16)

Здесь темному кружку соответствует спиновой силовой оператор $P_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(q)$. В рассматриваемом приближении его вклады определяются графиками



(17)

где светлый кружок представляет вклад нулевого порядка, равный $N_{\bar\sigma}-N_\sigma$, а следующие за светлым кружком две диаграммы являются однопетлевыми поправками $\delta P_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(q)$. Жирной волнистой линии в формуле (16) отвечает эффективное взаимодействие, удовлетворяющее уравнению

(18)

В графических выражениях (17) и (18) символ P в светлом полукруге, как и раньше, обозначает электронный силовой оператор $P_{0\sigma,0\sigma}(q)$. Записывая уравнение (16) в аналитическом виде, получим представление для квазиспиновой функции Грина

$$D_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(k) = \frac{P_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(k)}{i\omega_m + 2\sigma h - \Sigma_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(k)}. \qquad (19)$$

Здесь учтен явный вид квазиспинового затравочного пропагатора, изображаемого тонкой пунктирной линией: $g_{\bar\sigma\sigma}(i\omega_m) = \{i\omega_m + 2\sigma h\}^{-1}$. Спиновой массовый оператор $\Sigma_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(k)$ определяется вкладами от двух петель правой части уравнения (16) и дается выражением

$$\Sigma_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(k) = -\frac{T}{N}\sum_q t_{\mathbf{q}}\Big[\big(1 + t_{\mathbf{q}} D_{0\sigma,0\sigma}(q)\big) G_{\bar\sigma 0,\bar\sigma 0}(k-q) + \big(1 + t_{\mathbf{q}} D_{0\bar\sigma,0\bar\sigma}(q)\big) G_{0\sigma,0\sigma}(k+q)\Big]. \qquad (20)$$

Для силового оператора $P_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(k)$, определяемого графиками (17), по правилам диаграммной техники находим

$$P_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(k) = (N_{\bar\sigma} - N_\sigma) + \frac{T}{N}\sum_q \big\{ t_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} P_{0\sigma,0\sigma}(q+k) - t_{\mathbf{q}} P_{0\bar\sigma,0\bar\sigma}(q) \big\} G_{0\sigma,0\sigma}(q+k) G_{0\bar\sigma,0\bar\sigma}(q). \qquad (21)$$

Полученные уравнения (19)–(21) совместно с уравнениями (6), (9), (15) образуют замкнутую систему интегральных уравнений, позволяющую самосогласованным образом исследовать влияние спин-флуктуационных процессов на термодинамические характеристики модели Хаббарда. В частности, эта система уравнений является основой для изучения ренормировок функции распределения хаббардовских квазичастиц, индуцированных процессами спин-флуктуационного рассеяния.

5. Функция распределения квазичастиц Хаббарда

Для решения указанной выше системы интегральных уравнений воспользуемся рядом упрощений. Первое упрощение связано с тем, что при вычислении спиновых функций Грина электронные функции Грина берутся в приближении Хаббард-I. Это обстоятельство позволяет провести суммирование по частотам в уравнениях (20), (21) в явном виде. В результате для массового и силового операторов спиновой функции Грина из (20) и (21) получаем выражения, которые в парамагнитной фазе можно представить в виде

$$\Sigma_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m) = i\omega_m \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} \frac{(f_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} - f_{\mathbf{q}})(t_{\mathbf{q}} + t_{\mathbf{q}-\mathbf{k}})}{i\omega_m - \xi_{\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}}, \qquad (22)$$

$$P_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m) = i\omega_m \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} \frac{f_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} - f_{\mathbf{q}}}{i\omega_m - \xi_{\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}}. \qquad (23)$$

Второе упрощение состоит в том, что при вычислении силового оператора по формуле (15) зависящая от квазиимпульса динамическая восприимчивость $\chi(\mathbf{k}, i\omega_m)$ заменяется на усредненное по зоне Бриллюэна значение

$$\chi(\mathbf{k}, i\omega_n) \to \bar\chi(i\omega_n) = -\alpha\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} D_{\bar\sigma\sigma,\bar\sigma\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n). \qquad (24)$$

При этом в правую часть уравнения (15) вводится поправочный коэффициент α с тем, чтобы выполнялось правило сумм для мацубаровской восприимчивости

$$\frac{T}{N}\sum_{\mathbf{k},\omega_n}\chi(\mathbf{k}, i\omega_n) = T\sum_{\omega_n}\overline{\chi}(i\omega_n) = \frac{3n}{4}. \qquad (25)$$

