В. С. Капитонов, К. Л. Малышев,
$\boxed{\text{В. Н. Попов}}$, П. А. Севастьянов

ЭФФЕКТИВНОЕ ДЕЙСТВИЕ И СПЕКТР КОЛЛЕКТИВНЫХ МОД В АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ ФАЗЕ ТРЕХЗОННОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА С ОТТАЛКИВАНИЕМ

§1. Введение

Возможность антиферромагнитного (АФ) порядка в высокотемпературных соединениях, содержащих плоскости CuO_2, свидетельствует о важной роли магнетизма в физике высокотемпературной сверхпроводимости (см. обзоры [1, 2]). В этой связи закономерен, например, интерес к механизмам сверхпроводимости, использующим обмен АФ флуктуациями [3–5]. В основу теоретического описания АФ упорядочения или, более широко, магнитных и сверхпроводящих состояний в указанных системах может быть положена широко известная модель Хаббарда. Хотя спонтанный магнитный порядок в узкозонных моделях Хаббарда размерности один и два формально запрещен при ненулевой температуре [6] (использование неравенств Боголюбова в духе теоремы Мермина–Вагнера), эксперимент свидетельствует в пользу двумерной (или точнее – квазидвумерной) природы АФ порядка в соединениях типа CuO_2 [7]. Как явствует из численных расчетов в [8], антиферромагнетизм действительно может существовать при половинном заполнении (одна квазичастица на узел) в однозонной двумерной модели Хаббарда при всех значениях кулоновского отталкивания. Работа [9] численно подтверждает тот же факт и для трехзонной модели (заполнение – одна квазичастица на ячейку). В перечисленных в [1, 2, 7] теоретических работах, затрагивающих антиферромагнетизм в моделях Хаббарда, также установлено, что для любого отталкивания упорядочение существует при половинном заполнении и разрушается допированием.

Магнитные и сверхпроводящие состояния в двумерных моделях Хаббарда с отталкиванием были рассмотрены также и в работах [10–12] (однозонный случай), [13] (трехзонный случай). В частности, было показано, что в обоих случаях при соответствующем заполнении решетки (половинном – для однозонного, или один фермион на элементарную ячейку – для трехзонного случая) возможен АФ порядок. Рассмотренное же в [10–13] сверхпроводящее состояние образуется при отклонении от указанных заполнений и связано с близостью линии Ферми к седловым точкам зоны, и куперовское спаривание происходит в суперпозицию состояний с нечетными угловыми моментами.

Ввиду продолжающегося интереса к фазовой диаграмме двумерной модели Хаббарда представляется полезным продолжить работы [10–13] применяя далее метод функционального интегрирования для вычисления спектра коллективных мод в ее конденсированных состояниях. Для однозонного случая это уже проделано в [14] (магнитные состояния) и [15] (сверхпроводящее состояние). В предлагаемой работе указанная техника применяется для вычисления коллективного спектра в АФ фазе трехзонной двумерной модели с отталкиванием. Как в [10–15], так и здесь кулоновское взаимодействие предполагается слабым. Заметим только, что аргументы в пользу изучения случая слабой связи приведены, например, в [16, 17]. Метод же функционального интегрирования является весьма эффективным средством при исследовании коллективных возбуждений и его применение, с раздельным интегрированием по “быстрым” и “медленным” функциональным переменным и использованием преобразования Хаббарда–Стратоновича для взятия интеграла по “медленным” ферми–полям, в моделях физики конденсированного состояния изложено в книгах [18, 19].

Идея применять функциональный интеграл (ФИ) к модели Хаббарда не нова. Например, в коротком сообщении [20] ФИ и преобразование Хаббарда–Стратоновича используются в однозонной $2D$ модели Хаббарда с произвольным отталкиванием. В длинноволновом низкоэнергетическом пределе и при половинном заполнении в [20] возникает нелинейная σ-модель для спиновых волн, которая согласуется с моделью Гайзенберга для фактически рассматриваемой сильной связи. В приближении седловой точки в [20] выводится однопетлевой эффективный лагранжиан для флуктуаций спина, заряда и амплитуды. В работе [21] ФИ применяется также в сильно коррелированном полузаполненном случае, для которого в приближении седловой точки и с использованием пространственно-неоднородного спинового репера удается получить эффективное действие квантового антиферромагнетика. Новые примеры и дальнейшие указания можно найти в [7, 20–22]. Как в [20] так и в [21] замечено, что развитые там при половинном заполнении подходы не имеют видимых ограничений по кулоновскому отталкиванию, и полезно было бы явно перейти в них через промежуточную область к слабой связи. Предлагаемая работа, равно как и [14], независимо следует [18, 19] и приводит к спектру, который может быть использован для сравнения с результатами таких переходов.

