

# ЭВОЛЮЦИЯ ФЕРМИ-ПОВЕРХНОСТИ КУПРАТОВ НА ОСНОВЕ СПИН-ПОЛЯРОННОГО ПОДХОДА

А. Ф. Барабанов\*, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев, А. М. Белемук

*Институт физики высоких давлений Российской академии наук  
142190, Троицк, Московская обл., Россия*

Р. Хайн\*\*

*Institute for Solid State and Materials Research (IFW)  
P.O. Box 270016, D-01171 Dresden, Germany*

Поступила в редакцию 3 ноября 2000 г.

Предложен спин-поляронный подход к описанию эволюции ферми-поверхности (ФП) и электронной структуры купратов в зависимости от допирования на основе спин-фермионной модели. Для учета сложной внутренней структуры спинового полярона вводится суперпозиция спин-поляронных состояний с различными радиусами, допирование эффективно описывается фрустрацией в спиновом гамильтониане. Вычисления спектра полярона, спектрального веса голых носителей и ферми-поверхности показывают радикальные изменения электронной структуры при увеличении допирования. Полученные результаты позволяют в рамках единого подхода описать такие данные экспериментов по фотоэмиссии, как изотропное дно зоны и остаточную ферми-поверхность у недопированных соединений, большую ферми-поверхность и протяженную седловую особенность в оптимально допированных соединениях, псевдощель при промежуточном допировании и ряд других.

PACS: 75.50.Ee, 74.20.Mn, 71.38.+i, 75.30.Mb

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время интенсивно изучаются вопросы, связанные с топологией и эволюцией ферми-поверхности (ФП) при дырочном допировании в высокотемпературных сверхпроводниках. Последние исследования по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES) указывают на отличие спектров оптимально допированных купратов от спектров купратов-изоляторов. Экспериментальные данные по недопированным соединениям [1, 2] указывают на изотропное дно зоны около точки  $(\pi/2, \pi/2)$  в импульсном пространстве, большую разность в энергиях между точками  $N = (\pi/2, \pi/2)$  и  $X = (\pi, 0)$  и так называемую остаточную (remnant) ФП (поверхность, на которой происходит резкое падение одночастичного спектрального веса) [3]. В оптимально допированных купратах обнаружены [4–10] область плоской зоны, большая ФП с центром в точ-

ке  $M = (\pi, \pi)$  и так называемая теневая (shadow) ФП, возникающая вследствие антиферромагнитных спиновых корреляций [11]. Область плоской зоны имеет форму протяженной седловой точки в направлении  $(\pi/2, 0) - (\pi, 0)$ . Теневая ФП напоминает основную ФП, но смещенную на антиферромагнитный вектор  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . Кроме того, при промежуточном допировании наблюдается высокоэнергетическая псевдощель около точки  $X$  с энергией порядка 0.1–0.2 эВ [2, 12–14]. В рамках модели жесткой зоны изотропный минимум спектра недопированных соединений должен при увеличении допирования трансформироваться в небольшие дырочные карманы около точки  $N$ . Однако экспериментальные данные указывают на отсутствие таких карманов [14] и, по-видимому, ФП при оптимальном и промежуточном допировании имеет дугообразный вид [15]. Разрешить такое очевидное противоречие можно, только рассматривая эволюцию спектральной плотности при допировании.

Имеется много работ, посвященных анализу

\*E-mail: abarab@ns.hppi.troitsk.ru

\*\*R. Hayn.

дырочного спектра двумерного ( $2D$ ) допированного антиферромагнетика в рамках различных теоретических моделей, таких как обобщенная  $t$ - $J$ -модель, эффективная трехзонная модель, модель кондо-решетки, модель Хаббарда. Большинство этих работ основано на точной диагонализации малых кластеров [16, 17], на использовании квантового метода Монте-Карло [18], самосогласованного борновского приближения (SCBA) [19–22], «струнном» анзаце для дырочной волновой функции [23] или диаграммных методах, использующих полуфеноменологическую спиновую восприимчивость [24]. Анализ обычно проводится либо на основе двух-подрешеточного (неелевского типа) состояния спиновой подсистемы [19, 20, 23, 25], либо исходя из сферически-симметричного состояния спиновой жидкости [26, 27]. При этом получают качественно похожие результаты: движение дырки происходит в основном по одной из подрешеток, т.е. доминирующую роль в образовании спектра играют эффективные прыжки на вторые ближайшие соседи, и спектр имеет минимум в точке  $N$  при малом допировании.

Однако насчитывается относительно мало теоретических работ, посвященных вопросу эволюционирования ФП в зависимости от допирования и фрустрации спиновой подсистемы, т.е. антиферромагнитного обменного взаимодействия между ближайшими ( $J_1$ ) и следующими ближайшими соседями ( $J_2$ ). Исследования фрустрированной обобщенной  $t$ - $J$ -модели [26] и фрустрированной эффективной трехзонной модели [27] показывают сильную зависимость спин-поляронного спектра от фрустрации. Отметим, что работы [26, 27] были выполнены только для локального полярона (ниже мы обсудим недостатки этого приближения), проведенные в них расчеты не дают спектрального веса голой дырки и представляют только некие гипотетические ФП. Сравнительно недавно исследовалась [28] фрустрированная  $t$ - $t'$ - $t''$ - $J_1$ - $J_2$ -модель в рамках самосогласованного борновского приближения, где дырки рассматривались как бесспиновые фермионы, а спины — как нормальные бозоны [20]. Формализм SCBA в [28] соответствует двухподрешеточному приближению, что накладывает на спектр условие симметрии по отношению к приведенной магнитной зоне Бриллюэна (это означает, что точки  $\Gamma$  и  $M$  эквивалентны). Однако такая симметрия дырочного спектра не наблюдается в ARPES-данных.

Что касается расчета квазичастичных зон, основанных на точной диагонализации кластеров, содержащих 16–20 узлов [28–31], то здесь следует заме-

нить, что для допированного случая довольно трудно реконструировать ФП и исследовать влияние достаточно малых изменений допирования вследствие ограниченного числа  $\mathbf{k}$ -точек. В результате в ряде таких вычислений наименьшее значение квазичастичной энергии соответствует точке  $X$  (а не точке  $M$ ) [31] или же рассматриваемый диэлектрик не обнаруживает присутствия остаточной ФП [29]. По-видимому, ограниченный размер кластеров не позволяет описывать спин-поляронные состояния с радиусом более двух постоянных решетки.

В настоящей статье будет показано, что многие ARPES-результаты в широком интервале допирования можно объяснить в рамках спин-поляронного подхода, если принять во внимание сложную структуру спинового полярона (суперпозицию спин-поляронных состояний различных радиусов [32]) и фрустрацию в спиновой подсистеме. Мы исследуем эту проблему с помощью эффективной трехзонной модели (спин-фермионная модель) [33, 34], которая явно учитывает прямые кислород-кислородные перескоки в  $\text{CuO}_2$ -плоскости купратов.

Отличительной чертой нашего исследования является рассмотрение спинового полярона как сложной квазичастицы: когерентной суперпозиции локального полярона (голая дырка, образующая синглет Занга—Райса вокруг иона  $\text{Cu}^{2+}$ ) и антиферромагнитного полярона большого радиуса. Последний представляет собой локальный полярон, спаренный со спиновой волной с квазиимпульсом  $\mathbf{q}$ , близким к  $\mathbf{Q}$ . Оказывается, что введение такого базиса операторов спинового полярона описывает расщепление нижней зоны локального полярона [32] (это позволяет, например, воспроизвести резкое падение интенсивности ARPES-пиков при движении по  $\mathbf{k}$  из точки  $N$  в точку  $M$ ).

Мы используем проекционный метод для гриновских функций базисных операторов, который в некотором смысле является приближением среднего поля. В корректности метода можно убедиться путем сравнения результатов при  $T = 0$  [35] со спектральной функцией голой дырки  $A_h(\mathbf{k}, \omega)$ , получаемой в рамках SCBA для локального спинового полярона [36]. Можно увидеть, что получаемый в рамках SCBA квазичастичный пик и его интенсивность хорошо воспроизводятся нижней зоной сложного полярона в приближении проекционного метода. Что касается верхних зон, соответствующих возбужденным состояниям, то они эффективно описывают некогерентную часть  $A_h(\mathbf{k}, \omega)$ .

Остановимся на принятом нами подходе при

описании спиновой подсистемы. Типичное поведение магнитной  $2D$ -подсистемы соответствует недопированным  $\text{CuO}_2$ -плоскостям в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Такая система хорошо описывается антиферромагнитной  $2D$ -моделью Гейзенберга ( $S = 1/2$ ) со взаимодействием между ближайшими спинами на квадратной решетке. Антиферромагнитное обменное взаимодействие между первыми ближайшими соседями (спинами ионов  $\text{Cu}^{2+}$  в некоторой  $\text{CuO}_2$ -плоскости) очень велико (порядка  $0.13 \text{ эВ} \approx 1500 \text{ К}$  для  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [37]) и значительно больше межплоскостного обмена. Межплоскостной обмен в основном ответствен за дальний порядок, который наблюдается в диэлектрической фазе  $\text{CuO}_2$ -плоскостей (для  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  характерная неелевская температура  $T_N \approx 300 \text{ К}$ ). Однако даже в случае сравнительно слабого допирования системы дырками антиферромагнитный дальний порядок пропадает во всем диапазоне температур. Обычно предполагают, что допирование ведет к антиферромагнитному взаимодействию между вторыми ближайшими соседями в подсистеме  $\text{Cu}^{2+}$  в отдельно взятой плоскости, т. е. к фрустрации [38]. Кластерные расчеты указывают на достаточно большое значение параметра фрустрации  $J_2/J_1 \sim 0.1$  даже для недопированного  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [39].