С учетом приближения (24) поправка к электронному силовому оператору $\delta P_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ приобретает следующий вид:

$$\delta P_{0\sigma,0\sigma}(i\omega_n) = \frac{T}{N}\sum_{\mathbf{q},m}\frac{t_\mathbf{q}\,\overline{\chi}(i\omega_{n-m})}{i\omega_m - \xi_\mathbf{q}}. \qquad (26)$$

Для замыкания системы уравнений самосогласования необходимо добавить уравнение для нахождения ренормированного химпотенциала ($\bar{\mu} = \mu - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}$)

$$n/2 = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} f_\mathbf{k},$$

где $f_\mathbf{k}$ — определенная выше функция распределения хаббардовских квазичастиц (7). Спиновый индекс опущен, поскольку рассматривается парамагнитная фаза.

Результаты решения системы интегральных уравнений самосогласования на μ, α, $\overline{\chi}(i\omega_m)$ и $\delta P_{0\sigma,0\sigma}(i\omega_m)$ представлены на рис. 2 и 3. При вычислениях использовалось приближение ближайших соседей, когда $t_\mathbf{k} = -2|t|\big(\cos(k_x) + \cos(k_y)\big)$. Значения химпотенциала указаны в единицах $|t|$. Температура выбиралась равной $T = 5\,\mathrm{K}$.

На рис. 2 для наглядной демонстрации эффектов спиновых флуктуаций штриховой линией показана функция распределения хаббардовских квазичастиц $f_\mathbf{k}$, рассчитанная в приближении Хаббард-I при $n = 0.8$. Видно,

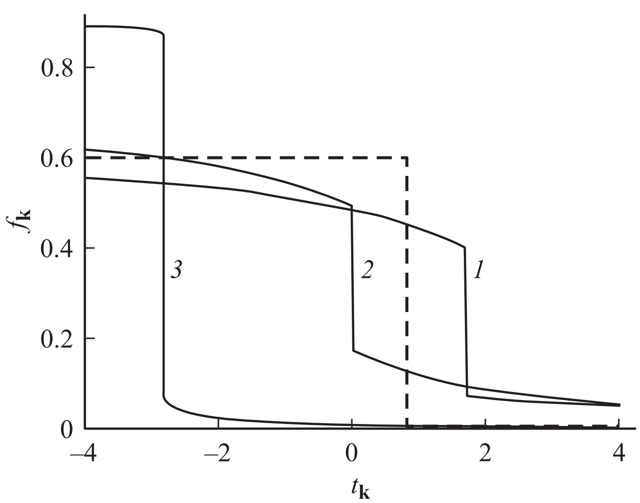


Рис. 2. Функция распределения хаббардовских квазичастиц при различных значениях концентрации. *1* — $n = 0.8$, $\tilde{\mu} = 0.626$, $\alpha = 2.2$; *2* — $n = 0.667$, $\tilde{\mu} = 5.2 \cdot 10^{-4}$, $\alpha = 1.33$; *3* — $n = 0.2$, $\tilde{\mu} = -2.51$, $\alpha = 0.915$. Штриховой линией показана функция $f_\mathbf{k}$, вычисленная в приближении Хаббард-I для $n = 0.8$.