Статья организована следующим образом. В §2 содержится короткая сводка основных используемых конструкций, описано интегрирование по “быстрым” и “медленным” полям с соответствующим преобразованием Хаббарда–Стратоновича и получены эффективные действия как для элементарных возбуждений в окрестности поверхности Ферми, так и для коллективных бозевских мод. Оценена критическая температура T_c перехода из нормального в антиферромагнитное состояние. В §3 вычислен спектр коллективных возбуждений как в окрестности фазового перехода (область Гинзбурга–Ландау $|T - T_c| \ll T_c$), так и в низкотемпературной области $T \ll T_c$. При $T > T_c$ спектр состоит из одной ветви, а при $T < T_c$ спонтанное нарушение симметрии ведет к появлению еще одной (голдстоуновской) ветви, имеющий фононный характер. Вблизи T_c все ветви спектра оказываются мнимыми. В низкотемпературной области имеются вещественная голдстоуновская мода и неголдстоуновская ветвь со щелью. В §4 перечислены основные результаты, а в Приложение вынесены формулы, использованные в работе.

§2. Эффективное действие

Гамильтониан рассматриваемой трехзонной модели Хаббарда введен в [23], а формулировка и обозначения, используемые ниже, подробно представлены в [13]. Поэтому сразу запишем p-

представление интересующего нас исходного действия S:

$$S \;=\; S_0 \,+\, S_1\,, \tag{2.1}$$
$$S_0 \;=\; \sum_{p,s} \Psi_s^*(p)\, G_0^{-1}(p)\, \Psi_s(p)\,,$$

$$S_1 \;=\; -\,(\beta N)^{-1} \sum_{\alpha=1}^{3} \mathcal{U}_\alpha \sum_{p_1+p_2=p_3+p_4} \psi_{\alpha\uparrow}^*(p_1)\, \psi_{\alpha\downarrow}^*(p_2)\, \psi_{\alpha\downarrow}(p_4)\, \psi_{\alpha\uparrow}(p_3)\,,$$

где

$$G_0^{-1}(p) \;=\; i\,p_0 \,-\, \mathcal{H}_0(\vec{p})\,, \tag{2.2}$$

$$\mathcal{H}_0(\vec{p}) \;=\; \begin{pmatrix} \varepsilon_d-\mu & -T_1^*(\vec{p}) & -T_2^*(\vec{p}) \\ -T_1(\vec{p}) & \varepsilon_p-\mu & 0 \\ -T_2(\vec{p}) & 0 & \varepsilon_p-\mu \end{pmatrix}, \quad \Psi_s(p) \;=\; \begin{pmatrix} \psi_{1s}(p) \\ \psi_{2s}(p) \\ \psi_{3s}(p) \end{pmatrix}. \tag{2.3}$$

В столбцах Ψ_s поля ψ_{1s} описывают фермиевские квазичастицы на “медной” подрешетке плоскости CuO_2, а ψ_{2s} и ψ_{3s} – на “кислородных” подрешетках, и s принимает значения $\uparrow,\downarrow$. Число узлов в подрешетках есть $N = L^2$ и $3N$ – общее число узлов. Здесь и далее использованы 3-импульсные обозначения $p = (p_0, \vec{p})$, где $p_0 = (2n+1)\pi/\beta$ – фермионные мацубаровские частоты, $p_{1,\,2} = (2\pi/L)\, n_{1,\,2}$ и $n_{1,\,2}$ пробегают дискретные значения $1 \leqslant n_{1,\,2} \leqslant L$. Кулоновское отталкивание на узлах характеризуется $\mathcal{U}_1 \equiv \mathcal{U}_d > 0$, $\mathcal{U}_2 = \mathcal{U}_3 \equiv \mathcal{U}_p > 0$ и, следуя [9, 23], будем считать, что $\mathcal{U}_p$ меньше (например, в два раза) чем $\mathcal{U}_d$. Далее, ε_d и ε_p – узельные энергии и μ – химический потенциал. В функциях $T_{1,\,2}(\vec{p}) = t\,(1+e^{ip_{1,2}})$ использована амплитуда t перескоков с атомов меди на ближайшие атомы кислорода (перекрытием кислородных орбиталей пренебрегаем), т.е. считается, что модель изотропна. Слагаемое S_1 в (2.1) считается малым возмущением при условии $\mathcal{U}_\alpha \ll t$ (слабая связь).

Используем S (2.1)–(2.3) для построения температурной теории возмущений в формализме фунционального интеграла

$$Z = \mathrm{const} \times \int \mathcal{D}\,(\Psi^*, \Psi) \exp S,\;\; \mathcal{D}\,(\Psi^*, \Psi) = \prod_{\alpha=1}^{3} \prod_{p,s} \mathrm{d}\psi_{\alpha s}^*(p)\, \mathrm{d}\,\psi_{\alpha s}(p), \tag{2.4}$$

где функциональные переменные есть комплекснозначные образующие бесконечномерной грассмановой алгебры и $\mathcal{D}\,(\Psi^*, \Psi)$ –

мера интегрирования [24]. Диаграммная техника, основанная на (2.1)–(2.4), содержит, в качестве элементов, линии (неперенормированные функции Грина) $G_{0,\alpha\beta}(p)$ и вершины $\mathcal{U}_\alpha$. Неперенормированные функции Грина есть, по определению, частные двух функциональных интегралов

$$G_{0,\alpha\beta}(p) \equiv -\frac{\int \mathcal{D}\,(\Psi^*,\Psi)\,\psi_{\alpha s}\psi^*_{\beta s}\exp S_0}{\int \mathcal{D}\,(\Psi^*,\Psi)\exp S_0}$$

и образуют набор матричных элементов матрицы обратной к $G_0^{-1}(p)$ (2.2). Правила составления диаграмм и последующих вычислений стандартны и могут быть найдены в [18, 19].