Ниже будем считать, что именно фрустрация изменяет спектр спинового полярона, и, говоря об эволюции спектра, предполагаем некую качественную эквивалентность между допированием и фрустрацией в спиновой подсистеме.

Отметим, что полной эквивалентности между допированием и фрустрацией нет. Например, допированная  $t$ - $J$ -модель и фрустрированная  $J_1$ - $J_2$ -модель дают различные результаты для динамического спин-спинового структурного фактора для спектра рамановского рассеяния [40]. Тем не менее хорошо известно, что как допирование, так и фрустрация ведут к уменьшению магнитной корреляционной длины. Более того, численные расчеты на конечной решетке указывают на эквивалентность этих моделей, если мы интересуемся статическими спин-спиновыми корреляционными функциями [41]. Ниже будет видно, что спектр элементарных возбуждений в нашем подходе определяется именно статическими спин-спиновыми корреляционными функциями.

Существенной является принятая нами трактовка спиновой подсистемы в рамках сферически-симметричной теории. Часто движение локального полярона изучается в рамках двухподрешеточного приближения для спиновой подложки,

что может приводить к периодичности спектра относительно магнитной зоны Бриллюэна [42-44]. Однако ARPES-эксперименты указывают на отсутствие такой периодичности — спектр оказывается периодичным по отношению ко всей зоне Бриллюэна  $\text{CuO}_2$ -плоскости. В сферически-симметричном приближении именно последняя симметрия сохраняется как в функциях Грина спиновых возбуждений, так и для спектра носителей.

## 2. ГАМИЛЬТониан И МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЙ

Основные свойства движения дырки в плоскости  $\text{CuO}_2$  описываются следующей моделью [33, 34]:

$$\hat{H} = \hat{\tau} + \hat{J} + \hat{h}, \quad (1)$$

$$\hat{\tau} = 4\tau \sum_{\mathbf{R}} p_{\mathbf{R}}^{\dagger} \left( \frac{1}{2} + \tilde{S}_{\mathbf{R}} \right) p_{\mathbf{R}}, \quad (2)$$

$$\hat{J} = \frac{J_1}{2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{g}} \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}+\mathbf{g}} + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}} \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}+\mathbf{d}}, \quad (3)$$

где

$$p_{\mathbf{R}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{a}} c_{\mathbf{R}+\mathbf{a}}, \quad \tilde{S}_{\mathbf{R}} \equiv S_{\mathbf{R}}^{\alpha} \hat{\sigma}^{\alpha}, \quad (4)$$

$$\{p_{\mathbf{R}}, p_{\mathbf{R}'}^{\dagger}\} = \delta_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{g}} \delta_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'+\mathbf{g}},$$

$J_1, J_2 > 0$  — антиферромагнитные взаимодействия между первыми ближайшими соседями ( $\mathbf{g} = \pm \mathbf{g}_x, \pm \mathbf{g}_y$ ) и вторыми ближайшими соседями ( $\mathbf{d} = \pm \mathbf{g}_x \pm \mathbf{g}_y$ ) на квадратной решетке. Прямые кислород-кислородные перескоки описываются слагаемым

$$\hat{h} = -h \sum_{\mathbf{R}} [c_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_x}^{\dagger} (c_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_y} + c_{\mathbf{R}-\mathbf{a}_y} + c_{\mathbf{R}+\mathbf{g}_x+\mathbf{a}_y} + c_{\mathbf{R}+\mathbf{g}_x-\mathbf{a}_y}) + \text{H.c.}], \quad (5)$$

$\mathbf{a}_{x,y} = \mathbf{g}_{x,y}/2$ . Здесь и далее по повторяющимся индексам подразумевается суммирование;  $\{\dots, \dots\}$  и  $[\dots, \dots]$  означают соответственно антикоммутатор и коммутатор;  $\mathbf{g}_{x,y}$  — базисные векторы квадратной решетки меди ( $|\mathbf{g}| \equiv 1$ ),  $\mathbf{R} + \mathbf{a}$  — четыре вектора узлов кислорода  $\text{O}$  вблизи иона  $\text{Cu}$  в узле  $\mathbf{R}$ ;  $c_{\mathbf{R}+\mathbf{a}}^{\dagger}$  — оператор рождения дырки на узле  $\text{O}$  (для упрощения обозначений спиновые индексы опущены);  $\hat{\sigma}^{\alpha}$  — матрицы Паули;  $\mathbf{S}$  — оператор локализованного спина на узле меди. Мы не вводим явные относительные фазы  $p$ - и  $d$ -орбиталей, поскольку

их можно восстановить, переопределив операторы рождения и уничтожения умножением на фазовый множитель  $\exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R})$ . В конце вычислений мы восстановим эти фазы, сделав замену  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{Q}$ . Амплитуда прыжков кислородных дырок,  $\tau$ , связывает движение дырки со спиновой подсистемой меди. Параметры  $J_1$  и  $J_2$  выражаются через параметр фрустрации  $p$ :

$$\begin{aligned} J_1 &= (1-p)J, & J_2 &= pJ, \\ 0 \leq p &\leq 1, & J &> 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Параметр фрустрации  $p$  можно считать аналогом числа дырок  $x$  на атом меди. Оценка, основанная на однозонной модели Хаббарда при  $U/t \sim 5$ , дает значение  $p \sim 0.1$  для  $x = 0.1$ . Отметим, что для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  спиновая подсистема плоскости  $\text{CuO}_2$  теряет дальний порядок при  $x > 0.02$ .

Принятый нами эффективный спин-фермионный гамильтониан (1) получается в результате канонического преобразования из модели Эмери [45] при  $U_d \gg t \gg \varepsilon$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_p - \varepsilon_d > 0$ ,  $U_d$  — кулоновское одноузельное отталкивание на узлах меди. Что касается значений набора параметров энергии  $\varepsilon$ ,  $t$ ,  $U_d$  в модели Эмери, то их можно получить либо из зонных вычислений, либо из кластерных расчетов. Приведем два характерных набора:  $\varepsilon = \varepsilon_p - \varepsilon_d = 3.6$  эВ,  $t = 1.3$  эВ,  $U_d = 10.5$  эВ [46] и  $\varepsilon = 2.0$  эВ,  $t = 1.0$  эВ,  $U_d = 8.0$  эВ [47, 48]. Учитывая, что  $\tau \sim t^2/\varepsilon$ ,  $J \sim 4\tau(t/\varepsilon)^2$ , мы выбираем значения параметров  $\tau \approx 0.4$  эВ,  $J = 0.4\tau$  и  $h = 0.4\tau$ . Ниже величина  $\tau$  положена равной единице. Подсистема меди рассматривается в состоянии спиновой жидкости, которое обладает сферической симметрией в спиновом пространстве. В частности, спин-спиновые корреляционные функции удовлетворяют соотношению

$$C_{\mathbf{r}} \equiv \langle S_{\mathbf{R}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}+\mathbf{r}}^{\alpha} \rangle = 3 \langle S_{\mathbf{R}}^{x(y,z)} S_{\mathbf{R}+\mathbf{r}}^{x(y,z)} \rangle, \quad \langle S_{\mathbf{R}}^{\alpha} \rangle = 0.$$

Рассматривая спиновый полярон проекционным методом, мы вводим конечный набор базисных операторов для каждой ячейки  $\mathbf{R}$ :  $A_{\mathbf{R},i}^+$  (со спином  $\sigma$ ), где  $i$  — номер оператора,  $i \leq n$ . Набор включает в себя оператор рождения дырки (со спином  $\sigma$ ) и другие операторы, описывающие дырку на фоне спиновых возбуждений. Конкретный выбор операторов набора диктуется физическим смыслом задачи и будет объяснен ниже. Для вычисления спектральной функции голой дырки учитывается сумма вкладов от двух операторов,  $c_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_x}^+$  и  $c_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_y}^+$ , которые описывают два возможных положения кислородной дырки в элементарной ячейке.