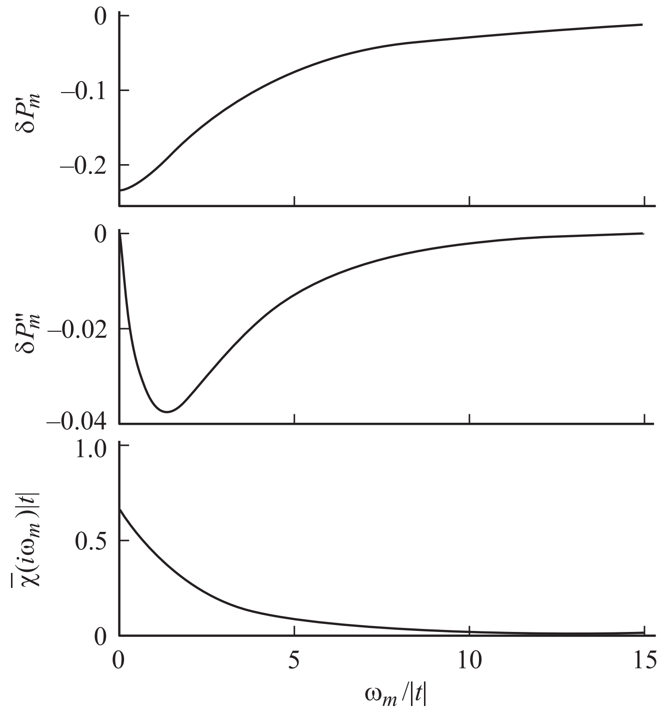


Рис. 3. Зависимость действительной и мнимой частей силового оператора и динамической восприимчивости от мацубаровской частоты при $n = 0.8$.

что в этом случае функция $f_\mathbf{k}$ имеет вид обычной Ферми-ступеньки, уменьшенной на величину хорошо известного ренормирующего фактора $1-n/2$. Сплошной линией *1* на этом же рисунке показана функция $f_\mathbf{k}$, рассчитанная с учетом процессов рассеяния на спиновых флуктуациях при той же концентрации $n = 0.8$. Сравнение двух зависимостей показывает, что между ними имеются три принципиальных различия. Во-первых, включение динамических спин-флуктуационных процессов привело к конечной вероятности заполнения состояний выше импульса Ферми k_F, определяемого как значение квазиимпульса, при котором функция распределения $f_\mathbf{k}$ имеет скачок конечной величины Z. Во-вторых, в области энергий, меньших химпотенциала, возникает сильная, зависящая от отклонения энергии квазичастиц от химпотенциала ренормировка функции распределения. В-третьих, положение скачка функции распределения значительно изменяется за счет однопетлевых поправок в массовый оператор.

По мере уменьшения концентрации доля электронов, занимающих состояния с $k > k_F$, сначала увеличивается, достигает максимума при $n = 0.667$ (кривая *2* на рис. 2), а затем уменьшается. Очевидно, что для значений концентрации, много меньших единицы, эффективность процессов СФР должна быть мала, и соответственно вид функции $f_\mathbf{k}$ будет мало отличаться от Ферми-ступеньки. Из представленных графиков видно, что эта закономерность действительно имеет место.

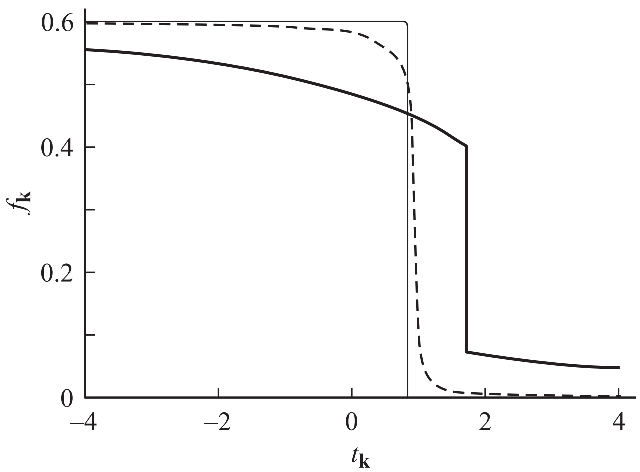


Рис. 4. Функции распределения хаббардовских фермионов, рассчитанные в статическом приближении. Тонкая сплошная линия — $\bar{\chi}(0) = 0.74|t|$, штриховая — $\bar{\chi}(0) = 80|t|$. Для сравнения жирной линией показана функция $f_{\mathbf{k}}$, рассчитанная с динамической восприимчивостью при тех же параметрах: $n = 0.8$, $T = 5\,\mathrm{K}$.

На рис. 3 показаны частотные зависимости силового оператора $\delta P_{0\sigma,0\sigma}(i\omega_m) = \delta P'_m + i\delta P''_m$ и мацубаровской динамической восприимчивости $\bar{\chi}(i\omega_m)$ для концентрации $n = 0.8$. Силовому оператору соответствуют нечетные мацубаровские частоты, а восприимчивости — четные. Заметим, что действительная часть силового оператора $\delta P'_m$ является симметричной функцией мацубаровской частоты, а мнимая $\delta P''_m$ — антисимметричной. Из представленного рисунка видно, что на масштабе ширины зоны $W \approx 4|t|$ ренормировки силового оператора за счет учета однопетлевых поправок $(\delta P'_m)$ весьма существенны, и именно с ними связана сильная модификация функции $f_{\mathbf{k}}$.