В работе [13] показано, что накладывая условие $\mu + 2t = \varepsilon_d + \mathcal{U}_d/4 = \varepsilon_p + \mathcal{U}_p/8$ в трехзонной модели с отталкиванием можно реализовать нормальное состояние с заполнением $N/3N = 1/3$ (одна квазичастица на элементарную ячейку). Полная функция Грина определяется при этом из уравнения Дайсона–Горькова и для собственно-энергетических частей используется однопетлевое приближение, при котором перенормировка химического потенциала сводится к сдвигу на константу. При температуре $T \ll 2t$ спектр элементарных возбуждений имеет вид:

$$\begin{aligned} E_0(\vec{p}) \;&=\; 2t \\ E_\pm(\vec{p}) \;&=\; 2t \pm \sqrt{|T_1|^2 + |T_2|^2} \equiv 2t \pm 2t\left(1 + \frac{1}{2}\left(\cos p_1 + \cos p_2\right)\right)^{1/2}. \end{aligned} \tag{2.5}$$

В данной работе также будем считать, что $\mu + 2t = \varepsilon_d + \mathcal{U}_d/4 = \varepsilon_d + \mathcal{U}_p/8$.

Итак, выполним в Z (2.4), где S определено в (2.1)–(2.3), последовательное интегрирование по “быстрым” и “медленным” переменным, как изложено в [18, 19]. Как видно из (2.5), линия Ферми задается уравнением $\cos p_1 + \cos p_2 = 0$ и “медленную” переменную Ψ_S можно определить, ограничив импульсы исходных квазичастиц узким слоем $|\cos p_1 + \cos p_2| \leqslant \varepsilon_0$ вблизи этой линии так, что

$$\max\{T,\ T_c\} \ll \frac{t}{2}\,\varepsilon_0 \ll 2t\,. \tag{2.6}$$

Далее, равенством $\Psi_F = \Psi - \Psi_S$ определяются “быстрые” переменные. Интегрирование в (2.4) по Ψ_F^*, Ψ_F приводит к функционалу $\widetilde{S}$, имеющему смысл эффективного действия “медленных” полей:

$$\int \mathcal{D}\left(\Psi_F^*, \Psi_F\right) \exp S = \exp\left(\widetilde{S}\left[\Psi_S^*, \Psi_S\right]\right). \tag{2.7}$$

Используя опыт вычислений для ферми – систем [18, 19] и ограничиваясь порядками не выше четвертого, можно получить $\widetilde{S}$ непосредственно из S (2.1) следующим образом: $G_0^{-1}(p)$ заменяется на матрицу $g^{-1}(p)$ (обращение $g^{-1}(p)$ приводит к одночастичным функциям Грина "медленных" полей), и U_α – на двухчастичную амплитуду рассеяния $T_\alpha(p_1, p_2, p_3, p_4)$ "медленных" квазичастиц с противоположными спинами. При этом все суммирования должны проводится вблизи линии $\cos p_1 + \cos p_2 = 0$. Для $g(p)$ и T_α возникают диаграммные ряды теории возмущений, где внутренним суммированиям отвечают "быстрые" импульсы.

Зафиксируем $g^{-1}(p)$ в $\widetilde{S}$ приближенным уравнением $g^{-1}(p) = G_0^{-1}(p) - \Sigma$, где Σ – диагональная матрица нормальных собственно - энергетических частей вида $\Sigma = \mu - \mathrm{diag}\{x + \varepsilon_d, y + \varepsilon_p, y + \varepsilon_p\}$. Тогда, в однопетлевом приближении, ренормированные параметры заполнения x и y принимают значение $-2t$ [13], а матричные элементы $g(p)$ находим из

$$g^{-1}(p) = \begin{pmatrix} ip_0 - 2t & T_1^*(\vec{p}) & T_2^*(\vec{p}) \\ T_1(\vec{p}) & ip_0 - 2t & 0 \\ T_2(\vec{p}) & 0 & ip_0 - 2t \end{pmatrix} \equiv i\,p_0 - \mathcal{H}(p). \tag{2.8}$$

В низшем приближении, оправданном для (2.6), можно заменить в $\widetilde{S}$ вершины T_α на $\mathcal{U}_\alpha$.