Как обычно, вводим запаздывающие двухвременные функции Грина  $G_{ij}(t, \mathbf{k})$  для фурье-компонент  $A_{\mathbf{k},i}$  операторов  $A_{\mathbf{R},i}$ :

$$\begin{aligned} G_{ij}(t, \mathbf{k}) &\equiv \langle A_{\mathbf{k},i}(t) | A_{\mathbf{k},j}^+(0) \rangle = \\ &= -i\theta(t) \langle \{ A_{\mathbf{k},i}(t), A_{\mathbf{k},j}^+(0) \} \rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

$$A_{\mathbf{k},j} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} A_{\mathbf{R},j} \quad i, j = 1, \dots, n.$$

Уравнение движения фурье-компонент гриновских функций имеет вид

$$\begin{aligned} \omega \langle A_{\mathbf{k},i} | A_{\mathbf{k},j}^+ \rangle_{\omega} &= K_{i,j} + \langle B_{\mathbf{k},i} | A_{\mathbf{k},j}^+ \rangle_{\omega}, \\ K_{i,j}(\mathbf{k}) &= \langle \{ A_{\mathbf{k},i}, A_{\mathbf{k},j}^+ \} \rangle, \quad B_{\mathbf{k},i} = [A_{\mathbf{k},i}, H]. \end{aligned} \quad (8)$$

В проекционном методе новые операторы  $B_{\mathbf{k},i}$  аппроксимируются проекциями на пространство  $\{A_{\mathbf{k},i}\}$  базисных операторов:

$$\begin{aligned} B_{\mathbf{k},i} &\approx \sum_l L_{i,l}(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k},l}, \quad L(\mathbf{k}) = D(\mathbf{k}) K^{-1}, \\ D_{ij}(\mathbf{k}) &= \langle \{ B_{\mathbf{k},i}, A_{\mathbf{k},j}^+ \} \rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

После подстановки приближенных выражений (9) для операторов  $B_{\mathbf{k},i}$  в уравнение движения (8) система уравнений для гриновских функций  $\langle A_{\mathbf{k},i} | A_{\mathbf{k},j}^+ \rangle_{\omega}$  становится замкнутой, и ее можно представить в матричной форме:

$$(\omega E - DK^{-1})G = K, \quad (10)$$

где  $E$  — единичная матрица.

Спектр квазичастиц  $\varepsilon(\mathbf{k})$  определяется полюсами функции Грина  $G$  и находится из уравнения

$$\det |K\varepsilon(\mathbf{k}) - D| = 0.$$

### 3. БАЗИСНЫЕ ОПЕРАТОРЫ И ПРИБЛИЖЕНИЯ

В качестве первых трех базисных операторов выбираются операторы, которые описывают состояния локального спинового полярона:

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{R},1} &= \frac{1}{2}(c_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_x} + c_{\mathbf{R}-\mathbf{a}_x}), \\ A_{\mathbf{R},2} &= \frac{1}{2}(c_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_y} + c_{\mathbf{R}-\mathbf{a}_y}), \\ A_{\mathbf{R},3} &= \tilde{S}_{\mathbf{R}} p p_{\mathbf{R}}. \end{aligned} \quad (11)$$

Их суперпозиция дает полярон Занга–Райса и состояние голой дырки. В частности,

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k},x} &= \frac{2}{1 + \exp(ik_x)} A_{\mathbf{k},1}, \\ c_{\mathbf{k},y} &= \frac{2}{1 + \exp(ik_y)} A_{\mathbf{k},2}, \\ c_{\mathbf{k},x(y)} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} c_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_x(y)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Спектр элементарных возбуждений в рамках приближения локального полярона исследовался ранее [27]. В частности, было установлено, что фрустрация в спиновой подсистеме и кислород-кислородные прыжки могут объяснить появление протяженной седловой точки в спектре. Однако недостаток приближения локального полярона заключается в том, что спектр элементарных возбуждений оказывается зависящим от спин-спиновых корреляционных функций, отвечающих только ближнему порядку (даже при нулевой температуре  $T = 0$ ). Таким образом, приближение локального полярона не учитывает влияния спинового дальнего порядка на  $\varepsilon(\mathbf{k})$ .

На важное значение фактора когерентности, связанного с наличием дальнего порядка при рассмотрении двумерной периодической кондо-решетки в рамках двухподрешеточной спиновой подсистемы, было указано Шриффером [42]. Простейший гамильтониан этой модели имеет вид

$$\begin{aligned} H_K &= \sum_{\mathbf{R},\mathbf{g}} t_{\mathbf{g}} c_{\mathbf{R}+\mathbf{g}}^{\dagger} c_{\mathbf{R}} + I \sum_{\mathbf{R}} c_{\mathbf{R}}^{\dagger} \tilde{S}_{\mathbf{R}} c_{\mathbf{R}} + \\ &+ \frac{1}{2} J \sum_{\mathbf{R},\mathbf{g}} S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}}^{\alpha}, \end{aligned} \quad (13)$$

где внутриузельное взаимодействие, описываемое константой  $I$ , представляет собой аналог гамильтониана  $\hat{\tau}$  (2) в нашей модели.

В [42] использовалось приближение среднего поля для неелевского состояния при  $T = 0$ , а спины трактовались как классические векторы:

$$S_{\mathbf{R}}^{\alpha} = \delta_{\alpha z} S_0 e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}}, \quad S_0 = \text{const}. \quad (14)$$

В этом приближении гамильтониан кондо-взаимодействия (13) представляет собой потенциальную энергию с удвоенным периодом. В результате такое взаимодействие ведет к гибридизации состояний голой дырки с импульсами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ , и для учета этой гибридизации следует с самого начала выполнить стандартное  $u$ - $v$ -преобразование. В неелевском состоянии амплитуда  $S_{\mathbf{Q}}$  спиновой волны с  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$

( $\mathbf{Q}$ -волна) имеет макроскопически большое значение и обладает свойствами, схожими с амплитудой бозе-частицы с нулевым импульсом в сверхтекучем бозе-газе. Поэтому в ряде задач эта амплитуда может рассматриваться как  $c$ -число. В таком случае гибридизация соответствует спариванию  $\mathbf{Q}$ -волны с локальным электронным состоянием. Но это не дает нового состояния, а означает только смешивание состояний с импульсами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ .

Отличительной чертой настоящего исследования является рассмотрение одночастичного движения по спиновой подложке, находящейся в сферически-симметричном состоянии. На этой подложке среднее значение  $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \rangle = 0$ , и рассмотренное выше приближение неприменимо. При  $T = 0$  и нулевой фрустрации единственная величина, которая может рассматриваться как макроскопическая, — это  $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \rangle$ . В этом случае спаривание локального состояния с  $\mathbf{S}_{\mathbf{Q}}$  соответствует новому делокализованному спин-поляронному состоянию — локальному полюрону (11), «одетому» в антиферромагнитную спиновую волну  $\mathbf{S}_{\mathbf{Q}}$ . В обсуждаемой модели при  $T = 0$  такие состояния были введены в [35] и имеют вид

$$\tilde{Q}_{\mathbf{R}} A_{\mathbf{R},i}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{\mathbf{R}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} \tilde{S}_{\mathbf{Q}}, \quad \tilde{S}_{\mathbf{Q}} = S_{\mathbf{Q}}^{\alpha} \hat{\sigma}^{\alpha}, \\ \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_1} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_1} \mathbf{S}_{\mathbf{R}_1}. \end{aligned} \quad (16)$$

Как показано в [35], важно учесть квантовый характер спиновой  $\mathbf{Q}$ -волны, так как переходы между состояниями локального и делокализованного поляронов ведут к расщеплению нижних зон (в приближении локального полярона) и существенно изменяют их свойства. А именно, как указано во Введении, результаты, получаемые с помощью приближения сложного спинового полярона (когда набор базисных операторов содержит наряду с операторами локального спинового полярона еще и поляроны одетые в  $\mathbf{Q}$ -волну), воспроизводят квазичастичную зону SCBA при  $T = 0$  [36].

В настоящей работе мы рассматриваем эту модель при  $T, p \neq 0$ . В этом случае спиновая подсистема теряет дальний порядок и среднее значение  $N^{-1} \langle \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \rangle$  равно нулю. Поэтому следует ввести новые операторы, чтобы сохранить результаты в приближении сложного спинового полярона при  $T = 0$  и учесть при этом конечную спиновую корреляционную длину  $\xi$ . Естественным обобщением на-

бора операторов (15) при  $T, p \neq 0$  служит добавление состояний локального полярона,  $A_{\mathbf{r},1}$ ,  $A_{\mathbf{r},2}$  и  $A_{\mathbf{r},3}$ , одетых в набор спиновых волн с импульсами  $\mathbf{q}$ , близкими к антиферромагнитному вектору  $\mathbf{Q}$  (для таких  $\mathbf{q}$  спин-спиновый структурный фактор имеет резкий пик даже при  $T, p \neq 0$ ). Такие операторы можно записать в виде

$$A_{\mathbf{R},4} = \tilde{Q}_{\mathbf{R}}^{(\Omega)} A_{\mathbf{R},1}, \quad A_{\mathbf{R},5} = \tilde{Q}_{\mathbf{R}}^{(\Omega)} A_{\mathbf{R},2}, \quad (17)$$

$$A_{\mathbf{R},6} = \tilde{Q}_{\mathbf{R}}^{(\Omega)} A_{\mathbf{R},3},$$

$$\tilde{Q}_{\mathbf{R}}^{(\Omega)} = N^{-1} \sum_{\rho, \mathbf{q} \in \Omega} e^{i\mathbf{q} \cdot \rho} \tilde{S}_{\mathbf{R}+\rho}, \quad (18)$$

$$\Omega = \{\mathbf{q}, |\pm \pi - q_{x,y}| < \kappa_0\}.$$

Здесь  $\Omega$  — квадрат около точки  $\mathbf{Q}$  и эквивалентных точек (т.е. четыре квадрата  $\Omega = \kappa_0 \times \kappa_0$  у углов первой зоны Бриллюэна, см. ниже рис. 1а). Выбор параметра  $\kappa_0$  диктуется спиновой корреляционной длиной  $\xi$ , которая в первую очередь определяется параметром фрустрации  $p$ .