При высоких температурах, как видно из рис. 3, вклад в $\bar{\chi}(i\omega_m)$ будут вносить только частоты с малым номером m. В этом случае можно воспользоваться так называемым высокотемпературным пределом, когда $\bar{\chi}(i\omega_m) \cong \delta_{m0}\bar{\chi}(0)$. Это соответствует статическому приближению. Расчеты, проведенные в этом приближении, показаны на рис. 4 тонкой сплошной и штриховой линиями, отражающими функцию распределения $f_{\mathbf{k}}$ при малых и больших значениях $\bar{\chi}(0)$ соответственно. Видно, что в области низких температур ($T = 5\,\mathrm{K}$) статическое приближение с малым значением восприимчивости фактически не приводит к отличию $f_{\mathbf{k}}$ от Ферми-ступеньки и соответствует простейшему приближению Хаббард-I с $Z = 1-n/2$. Для больших значений $\bar{\chi}(0)$ функция распределения испытывает сильное размытие, как это имело бы место при высоких температурах. Однако в данном случае температура мала, и размытие целиком обусловлено процессами рассеяния.

Из этого следует, что при значительной эффективности процессов спин-флуктуационного рассеяния использование статического приближения может привести к некорректному результату, проявляющемуся как сильное размытие функции распределения, и исчезновению скачка Мигдала. Между тем учет динамических эффектов спин-флуктуационного рассеяния сохраняет скачок Мигдала, приводя функцию распределения к виду, характерному для теории Ферми-жидкости Ландау.

6. Заключение

Подчеркнем, что, как следует из представленных результатов, спин-флуктуационные процессы рассеяния для электронных систем в режиме сильных корреляций оказывают существенное влияние на функцию распределения хаббардовских квазичастиц. Очевидно, что этим влиянием проявление спин-флуктуационных процессов не ограничивается. Математически отмеченные процессы учитываются через силовой оператор, входящий в числитель однофермионной функции Грина. Это означает, что рассмотренные процессы будут существенно сказываться и на спектральной интенсивности, а значит, и на характеристиках псевдощелевого поведения сильно коррелированных электронных систем. Предложенный метод учета процессов спин-флуктуационного рассеяния позволяет исследовать и такой круг задач. Однако это выходит за рамки настоящей работы.

Список литературы

[1] Л.Д. Ландау. ЖЭТФ **35**, 97 (1958).
[2] А.Б. Мигдал. ЖЭТФ **32**, 399 (1957).
[3] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **119**, 1153 (1960).
[4] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Физматгиз, М. (1962). 444 с.
[5] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Теоретическая физика. Т. 9: Статистическая физика. Ч. 2. Наука, М. (1978). 448 с.
[6] P. Nozieres. Theory of interacting fermi systems. Westview press (1997). 370 p.
[7] J. Hubbard. Proc. R. Soc. London. Ser. A **276**, 238 (1963).
[8] N.F. Mott. Phil. Mag. **6**, 287 (1961).
[9] P.W. Anderson. Science **235**, 1196 (1987).
[10] Р.О. Зайцев, В.А. Иванов. Письма в ЖЭТФ **46**, 140 (1987).
[11] N.M. Plakida, V.Yu. Yushankhay, I.V. Stasyuk. Physica C **162–164**, 787 (1989).
[12] Ю.А. Изюмов. УФН **167**, 465 (1997).
[13] Ю.А. Изюмов. УФН **169**, 225 (1999).
[14] Р.О. Зайцев. Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма. Едиториал УРСС, М. (2004). 173 с.
[15] Ю.А. Изюмов, М.И. Кацнельсон, Ю.Н. Скрябин. Магнетизм коллективизированных электронов. Физматлит, М. (1994). 368 с.
[16] Ю.А. Изюмов, Н.И. Чащин, Д.С. Алексеев. Теория сильнокоррелированных систем. Метод производящего функционала. НИЦ „Регулярная и хаотическая динамика“, М.–Ижевск (2006). 384 с.
[17] В.В. Вальков, С.Г. Овчинников. Квазичастицы в сильно коррелированных системах. Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001). 277 с.
[18] V.Yu. Irkhin, A.V. Zarubin. Phys. Rev. B **70**, 035 116 (2004).