Легко увидеть, что собственные значения матрицы $\mathcal{H}$ (2.8) задаются E_0, $E_\pm$ (2.5) и она может быть диагонализована унитарным преобразованием:

$$u^{-1}\mathcal{H}u = \mathrm{diag}\{E_+, E_0, E_-\}, \tag{2.9}$$

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}\xi}\begin{pmatrix} -\xi & 0 & \xi \\ T_1 & -T_2^*\sqrt{2} & T_1 \\ T_2 & T_1^*\sqrt{2} & T_2 \end{pmatrix} \in U(3),$$

где $\xi^2 = |T_1|^2 + |T_2|^2$. Преобразование (2.9) подсказывает идею линейной замены трех переменных и в правой части (2.7). Три новых переменных интегрирования, скажем φ_+, φ_0, φ_-, будут в точности отвечать зонной структуре системы медленных полей. В связи с тем, что уровень Ферми отвечает подзоне $E_-(\vec{k})$, возбуждения, описываемые φ_+ и φ_0, не существенны для процессов вблизи линии Ферми и правую часть (2.7) можно проинтегрировать по переменным φ_+^*, φ_+ и φ_0^*, φ_0. Вновь ограничимся однопетлевым приближением для перенормированных функций Грина и низшим – для вершины. Однопетлевые поправки к функции Грина поля φ_- экспоненциально малы благодаря (2.6) и, следовательно, могут быть отброшены (что и объясняет законность интегрирования по φ_+, φ_0).

В результате, для $\varphi_{-,s}(p) \equiv \varphi_s(p)$ получаем эффективное действие

$$\mathcal{S} = {\sum_{p,s}}' \varphi_s^*(p)\,(i\,p_0 + \varepsilon(\vec{p}))\,\varphi_s(p) - \\ - \frac{\mathcal{U}_d}{4\beta N} \sum_{p_1+p_2=p_3+p_4} \varphi^*{}_\uparrow(p_1)\,\varphi_\downarrow^*(p_2)\,\varphi_\downarrow(p_4)\,\varphi_\uparrow(p_3), \qquad (2.10)$$

где

$$\varepsilon(\vec{p}) = \frac{t}{2}\,(\cos p_1 + \cos p_2)$$

и вклад, происходящий от $\mathcal{U}_p$, отброшен [9, 23]. Эффективное действие $\mathcal{S}$ (2.10) описывает элементарные возбуждения вблизи уровня Ферми и имеет вид действия полузаполненной однозонной модели Хаббарда (отличие в нестандартной нормировке амплитуды перескоков и кулоновского отталкивания). Именно $\mathcal{S}$ можно использовать для изучения магнитных состояний в рассматриваемой трехзонной модели с заполнением 1/3.

Для перехода к АФ упорядочению в системе, описываемой $\mathcal{S}$ (2.10), введем под знак интегрирования в $\int \mathcal{D}\,(\varphi^*, \varphi) \exp \mathcal{S}$ следующий бозевский гауссов интеграл:

$$\int \mathcal{D}\,(\vec{N}_p, \vec{N}_{-p}) \exp\left(-\frac{1}{\mathcal{U}_d}\sum_p \vec{N}_p \cdot \vec{N}_{-p}\right),$$

где $N_{x,p}$ и $N_{y,p}$ – фурье-компоненты вектора Нееля, характеризующего АФ порядок, $\vec{N}_p \cdot \vec{N}_k \equiv N_{x,p}\,N_{x,k} + N_{y,p}\,N_{y,k}$, и $\mathcal{D}\,(\vec{N}_p, \vec{N}_{-p})$ – мера интегрирования. Меняя последовательность интегрирований и выполняя сдвиг

$$\begin{aligned} N_{x,p} &\longrightarrow N_{x,p} + \frac{\mathcal{U}_d}{4\sqrt{\beta N}} \sum_{k-q=p} \varphi_\uparrow(k_\pi)\varphi_\downarrow^*(q) + \varphi_\downarrow(k_\pi)\varphi_\uparrow^*(q) \\ N_{y,p} &\longrightarrow N_{y,p} - \frac{i\mathcal{U}_d}{4\sqrt{\beta N}} \sum_{k-q=p} \varphi_\uparrow(k_\pi)\varphi_\downarrow^*(q) - \varphi_\downarrow(k_\pi)\varphi_\uparrow^*(q)\,, \end{aligned} \qquad (2.11)$$

где $k_\pi = (k_0, \vec{k} + \vec{\pi})$ и $\vec{\pi} = (\pi, \pi)$, уничтожим 4-фермионный член в $\mathcal{S}$ (преобразование Хаббарда–Стратоновича). В результате внутренний интеграл по грассмановым переменным гауссов и стандартно вычисляется. Условие нетривиальности сдвига (2.11) равносильно тому, что в модели ниже точки перехода возникают аномальные средние указанных квадратичных комбинаций полей φ, т.е. ненулевые средние неелевских компонент $\langle N_x\rangle$, $\langle N_y\rangle$ [12–14]. Окончательно, статистическая сумма $\mathcal{Z}$ в новых коллективных переменных принимает вид:

$$\mathcal{Z} = \mathrm{const} \times \int \mathcal{D}\,(\vec{N}_p, \vec{N}_{-p}) \exp\, S_{\text{eff}}\,,$$

$$S_{\text{eff}} \,=\, -\frac{1}{\mathcal{U}_d} \sum_p \vec{N}_p \cdot \vec{N}_{-p} \,+\, \log \mathrm{Det}\, \frac{\widehat{M}(\vec{N})}{\widehat{M}(0)}, \qquad (2.12)$$