Обоснуем принятый нами ниже выбор  $\kappa_0(p)$ . Для этого представим каждый из операторов (17), например  $A_{\mathbf{R},4}$ , в виде

$$A_{\mathbf{R},4} = \sum_{\mathbf{R}'} \alpha(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \times \exp[i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')] \tilde{S}_{\mathbf{R}'} A_{\mathbf{R},1}, \quad (19)$$

где

$$\alpha(\mathbf{l}) = \int_{-\kappa_0}^{\kappa_0} \int_{-\kappa_0}^{\kappa_0} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}}. \quad (20)$$

Абсолютное значение величины  $\alpha(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$  зависит только от модуля разности  $\mathbf{l} = \mathbf{R} - \mathbf{R}'$ , уменьшается с увеличением  $l$  и описывает степень спаривания локального полярона в ячейке  $\mathbf{R}$  со спином в ячейке  $\mathbf{R} + \mathbf{l}$ . Эта зависимость  $\tilde{\alpha}(\mathbf{l}) = |\alpha(\mathbf{l})/\alpha(0)|$  имеет вид

$$\tilde{\alpha}(\mathbf{l}) = \left| \frac{\sin(l_x \kappa_0) \sin(l_y \kappa_0)}{l_x l_y \Omega} \right|. \quad (21)$$

Значение  $l_0$ , которое удовлетворяет условию

$$l_0 \kappa_0 = \pi, \quad (22)$$

можно качественно рассматривать как радиус спаривания локального полярона со спиновыми корреляциями, поскольку  $\tilde{\alpha}(\mathbf{l}) \sim 1$  для  $l < l_0$  и  $\tilde{\alpha}(\mathbf{l}) \ll 1$  для  $l \gg l_0$ . С другой стороны, радиус спаривания

спинового полярона должен быть порядка корреляционной длины,  $l_0 \sim \xi$ . Эта качественная оценка ведет к выбору области значений  $\Omega = \pi^2/\xi^2$ ,  $\kappa_0 = \pi/\xi$ . Такой выбор  $\Omega$  дает правильное описание системы в двух пределах. Действительно, если  $\xi$  стремится к бесконечности (спиновая система обладает дальним порядком,  $T = 0$ ), радиус спаривания полярона также стремится к бесконечности,  $\kappa_0$  стремится к нулю и  $\tilde{Q}_{\mathbf{R}}^{(\Omega)}$  (18) преобразуется в  $\tilde{Q}_{\mathbf{R}}$  (16). В результате получаем непрерывное описание модели от конечных температур до нулевой. Ясно, что в противоположном пределе высоких температур, когда спиновые корреляции между соседними узлами малы, система должна описываться локальным спиновым поляроном. Как видно из (22), если  $\xi$  ( $\sim l_0$ ) стремится к единице, то значение  $\kappa_0$  близко к  $\pi$ . В этом случае  $\alpha(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = \delta_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$  и операторы  $A_{\mathbf{R},i}$ ,  $i = 4, 5, 6$  представляют собой локальные спиновые поляроны, близкие по свойствам к  $A_{\mathbf{R},i}$ ,  $i = 1, 2, 3$  (в частности,  $A_{\mathbf{R},6}(\kappa_0 = \pi)$  является линейной комбинацией  $A_{\mathbf{R},1}$ ,  $A_{\mathbf{R},2}$  и  $A_{\mathbf{R},3}$ ).

Ниже спиновая корреляционная длина определяется из спектра спиновых волн, который был вычислен для фрустрированной модели Гейзенберга в рамках сферически-симметричного приближения [49]. Если спиновая система близка к неелевской фазе,  $\xi$  можно определить из разложения спектра около антиферромагнитного вектора  $\mathbf{Q}$  [54] (будем обозначать ее  $\xi_{\mathbf{Q}}$ ). Затем используем критерий  $\kappa_0 = \pi/\xi_{\mathbf{Q}}$ . Явный вид спектра и  $\xi_{\mathbf{Q}}$  даны в Приложении А.

Выбор параметра  $\kappa_0$  следует изменить для малых значений  $\xi_{\mathbf{Q}}$ . Значение  $\xi_{\mathbf{Q}}$  сильно зависит от параметра фрустрации  $p$ . Если  $p \geq 0.15$ , то  $\xi_{\mathbf{Q}} \leq 2-3$  ( $\kappa_0 = \pi/\xi_{\mathbf{Q}} \leq 0.35\pi$ ), и для такого  $p$  значение реального  $\xi$  может существенно отличаться от  $\xi_{\mathbf{Q}}$ . В самом деле, при наличии фрустрации спин-спиновая корреляционная функция  $C_{\mathbf{R}} = \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}_0} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}_0+\mathbf{R}} \rangle$  имеет следующую зависимость от  $\mathbf{R} = n_x \mathbf{g}_x + n_y \mathbf{g}_y$ :

$$C_{\mathbf{R}} = m_1(\mathbf{R})(-1)^{n_x+n_y} + m_2(\mathbf{R})[(-1)^{n_x} + (-1)^{n_y}], \quad (23)$$

где  $m_1(\mathbf{R}) \gg m_2(\mathbf{R})$  для  $p \ll 1$  (неелевский тип фазы) и  $m_1(\mathbf{R}) \ll m_2(\mathbf{R})$  для  $p$  близкого к единице (страйп-фаза с бесщелевым спектром в точках  $\mathbf{Q}_1 = (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$ ). Выбор  $m_1(\mathbf{R})$  и  $m_2(\mathbf{R})$  диктуется щелью спинового спектра в точках  $\mathbf{Q}$  и  $\mathbf{Q}_1$ . Для промежуточных значений фрустрации,  $0.15 \leq p \leq 0.55$ , эти щели в спиновом спектре сравнимы, и в этом  $p$ -интервале бессмысленно определять  $\xi$  по разложению спектра около точек  $\mathbf{Q}$  или  $\mathbf{Q}_1$ . С другой стороны, структура локального поля-

Параметр фрустрации  $p$ , допирование  $x$ , спиновая корреляционная длина  $\xi_{\mathbf{Q}}$  и параметр обрезания  $\kappa_0$ . Значения  $\varepsilon_1(\pi, 0)$ ,  $\varepsilon_2(\pi, 0)$  и  $\varepsilon_F$  даны в единицах  $\tau$ ;  $n_{h,\sigma}^{(1,2)}(\mathbf{k})$  — спектральный вес соответственно первой и второй зон

$p$	$\kappa_0$	$\xi_{\mathbf{Q}}$	$x$	$n_{h,\sigma}^{(1)}(\pi, 0)$	$n_{h,\sigma}^{(2)}(\pi, 0)$	$n_{h,\sigma}^{(1)}(\pi/2, \pi/2)$	$\varepsilon_1(\pi, 0)$	$\varepsilon_2(\pi, 0)$	$\varepsilon_F$
0.05	$0.08\pi$	12	0.00	0.23	0.02	0.23	-4.06	—	—
0.10	$0.17\pi$	6	0.02	0.25	0.00	0.26	-4.09	—	-4.38
0.13	$0.30\pi$	3.4	0.06	0.13	0.11	0.27	-4.21	-4.04	-4.34
0.15	$0.35\pi$	< 3	0.11	0.06	0.18	0.23	-4.38	-4.03	-4.40
0.2	$0.35\pi$	< 2	0.14	0.08	0.16	0.24	-4.35	-4.08	-4.40
0.25	$0.35\pi$	< 1	0.19	0.10	0.13	0.25	-4.28	-4.10	-4.36

рона учитывается операторами  $A_{\mathbf{R},1}$ ,  $A_{\mathbf{R},2}$  и  $A_{\mathbf{R},3}$ , а операторы  $A_{\mathbf{R},4}$ ,  $A_{\mathbf{R},5}$  и  $A_{\mathbf{R},6}$  нужны для описания поляронных состояний с большим или промежуточным радиусом  $l_0 = 2-3$ . Это означает, что мы должны фиксировать  $\kappa_0 \approx 0.35\pi$  для  $p \geq 0.15$  ( $\kappa_0 = \pi/l_0$ ,  $l_0 = 2-3$ ) и выбирать  $\kappa_0 = \pi/\xi_{\mathbf{Q}}$  для  $p < 0.15$ . Вычисленное таким образом значение  $\xi_{\mathbf{Q}}$ , а также принятые ниже соотношения между параметром  $\kappa_0$  и значением фрустрации  $p$  приведены в таблице.

Чтобы определить спектр возбуждений исходя из операторов (11), (17), вычислим матричные элементы матриц  $D$  и  $K$ . Такие вычисления обычно громоздки, так как требуют нахождения сложных коммутаторов операторов  $A_{\mathbf{k},i}$  и  $B_{\mathbf{k},i}$  с гамильтонианом. Как правило, такие коммутаторы нельзя выразить, используя только двухузельные функции Грина, поэтому требуются определенные приближения. Выражения для матричных элементов существенно упрощаются в приближении одной дырки. Мы используем это приближение, поскольку задача рассматривается в пределе малого допирования,  $x < 0.2$ ). Тогда матричные элементы выражаются через двухузельные и многоузельные корреляторы спиновых операторов (более точно, через двух-, трех-, четырех- и пятиузельные корреляционные функции). Учитывая сферическую симметрию, трехузельные корреляторы можно свести к двухузельным, а пятиузельные — к четырехузельным. Четырехузельные корреляторы можно привести к виду

$$V_{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2\mathbf{R}_3\mathbf{R}_4} = \langle (\mathbf{S}_{\mathbf{R}_1} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}_2}) (\mathbf{S}_{\mathbf{R}_3} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}_4}) \rangle,$$

где предполагается, что все узлы различны. Для вычисления таких корреляторов используется приближение Такахаши [50]

$$V_{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2\mathbf{R}_3\mathbf{R}_4} = C_{R_{12}}C_{R_{34}} + \frac{1}{3}C_{R_{13}}C_{R_{24}} + \frac{1}{3}C_{R_{14}}C_{R_{23}}.$$

В результате матричные элементы выражаются че-

рез статический спин-спиновый структурный фактор  $C_{\mathbf{q}}$  (фурье-компонента  $C_{\mathbf{R}}$ ). Явный вид матриц  $K$  и  $D$  приведен в Приложении Б. Типичные составляющие этих матричных элементов имеют вид

$$u_g = N^{-1} \sum_{\mathbf{q} \in \Omega} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{g}} C_{\mathbf{q}},$$

$$W_{g1}^{(J)} = N^{-2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \in \Omega} e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{g}} C_{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2} C_{\mathbf{q}_2}. \quad (24)$$

Выражения аналогичные  $u_g$  и  $W_{g1}^{(J)}$  содержат одно или два суммирования по  $\mathbf{q} \in \Omega$ . Каждая сумма по  $\mathbf{q}$  пропорциональна отношению  $\Omega/\pi^2$ , которое есть малый параметр в нашем приближении: как указано выше,  $\Omega/\pi^2 = \kappa_0^2/\pi^2 \leq 0.1$  (см. таблицу). Эта малость оправдывает пренебрежение некоторыми членами пропорциональными  $\Omega^2$ .

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

После решения системы (10) для набора операторов  $A_{\mathbf{R},i}$  (11), (17) результирующие функции Грина имеют вид

$$G_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \sum_{l=1}^6 \frac{z_{(i,j)}^{(l)}(\mathbf{k})}{\omega - \varepsilon_l(\mathbf{k})}, \quad i, j = 1, \dots, 6. \quad (25)$$

Соотношение (12) показывает, что вычеты  $z_{(1,1)}^{(l)}(\mathbf{k})$ ,  $z_{(2,2)}^{(l)}(\mathbf{k})$  определяют значение  $n_{h,\sigma}^{(l)}(\mathbf{k})$  — число (спектральный вес) голых кислородных дырок с импульсом  $\mathbf{k}$  и спином  $\sigma$  в квазичастичном состоянии  $|\mathbf{k}, \sigma, l\rangle$  квазичастичной зоны  $\varepsilon_l(\mathbf{k})$ :

$$n_{h,\sigma}^{(l)}(\mathbf{k}) = \frac{2}{1 + \cos k_x} z_{(1,1)}^{(l)}(\mathbf{k}) + \frac{2}{1 + \cos k_y} z_{(2,2)}^{(l)}(\mathbf{k}). \quad (26)$$

Напомним, что вес голой дырки удовлетворяет правилу сумм  $\sum_l n_{h,\sigma}^{(l)}(\mathbf{k}) = 2$  и максимальное число дырок на элементарную ячейку равно четырем, несмотря на наличие шести зон. Это означает, что в этой модели нарушается теорема Латтинджера.

Расчет спин-поляронного спектра ведется при  $T = 0.2J$ . Отметим, что спектр имеет слабую температурную зависимость до температур  $T \approx 0.4J$ . Так как мы интересуемся режимом относительно слабого допирования,  $x \leq 0.2$ , мы приводим результаты для двух самых нижних зон,  $l = 1, 2$ . В режиме сильного допирования наше приближение может оказаться недостаточным, поскольку оно основано на приближении одной дырки и не учитывает корреляционного взаимодействия между поляронами.

На рис. 1–3 представлены спектр  $\varepsilon_1(\mathbf{k})$  и спектральный вес  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$  голой дырки нижней зоны с помощью линий уровня  $\varepsilon_1(\mathbf{k}) = \text{const}$  и  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}) = \text{const}$  для значений параметра фрустрации  $p = 0.05, 0.1, 0.13, 0.15, 0.2$  и  $0.25$ .

Как отмечалось выше, при рассмотрении эволюции спектра в зависимости от допирования мы предполагаем некоторое качественное соответствие между значением допирования  $x$  и параметром фрустрации  $p$ . Эта зависимость представлена в таблице. Конечно, такая связь чисто феноменологическая и может потребоваться некоторое масштабирование. Тем не менее основные выводы останутся в силе, если мы примем реалистическое предположение, что малое и оптимальное допирования отвечают соответственно  $p \approx 0-0.1$  и  $p \approx 0.1-0.25$ . Напомним, что фрустрация имеет место даже для недопированного 2D-антиферромагнетика, если учесть реальную структуру взаимодействий в плоскости  $\text{CuO}_2$  [39].

На рис. 1б кружки нанесены на контуры постоянной энергии, которые соответствуют ферми-поверхности, рассчитанной для дырочного допирования  $x$  из таблицы. Диаметр кружков пропорционален спектральному весу  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$  на ферми-поверхности.

На рис. 4–6 приведены спектры двух нижних дырочных зон в электронном представлении вдоль линий симметрии для выбранных значений  $p$  и значения  $\tau = 0.4$  эВ. Нулевая энергия соответствует уровню Ферми  $\varepsilon_F$ . Те участки зон, которые имеют большой спектральный вес  $n_{h,\sigma}^{(1,2)}(\mathbf{k})$  голой частицы, показаны сплошной линией, участки с малым  $n_{h,\sigma}^{(1,2)}(\mathbf{k}) < 0.05$  — штриховой линией.

Рассмотрим сначала случай диэлектрика, или режим с очень малым допированием, который представлен на рис. 1 и 4. Как видно из рис. 1а,б, минимум  $\varepsilon_1(\mathbf{k})$  близок к точке  $N$  и

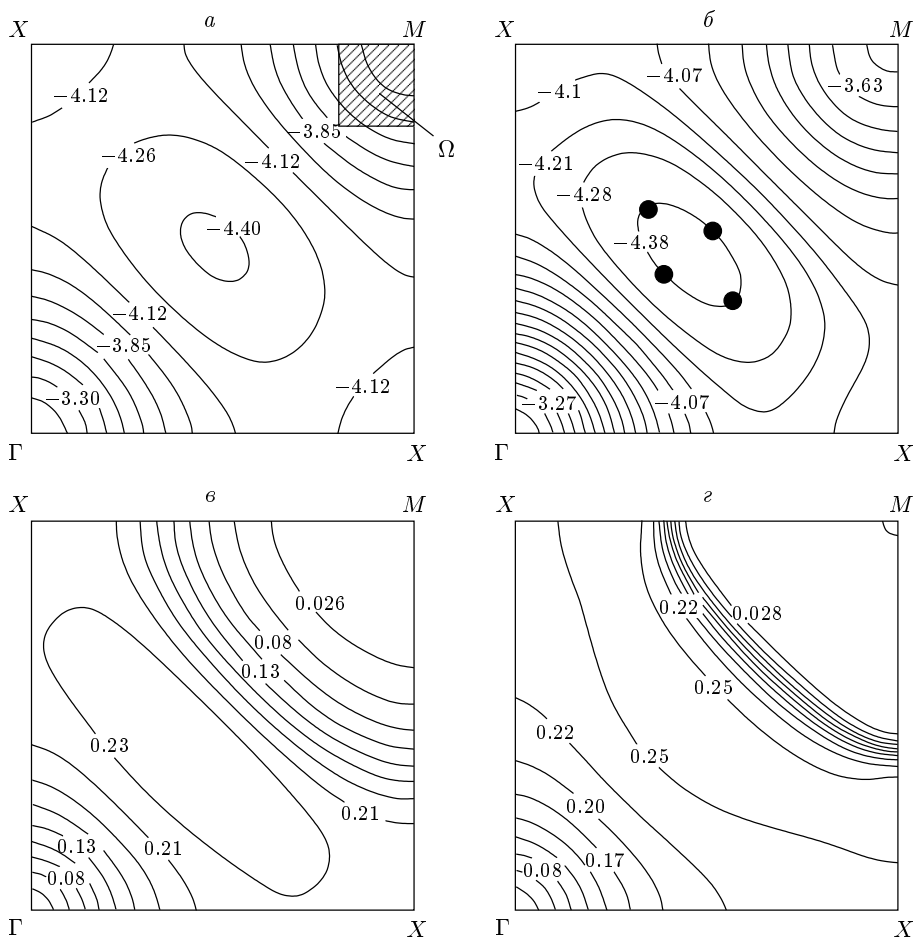
спектр довольно изотропен около дна зоны. Спектр вдоль направлений  $\Gamma-M$  и  $\Gamma-X-M$  воспроизводит ARPES-результаты (ср., например, рис. 4а и рис. 3 в [2]). Ширина нижней дырочной зоны (верхней электронной зоны),  $W_1 \approx (3.3-4.4)\tau = 0.44$  эВ, также соответствует ARPES-результатам:  $W_1 \approx 0.2$  эВ для  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{6+0.5}$  [2],  $W_1 \approx 0.3$  эВ для  $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$  [3],  $W_1 \approx 0.35$  эВ для  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [1]. Некоторая неопределенность этих экспериментальных данных связана с уменьшением спектрального веса около точки  $\Gamma$ .