где Det означает регуляризованный детерминант оператора, задаваемого в p-представлении бесконечномерной матрицей

$$\widehat{M}(\vec{N}) \,=$$
$$= \begin{pmatrix} \delta_{p_1,p_2}(ip_0 + \varepsilon(\vec{p})) & (2\sqrt{\beta N})^{-1}\,(N_x + iN_y)_{(p_{1\pi}-p_2)} \\ (2\sqrt{\beta N})^{-1}\,(N_x - iN_y)_{(p_{1\pi}-p_2)} & \delta_{p_1,p_2}(ip_0 + \varepsilon(\vec{p})) \end{pmatrix}.$$

Дальнейшее изучение $\mathcal{Z}$ использует приближение стационарной фазы для функциональных интегралов. Например, оценим критическую температуру перехода из условия $\delta S_{\text{eff}}/\delta\Delta \,=\, 0$. Подставляя $\vec{N}_p \,=\, \sqrt{\beta N}\;\vec{\Delta}\,\delta_{p,0}$ в S_{eff} и полагая $|\Delta| = 0$ на линии фазового перехода приходим к уравнению

$$1 = \frac{\mathcal{U}_d}{4tN} {\sum_{\vec{p}}}' \frac{\tanh\,(\beta_c t(\cos p_1 + \cos p_2)/4)}{\cos p_1 + \cos p_2}. \qquad (2.13)$$

Используем для $\tanh(ax)/x$ представление интегралом Фурье и получим из (2.13) уравнение

$$\int\limits_0^\infty \mathrm{d}s\, J_0^2(s) \log\left(\mathrm{cotanh}\frac{\pi}{\beta t} s\right) = \frac{2\pi t}{\mathcal{U}_d}, \qquad (2.14)$$

где $J_0(s)$ – функция Бесселя. Далее, используя

$$\int\limits_0^R \mathrm{d}s\, J_0^2(s) = \frac{1}{\pi}\log(Rb), \quad b = 8\gamma, \quad R \gg 1$$

($\log\gamma = C$ – постоянная Эйлера), с логарифмической точностью получаем:

$$\frac{1}{\pi}\log\left(\frac{\beta t}{\pi}\right)\log\left(\frac{\beta t}{\pi}b\right) - \frac{1}{2\pi}\log^2\left(\frac{\beta t}{\pi}\right) = \frac{2\pi t}{\mathcal{U}_d}$$

и, следовательно,

$$T_c \sim t\,\exp\left(-2\pi\sqrt{\frac{t}{\mathcal{U}_d}}\right).$$

§3. Спектры коллективных мод

Бозе–спектр вычислим в двух случаях.

1. Область Гинзбурга–Ландау $|T - T_c| \ll T_c$, где можно разложить log Det в (2.12) по степеням N_x, N_y. Обозначив $\widehat{M}^{-1}(0) = \widehat{H}$, $\widehat{M}(\vec{N}) = \widehat{H}^{-1} + \widehat{N}$ и используя определение $\log\mathrm{Det}\,\mathrm{A} = \mathrm{Tr}\log\mathrm{A}$, будем иметь:

$$\log\,\mathrm{Det}\,\frac{\widehat{M}(\vec{N})}{\widehat{M}(0)} = -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2n}\mathrm{Tr}\,(\widehat{H}\,\widehat{N})^{2n} \qquad (3.1)$$

(только четные степени разложения дают вклад в Tr log). Ограничившись в (3.1) первыми двумя членами, получим

$$S_{\text{eff}} \simeq -\sum_p A_p\,\vec{N}_p\cdot\vec{N}_{-p} - \\ -\frac{g}{32\beta N}\sum_{p_1+p_3=p_2+p_4}\left(\vec{N}_{p_1}\cdot\vec{N}_{-p_2}\right)\left(\vec{N}_{p_3}\cdot\vec{N}_{-p_4}\right), \qquad (3.2)$$

где

$$A_p = \frac{1}{\mathcal{U}_d} + (4\beta N)^{-1}{\sum_k}'\,(ik_0 - \varepsilon_0)^{-1}\,(ip_0 + ik_0 + \varepsilon_1)^{-1}, \qquad (3.3)$$

$$g = (\beta N)^{-1}\sum_k\left(k_0^2 + \varepsilon_0^2\right)^{-2} \simeq \frac{7\,\zeta(3)}{4\,\pi^4\,t\,T_c^2}\,\log\frac{t}{T_c}, \qquad (3.4)$$

$\varepsilon_0 \equiv \varepsilon(\vec{k})$, $\varepsilon_1 \equiv \varepsilon(\vec{p} + \vec{k})$ и критическая температура задается (2.13), что равносильно $A_0 = 0$.