Наиболее важный результат в режиме очень малого допирования — резкое уменьшение спектрального веса нижней зоны при движении по  $\mathbf{k}$  из точки  $N$  в точку  $M$ , см. рис. 1в,г. Видно, что  $\mathbf{k}$ -линия такого резкого уменьшения спектрального веса близка к той, которая дает остаточную ФП в ARPES-экспериментах [1, 3]. Спектры спинового полярона на рис. 1а, б и 4 обладают симметрией близкой к симметрии магнитной зоны Бриллюэна, но спектральный вес  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$  имеет симметрию истинной зоны Бриллюэна, см. рис. 1в,г.

На рис. 3б,г и 6б, отвечающих оптимальному допированию  $p = 0.25$ ,  $x = 0.19$ , видна большая ФП с центром в точке  $(\pi, \pi)$ . Она имеет форму, удовлетворяющую теореме Латтинджера, но с заполнением  $1 + x$ , а не  $x$ . Распределение спектрального веса, представленное на рис. 3г, показывает, что такая большая ФП возникает вследствие малого спектрального веса голой дырки для  $k$ -состояний спинового полярона, лежащих под ФП. Среднее значение  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$  близко к  $0.17 \ll 1$ . Отметим, что если мы используем приближение только локального полярона (например, ограничиваем набор базисных операторов операторами (11)), то вместо двух нижних зон  $\varepsilon_{1,2}(\mathbf{k})$  возникнет одна эффективная зона  $\tilde{\varepsilon}_1(\mathbf{k})$ . У этой зоны спектральный вес голых частиц  $\tilde{n}_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$  будет близок к сумме спектральных весов  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}) + n_{h,\sigma}^{(2)}(\mathbf{k})$ . В результате  $\tilde{n}_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$  для  $\mathbf{k}$ , лежащих под ФП, будет приблизительно в полтора раза больше, чем  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$ . Как следствие, площадь под ФП в приближении локального полярона была бы значительно меньше, чем на рис. 3б, что привело бы к потере качественного соответствия с экспериментальной картиной.

Теперь сравним две нижние зоны для случаев диэлектрика и оптимального допирования вдоль линии  $N-\Gamma$ . В первом случае (см. рис. 4а) важна только самая верхняя электронная зона, так как вторая зона имеет малый спектральный вес. Для оптимально допированного случая (рис. 6б) важна и





**Рис. 1.** Дырочный спектр  $\varepsilon_1(\mathbf{k})$  (а, б) и спектральный вес  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$  голы дырки (в, г) для нижней зоны представлены линиями  $\varepsilon_1(\mathbf{k}) = \text{const}$  (в единицах  $\tau = 1$ ) и  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}) = \text{const}$  для значений параметра фрустрации  $p = 0.05$  (а, в) и  $p = 0.10$  (б, г). Кружки на рисунке б нанесены на контуры постоянной энергии, которые соответствуют ферми-поверхности, рассчитанной для дырочного допирования  $x$  из таблицы. Диаметр кружков пропорционален спектральному весу  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$  на ферми-поверхности. Результаты приведены в первом квадранте зоны Бриллюэна. Для точек симметрии приняты обозначения  $\Gamma = (0, 0)$ ,  $X = \{(\pi, 0), (0, \pi)\}$ ,  $M = (\pi, \pi)$

вторая зона, которая имеет основной спектральный вес в области, примыкающей к точке  $\Gamma$ . В этом случае имеется хорошее соответствие с данными ARPES-экспериментов (см. рис. 3 в [2]), если мы не будем рассматривать те части спектров  $\varepsilon_1(\mathbf{k})$  и  $\varepsilon_2(\mathbf{k})$  (штриховая линия на рис. 6б), где мал спектральный вес, а представим себе вторую зону в области близкой к точке  $\Gamma$  как продолжение первой. Такая трактовка корректна, если учесть уширение зон. В нашем приближении такое уширение должно описываться дополнительным расщеплением зон, которое можно получить расширением набора операторов (17) для делокализованных поляронных состояний. При оптимальном допировании ( $p = 0.25$ ) эффективная ширина зоны  $W = \varepsilon_{2,\text{max}} - \varepsilon_F \approx 0.55$  эВ,

см. рис. 6б ( $W \approx 0.38$  эВ для почти оптимального допирования  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{6+\delta}$  [2, 51, 52]). Сравнение с диэлектрическим состоянием показывает некоторое сужение зоны при уменьшении допирования, как на это указывают данные ARPES-экспериментов [2].

Важной чертой спектра является наличие второй зоны  $\varepsilon_2(\mathbf{k})$  на участке  $N-M$ , которая обладает достаточно большим спектральным весом (см. рис. 6б). Эта ветвь напоминает основную ветвь вдоль  $N-\Gamma$ , если мы сместим ее в  $\mathbf{k}$ -пространстве на вектор  $\mathbf{Q}$ . Относительно главной нижней ветви вдоль  $N-M$  зона  $\varepsilon_2(\mathbf{k})$  смещена на энергию порядка 0.2 эВ. Эта ветвь присутствует также и в случае промежуточного допирования (см. рис. 4а). Аналогичная ветвь (но без сдвига энергии) была недавно

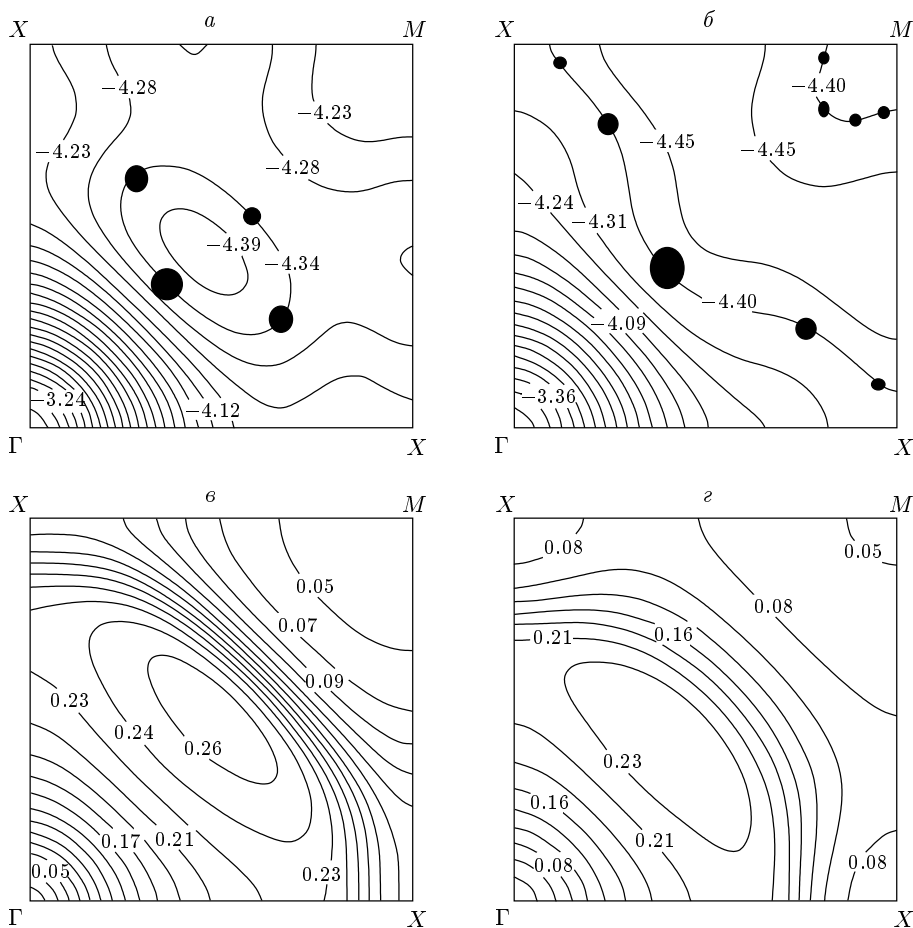


Рис. 2. То же, что на рис. 1, для  $p = 0.13$  (а, в) и  $p = 0.15$  (б, г)

обнаружена для  $\text{Bi2212}$  [10] при промежуточном допировании и объяснялась как теневая зона, впервые открытая в [9]. Для оптимально допированных соединений наличие этой зоны может оказаться важным для описания плазменных колебаний с частотой порядка  $\omega_p = 1$  эВ, если учитывать соответствующие межзонные переходы. Напомним, что в рамках обычной зонной теории подобные переходы отвечают слишком высокой энергии (около 1.2 эВ) и, следовательно, ведут только к постоянному вкладу в статическую диэлектрическую проницаемость [53].