Если $T > T_c$, то спектр определяется из условия обращения в нуль коэффициента при квадратичном члене в (3.2), которое запишем в виде

$$A_0 + (A_p - A_0) = 0. \qquad (3.5)$$

Для A_0 с логарифмической точностью получаем

$$A_0 \simeq \frac{1}{2\pi^2 t} \frac{T - T_c}{T_c} \log \frac{t}{T_c} . \tag{3.6}$$

Вычисление $A_p - A_0$ с помощью (2.13) и (3.3) при малых $p_0, \vec{p}$ дает:

$$A_p - A_0 \simeq \frac{|p_0|}{8 \pi t T_c} \log \frac{t}{|p_0|} + \frac{7 \zeta(3) t}{32 \pi^4 T_c^2} |p|^2. \tag{3.7}$$

Подставив выражения (3.6), (3.7) в (3.5), приходим к уравнению для спектра в котором следует сделать аналитическое продолжение по частоте. Если выполнены условия

$$T_c/t \ll |p_0|/t \ll |T - T_c|/T_c \ll 1 , \qquad \log \frac{t}{|p_0|} \simeq \log \frac{t}{T_c} , \tag{3.8}$$

то решение имеет вид

$$E(\vec{p}) = - i \frac{7\zeta(3)}{2 \pi^3 T_c} c_{\scriptscriptstyle B}^2 |p|^2 - i \frac{4}{\pi} (T - T_c) , \tag{3.9}$$

где

$$c_{\scriptscriptstyle B}^2 = \frac{t^2}{4 \pi} \left(\frac{\mathcal{U}_d}{t} \right)^{1/2} . \tag{3.10}$$

Полученный спектр (3.9) изображается точкой на нефизическом листе плоскости энергии, что говорит о затухающем характере коллективных возбуждений.

При $T < T_c$ модель допускает бозе–конденсацию. Плотность конденсата можно найти из условия максимума для S_{eff}, положив в (3.2) $N_{x,p} = (\beta N)^{1/2} \Delta \delta_{p0}$, $N_{y,p} = 0$:

$$\Delta^2 = - \frac{16}{g} A_0 = \frac{32\pi^2}{7\zeta(3)} T_c (T_c - T) . \tag{3.11}$$

Отделив затем конденсат преобразованием сдвига

$$N_{x,p} \longrightarrow N_{x,p} + (\beta N)^{1/2} \Delta \, \delta_{p0}, \quad N_{y,p} \longrightarrow N_{y,p} , \tag{3.12}$$

снова рассмотрим квадратичную форму

$$- \sum_p \left(A_p + (3g/16) \Delta^2 \right) N_{x,p} N_{x,-p} -$$

$$- \sum_p \left(A_p + (g/16) \Delta^2 \right) N_{y,p} N_{y,-p} ,$$

и приравняем ее коэффициенты нулю. В результате, с помощью (3.6), (3.7), (3.8) и (3.11) получим следующие ветви спектра:

$$E(\vec{p}) \,=\, -\,i\frac{7\zeta(3)}{2\,\pi^3\,T_c}\,c_{_B}^2\,|p|^2\,-\,i\frac{8}{\pi}(T_c-T)\,,$$
$$E(\vec{p}) \,=\, -\,i\frac{7\zeta(3)}{2\,\pi^3\,T_c}\,c_{_B}^2\,|p|^2\,. \tag{3.13}$$

Заметим, что соотношения (3.9), (3.13) получились такими же, как для бозе–спектра неидеального ферми–газа в области Гинзбурга–Ландау [18, 19]. Условия (3.8) не выполняются, если $|T-T_c|$ достаточно мало, но и в этом случае можно получить соответствующие формулы [14].

2. Случай $T \ll T_c$. Здесь, после подстановки $N_{x,p} = (\beta N)^{1/2}\Delta\delta_{p0}$, $N_{y,p}\,=\,0$, условие максимума для S_{eff} (2.12) дает при нулевой температуре плотность конденсата Δ в виде $\Delta/2\,=\,(\pi/\gamma)T_c$. Для получения спектра сделаем в действии (2.12) сдвиг (3.12), а затем выделим квадратичную форму:

$$-\frac{1}{\mathcal{U}_d}\sum_p \vec{N}_p\cdot\vec{N}_{-p}-(4\beta N)^{-1}\sum_p\sum_k \Pi(p,k)\times$$
$$\times\left((ik_0-\varepsilon_0)(i\omega_1+\varepsilon_1)\vec{N}_p\cdot\vec{N}_{-p}+\mathcal{D}^2\left(N_{x,p}N_{x,-p}-N_{y,p}N_{y,-p}\right)\right), \tag{3.14}$$

где приняты следующие обозначения:

$$\Pi(p,k) = (k_0^2+\varepsilon_0^2+\mathcal{D}^2)^{-1}(\omega_1^2+\varepsilon_1^2+\mathcal{D}^2)^{-1},$$

$\omega_1 = k_0 + p_0$, $\mathcal{D} = \Delta/2$ а ε_0, ε_1 использованы как и в (3.3), (3.4).

Спектр, соответствующий переменным $N_{x,p}$, $N_{y,p}$, находится из уравнений

$$\frac{1}{\mathcal{U}_d}+(4\beta N)^{-1}\sum_k \Pi(p,k)\left[(ik_0-\varepsilon_0)(i\omega_1+\varepsilon_1)+\mathcal{D}^2\right]=0, \tag{3.15}$$
$$\frac{1}{\mathcal{U}_d}+(4\beta N)^{-1}\sum_k \Pi(p,k)\left[(ik_0-\varepsilon_0)(i\omega_1+\varepsilon_1)-\mathcal{D}^2\right]=0. \tag{3.16}$$

Легко проверить, что уравнение (3.16), соответствующее переменной $N_{y,p}$, имеет решение при $p = 0$ и описывает голдстоуновскую ветвь спектра. В пределе $T \to 0$ сумма по k_0 в (3.15), (3.16) превращается в соответствующий интеграл. Используя подстановку

$$\Pi(p,k) = \int\limits_0^1 \mathrm{d}\alpha \left[\alpha(k_0^2+\varepsilon_0^2+\mathcal{D}^2) + (1-\alpha)(\omega_1^2+\varepsilon_1^2+\mathcal{D}^2)\right]^{-2}$$

и выполняя замену переменной k_0 так, что $\alpha k_0^2 + (1-\alpha)(k_0+p_0)^2 \to k_0^2 + \alpha(1-\alpha)p_0^2$, можно взять интеграл по k_0 в (3.16) и придти к соотношению

$$\sum_{\vec{k}} \int\limits_0^1 \mathrm{d}\alpha \Big(\left((\xi+\eta)^2+\mathcal{D}^2\right)^{-1/2} - \\ - \left(\alpha(1-\alpha)p_0^2 + \xi^2 + \eta^2 + 2(2\alpha-1)\xi\eta + \mathcal{D}^2\right)^{-1/2} + \\ + \frac{1}{2}\frac{2\alpha(1-\alpha)p_0^2 + 2\eta^2 + 2(2\alpha-1)\xi\eta}{(\alpha(1-\alpha)p_0^2 + \xi^2 + \eta^2 + 2(2\alpha-1)\xi\eta + \mathcal{D}^2)^{3/2}}\Big) = 0, \tag{3.17}$$

где новые параметры ξ, η введены посредством $\xi+\eta=\varepsilon_0$ и $\xi-\eta=\varepsilon_1$. В новых обозначениях $\alpha\varepsilon_0^2 + (1-\alpha)\varepsilon_1^2$ превращается в $\xi^2+\eta^2+2(2\alpha-1)\xi\eta$. Разложим далее подынтегральную функцию в (3.17) по степеням p_0, η и возьмем интегралы по α. Тогда, ограничившись членами по p_0, η не выше общей второй степени и заменяя $ip_0 \to E$, получим

$$E^2 \sum_{\vec{k}} (\xi^2+\mathcal{D}^2)^{-3/2} = 4\sum_{\vec{k}} \eta^2(\xi^2+\mathcal{D}^2)^{-3/2},$$

откуда, с логарифмической точностью, $E(\vec{p}) = c_{\scriptscriptstyle B}|p|$ ($c_{\scriptscriptstyle B}$ есть скорость боголюбовского звука (3.10) и при оценивании сумм по $\vec{k}$ использовано Приложение). Отметим, что поправка к линейному закону оказывается анизотропной и положительной [14], что означает стабильность коллективного возбуждения по отношению к распаду на возбуждения того же типа. Вторая (неголдстоуновская) ветвь спектра определяется (3.15). Не повторяя только что проделанную процедуру, сразу напишем ответ: $E(0) = 2\mathcal{D} = \Delta$. Поправка для малых $\vec{p}$ может быть вычислена и дает точку на нефизическом листе [14].

Итак, получены все ветви спектра коллективных возбуждений в двумерном хаббардовском антиферромагнетике как в области

Гинзбурга–Ландау, так и в пределе низких температур. Отметим, что только голдстоуновская ветвь при низких температурах получилась чисто вещественной.

§4. Заключение.

В настоящей работе функциональный интеграл, как средство исследования коллективных спектров в задачах физики конденсированного состояния [18, 19], применяется к антиферромагнитной фазе трехзонной двумерной модели Хаббарда с отталкиванием. Используя интегрирование по "быстрым" и "медленным" функциональным переменным, мы сводим рассматриваемую модель с заполнением одна квазичастица на элементарную ячейку к однозонной модели Хаббарда с полузаполненной зоной. Последующий переход в функциональном интеграле к бозе–полям, соответствующим новым коллективным степеням свободы ниже точки фазового перехода (преобразование Хаббарда–Стратоновича), позволяет построить эффективное действие и с его помощью определить температуру перехода T_c, параметр порядка при $T < T_c$ и получить спектр коллективных возбуждений. Этот спектр состоит из одной ветви при $T > T_c$ и двух при $T < T_c$. В области Гинзбурга–Ландау $|T - T_c| \ll T_c$ обе ветви спектра чисто мнимые. При низких температурах одна из них становится вещественной при малых импульсах и, в силу линейности, имеет характер боголюбовского звука. Вторая ветвь спектра – неголдстоуновская, т.к. имеет щель при нулевом импульсе. Полученный спектр может быть использован при сравнении с результатами переходов к слабой связи в других подходах, связанных с построением эффективного действия для антиферромагнитно упорядоченной модели Хаббарда методом функционального интегрирования.