Наши результаты воспроизводят также наличие протяженной седловой точки, которая вытянута в направлении  $X$ - $\Gamma$  и близка к ФП (см. рис. 3б). Такая седловая точка присутствует в фотоэмиссионных данных для оптимально допированных соединений. Существует много работ, посвященных проблеме седловой точки и ее связи с теорией сверхпроводимости [6]. Наблюдают также некую плоскую зону вблизи ФП в широкой области  $\mathbf{k}$ -пространства около

точки  $X$ . Заметим, что для такой области плоской зоны, близкой к точке  $(2\pi/3, 0)$ , наш подход даст достаточно большой спектральный вес голых носителей  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}) \approx 0.22$ , см. рис. 3г.

Случай промежуточного допирования представлен на рис. 2а, 2б, 5а ( $p = 0.13$ ,  $x = 0.06$ ) и 2б, 2г, 4а ( $p = 0.15$ ,  $x = 0.11$ ). При увеличении допирования с  $x = 0.02$  до 0.11 (ср. последовательно рис. 1г, 2в, 1в) поведение спектрального веса резко изменяется: остаточная ФП исчезает, появляется конечное заполнение  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$  около точки  $M$ , кривизна линий  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}) = \text{const}$  меняет знак в широкой области около линии  $X$ - $X$ , и в результате спектральный вес вдоль линии  $X$ - $(\pi, \pi/2)$  уменьшается. В области между  $X$  и  $(\pi, \pi/2)$  спектральный вес перемещается во вторую зону,  $n_{h,\sigma}^{(2)}(\mathbf{k})$  увеличивается. Поскольку в интервале допирования  $x = 0.06$ –0.11 происходит пересечение ФП и  $X$ - $M$ -линии, спектральный вес  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$  (пропорциональный диаметру кружков)

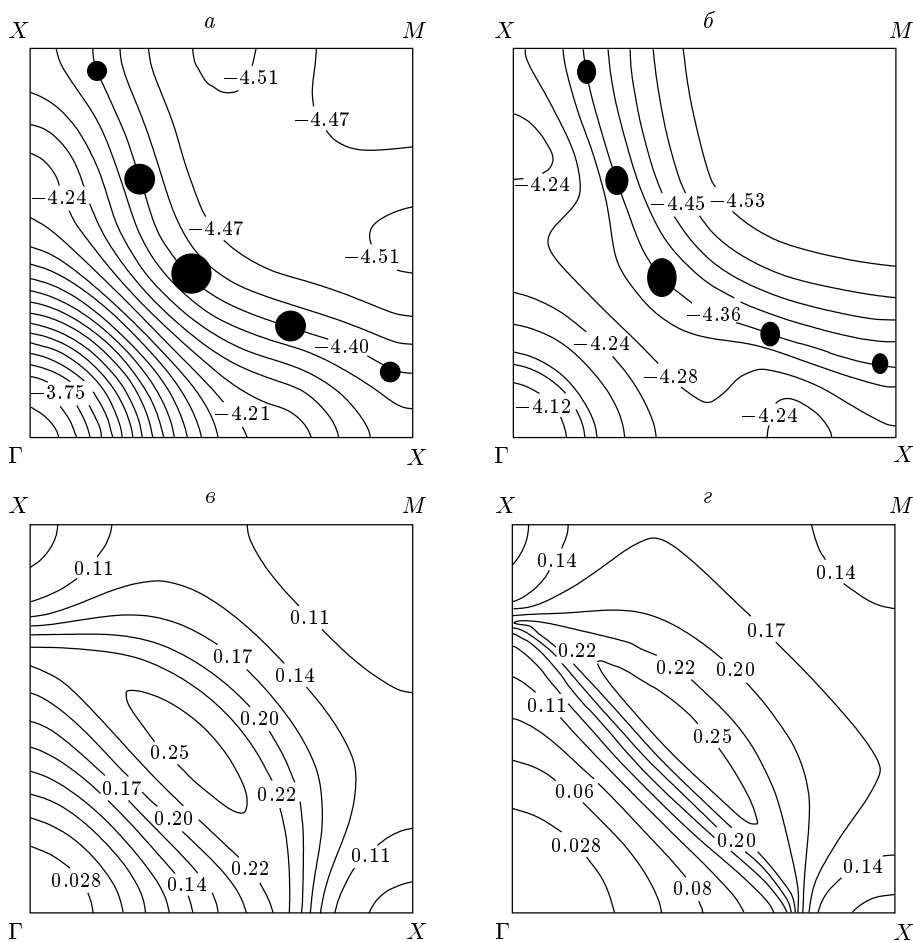


Рис. 3. То же, что на рис. 1, для  $p = 0.20$  (а, в) и  $p = 0.25$  (б, г)

сильно меняется вдоль ФП.

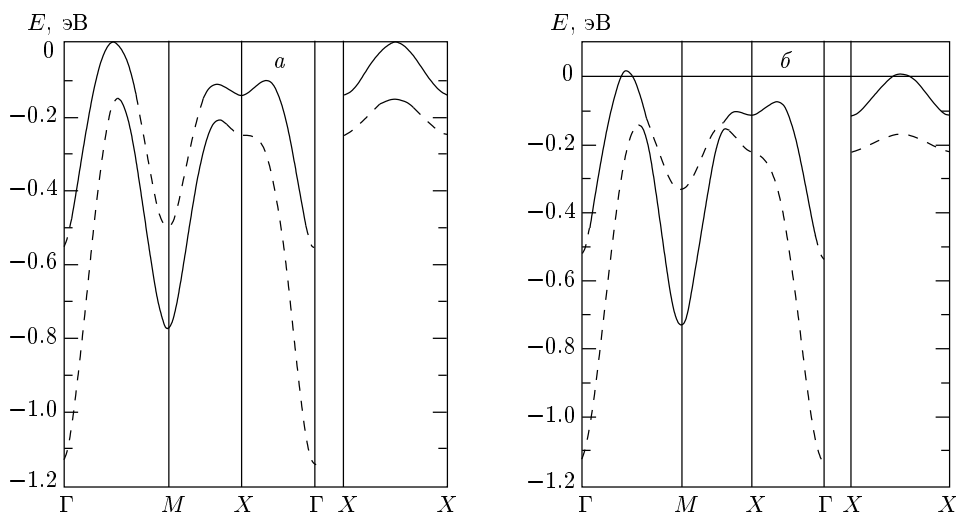
Такое резкое уменьшение спектрального веса при движении в  $\mathbf{k}$ -плоскости вдоль ФП из центральной области около  $N = (\pi/2, \pi/2)$  в точки близкие к  $X = (\pi, 0)$  можно трактовать как открытие высокоэнергетической псевдощели  $\delta$  около точки  $(\pi, 0)$ .

Псевдощель  $\delta$  часто определяют как  $\delta = \varepsilon(\pi, 0) - \varepsilon_F$  [3]. Для нашего случая промежуточного допирования ( $p = 0.15, x = 0.11$ )  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\pi, 0)$  мало и нижняя дырочная зона должна слабо проявляться в точке  $X$  в ARPES-экспериментах. Поэтому  $\varepsilon_2(\pi, 0)$  (см. таблицу) следует рассматривать как то значение, которое нужно взять в качестве  $\varepsilon(\pi, 0)$  в выражении для щели  $\delta$ . Тогда для  $\tau = 0.4$  эВ значение псевдощели равно 0.19 эВ в полном соответствии с ARPES-результатами (0.1–0.2 эВ [2, 12–14]). Зависимость от допирования спектрального веса  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\pi, 0)$  нижней дырочной зоны, представленная в таблице, немонотонна. Вначале величина  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\pi, 0)$  в режи-

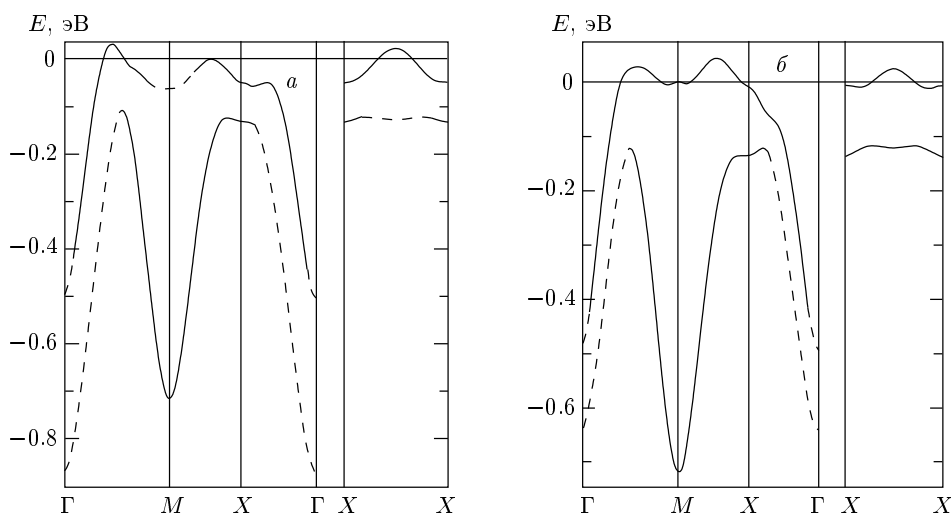
ме промежуточного допирования сильно уменьшается, затем сильно возрастает для оптимального допирования. Такое поведение полностью соответствует ARPES-данным, указывающим на уменьшение псевдощели при увеличении допирования с 0.1 до 0.2.