Благодарности

Данная работа была частично поддержана грантом Международного научного фонда и Правительства Российской Федерации No. R4T300 и грантами Российского фонда фундаментальных исследований No. 94–02–03712 и No. 96– 01–00807.

Приложение.

Используя равенство

$$f\left(\varepsilon^{-1}(\cos k_1+\cos k_2)\right)= \\ =\frac{\varepsilon}{2\pi}\int dx f(x)\int dy \exp iy(\varepsilon x-\cos k_1-\cos k_2),$$

получим интересующие нас асимптотические формулы [14]

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} f\left(\varepsilon^{-1}(\cos k_1+\cos k_2)\right)\simeq\frac{\varepsilon}{\pi^2}\int \mathrm{d}x f(x)\log\frac{8}{|\varepsilon x|},$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}(p_1\sin k_1+p_2\sin k_2)^2 f\left(\varepsilon^{-1}(\cos k_1+\cos k_2)\right)\simeq \\ \simeq\frac{2\varepsilon|p|^2}{\pi^2}\int dx f(x),\quad \varepsilon\ll 1.$$

Литература

1. Ю. А. Изюмов, — УФН **161**, № 11 (1991), 1–46.
2. M. W. Long, — Int. J. Mod. Phys. **5 B** no. 6&7 (1991), 865–883.
3. H. Shimahara, S. Takada, — J. Phys. Soc. Jap. **57** no. 3 (1988), 1044–1055.
4. В. С. Бабиченко, Ю. Каган, — Письма в ЖЭТФ **56**, № 5/6 (1992), 305–310.
5. N. M. Plakida, P. Horsch, A. Liechtenstein, V. S. Oudovenko, *Superconducting Pairing of Spin Polarons in the t–J Model.* Preprint ICTP IC/95/157, Trieste (1995).
6. D. K. Ghosh, — Phys. Rev. Lett. **27** no. 23 (1971), 1584–1586.
7. P. Wróbel, T. K. Kopéc, — Int. J. Mod. Phys. **3 B** no. 11 (1989), 1681–1690.
8. J. E. Hirsch, S. Tang, — Phys. Rev. Lett. **62** no. 5 (1989), 591–594.
9. G. Dopf, A. Muramatsu, W. Hanke, — Europhys. Lett. **17** no. 6 (1992), 559–564.
10. V. N. Popov, — Phys. Lett. **161 A** no. 4 (1992), 387–391.
11. C. Malyshev, V. N. Popov, — Phys. Lett. **175 A** no. 1 (1993), 69–75.
12. V. N. Popov, *Magnetic and Superconductive States in the Repulsive Hubbard Model.* Preprint ESI 31, Vienna (1993).
13. К. Л. Малышев, В. Н. Попов, — ТМФ **105**, № 1 (1995), 149–162.
14. В. Н. Попов, П. А. Севастьянов, *Коллективные возбуждения в ферро- и антиферромагнитных состояниях двумерной модели Хаббарда с отталкиванием.* — Зап. научн. семин. ПОМИ **209** (1994), 229–259.
15. В. Н. Попов, П. А. Севастьянов, — ТМФ **102**, № 3 (1995), 457–462.
16. И. Е. Дзялошинский, В. М. Яковенко, — ЖЭТФ **94**, № 4 (1988), 344–355.
17. A. N. Kozlov, L. A. Maksimov, A. F. Barabanov, — Physica **200 C** (1992), 183–188.

18. В. Н. Попов, *Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике.* М., "Атомиздат", 1976.
19. V. N. Popov, *Functional Integrals and Collective Excitations.* Cambridge University Press, Cambridge etc., 1987, 1990.
20. Z. Y. Weng, C. S. Ting, T. K. Lee, — Phys. Rev. **43 B** no. 4–B (1991), 3790–3793.
21. H. J. Schulz, — Phys. Rev. Lett. **65** no. 19 (1990), 2462–2465.
22. В. С. Капитонов, П. А. Севастьянов, — ТМФ **107**, № 2 (1996), 269–287.
23. V. J. Emery, — Phys. Rev. Lett. **58** (1987), 2794–2797.
24. Ф. А. Березин, *Метод вторичного квантования.* М., "Наука", 1986.

Kapitonov V. S., Malyshev C. L., Popov V. N., Sevastianov P. A. The effective action and the collective modes spectrum in the antiferromagnetic phase of the three–band repulsive Hubbard model.

The paper is concerned with the application of path integration (successive integration over "fast" and "slow" variables and the Hubbard–Stratonovich transformation) to the antiferromagnetic state in the three-band two dimensional repulsive Hubbard model. It is shown that the model under consideration is equivalent in the lowest approximation to the half–filled single–band Hubbard model. The effective action for the collective Bose-fields, the critical temperature of the phase transition and the exitations spectra are obtained.

С.-Петербургское отделение
Математического института
им.В. А. Стеклова РАН

С.-Петербургский государственный
Технологический Институт

Поступило 3 марта 1996 г.