Исследование эволюции спектра нижней зоны  $\varepsilon_1(\mathbf{k})$  в режиме промежуточного допирования показывает, что именно в этом узком интервале допирования происходит образование протяженной седловой точки около  $(2\pi/3, 0)$ . При увеличении допирования выше  $x = 0.11$  эта область плоской зоны сохраняется.

При любом допировании спектральный вес частицы  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$  для  $\mathbf{k}$  близких к точке  $N$  велик и имеет приблизительно одинаковые значения  $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}) = 0.22\text{--}0.25$  (см. таблицу). Именно в этой области  $\mathbf{k}$ -пространства ARPES-эксперименты демонстрируют наличие ФП с хорошо выраженным квазичастичным пиком. Соответственно, вторая



**Рис. 4.** Спектр двух нижних дырочных зон в электронном представлении вдоль линий симметрии зоны Бриллюэна для значений параметра фрустрации  $p = 0.05$  (а) и  $p = 0.10$  (б). Нулевая энергия отвечает ферми-уровню. Значение  $\tau$  принято равным 0.4 эВ. Участки зон с большим спектральным весом  $n_{h,\sigma}^{(1,2)}(\mathbf{k})$  показаны сплошными линиями, участки с малым весом ( $n_{h,\sigma}^{(1,2)}(\mathbf{k}) < 0.05$ ) — штриховой линией



**Рис. 5.** То же, что на рис. 4, для  $p = 0.13$  (а) и  $p = 0.15$  (б)

зона в этой области  $\mathbf{k}$ -пространства обладает малыми  $n_{h,\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}) < 0.03$  (малая некогерентная часть квазичастичного пика) при любом допировании.

### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы представили спин-поляронный подход к описанию эволюции ФП и электронной структуры допированных соединений. Наш подход основан на спин-фермионной модели плоскости  $\text{CuO}_2$  и учиты-

вает допирование введением фрустрации в спиновый гамильтониан. Сильные изменения электронной структуры обусловлены простым и естественным механизмом: допирование приводит к фрустрации в спиновой подсистеме и изменению спин-спиновых корреляционных функций, которое, в свою очередь, ведет к существенному изменению спектра. Или, другими словами, допирование меняет состояние магнитной подложки, от которого сильно зависит форма спектра. Напомним, что этот механизм не

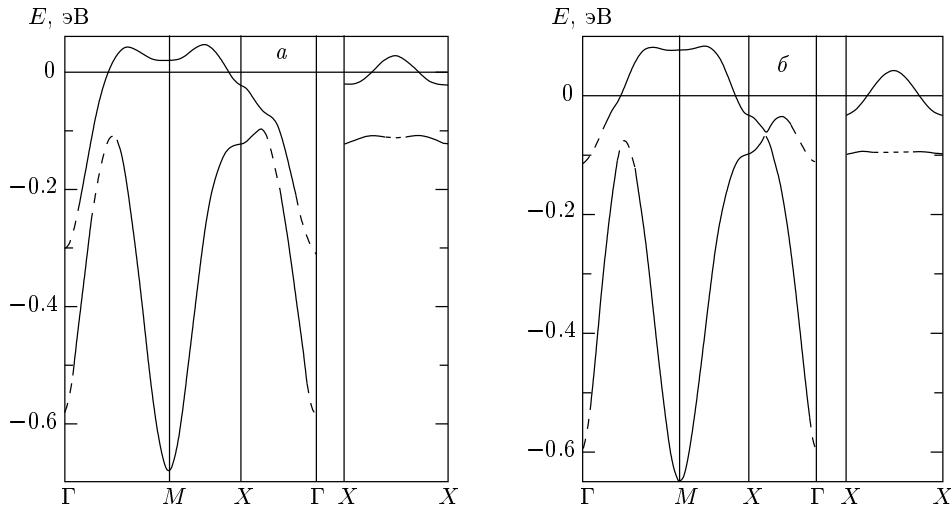


Рис. 6. То же, что на рис. 4, для  $p = 0.20$  (а) и  $p = 0.25$  (б)

учитывает прямого взаимодействия между поляронами, что несомненно существенно при допировании выше оптимального.

Наша теория объясняет изотропное дно зоны, большую разность энергий в точках  $N$  и  $M$  и остаточную ФП [3] недопированных соединений. При оптимальном допировании теория воспроизводит область плоской зоны (протяженная седловая точка) между  $(\pi/2, 0)$  и  $(\pi, 0)$ , большую ФП [4–8] и признаки теневой ФП [9, 10]. В соединениях с промежуточным допированием существует область, в которой происходит сильное изменение спектра и спектрального веса на ФП вблизи  $X$ . Такой результат может трактоваться также как появление в спектре возбуждений псевдощели [12–14].

При очень малом допировании наши результаты воспроизводят ФП в форме малых дырочных карманов и остаточную ФП (см., например, рис. 1б). Спектральный вес тех участков ФП, которые близки к  $M$ , достаточно мал. Это, скорее всего, и препятствует их обнаружению в ARPES-экспериментах. В соединениях с промежуточным допированием мы нашли режим перехода к большой ФП, но с очень малым спектральным весом около  $X = (\pi, 0)$ . Соответственно, мы интерпретируем дуги ФП [15] как те части ФП, где присутствует большой спектральный вес. Мы обнаружили, что участки ФП с большим спектральным весом около  $N$  оказываются очень стабильными относительно допирования, несмотря на значительные изменения в других частях зоны Бриллюэна.

В заключение обсудим следующее обобщение

представленного приближения, которое, в принципе, способно дать более детальное описание некогерентной части спектральной функции дырки  $A_h(\mathbf{k}, \omega)$ . Введем несколько неперекрывающихся областей  $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3, \dots, \Omega_i, \dots$  вместо одной области  $\Omega$  (18) (см. также [32]) и построим операторы делокализованного полярона, спаривая состояния локального полярона со спиновыми волнами из различных областей. Такое расширение набора базисных операторов должно привести к дополнительному расщеплению нижних зон при использовании проекционного метода и воспроизвести  $A_h(\mathbf{k}, \omega)$  в виде набора  $\delta$ -функций [32]:

$$A_h(\mathbf{k}, \omega) \approx \sum_i A_i(\mathbf{k}) \delta(\omega - \varepsilon_i(\mathbf{k})).$$

Это, возможно, приведет к более удовлетворительному описанию теневой ФП и более резкому изменению спектральной плотности на ФП в случае промежуточного допирования, т. е. к лучшему описанию псевдощели.

Работа поддержана INTAS (грант 97-11066) и грантом Российского фонда фундаментальных исследований.

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

В рамках сферически-симметричного приближения [49] представим явный вид функций Грина

$G_s(\mathbf{k}, \omega)$  и спектра спиновых волн  $\omega(\mathbf{k})$  для трехкратно вырожденной моды спиновых волн:

$$G_s(\mathbf{k}, \omega) = \langle S_{\mathbf{k}}^\alpha | S_{-\mathbf{k}}^\alpha \rangle = \frac{F(\mathbf{k})}{\omega^2 - \omega^2(\mathbf{k})}, \quad (\text{A.1})$$

$$\alpha = x, y, z,$$

$$F(\mathbf{k}) = -2 [J_1 z_g C_g (1 - \gamma_g(\mathbf{k})) + J_2 z_d C_d (1 - \gamma_d(\mathbf{k}))], \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} \omega^2(\mathbf{k}) = & \frac{2}{3} \left\{ (1 - \gamma_g) \times \right. \\ & \times \left[ J_1 J_2 K_{gd} + I_1^2 \left( z_g(z_g - 1) C_g \alpha_1 + \frac{3}{4} z_g + K_{gg} \right) \right] + \\ & + (1 - \gamma_d) \left[ J_1 J_2 K_{gd} + \right. \\ & + \left. J_2^2 \left( z_d(z_d - 1) C_d \alpha_3 + \frac{3}{4} z_d + K_{dd} \right) \right] - \\ & - (1 - \gamma_g^2) J_1^2 z_g^2 C_g \alpha_1 - (1 - \gamma_d^2) J_2^2 z_d^2 C_d \alpha_3 - \\ & - (1 - \gamma_g) \gamma_d J_1 J_2 Z_g Z_d C_g \alpha_1 - \\ & \left. - (1 - \gamma_d) \gamma_g J_1 J_2 Z_g Z_d C_d \alpha_3 \right\}, \quad (\text{A.3}) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} K_{gd} &= \sum_{r=g+d} \alpha_r C_r, & K_{gg} &= \sum_{\substack{r=g_1+g_2 \\ g_1 \neq g_2}} \alpha_r C_r, \\ K_{dd} &= \sum_{\substack{r=d_1+d_2 \\ d_1 \neq d_2}} \alpha_r C_r, \end{aligned}$$

$z_g, z_d$  — число первых и вторых ближайших соседей на квадратной решетке,  $\alpha_r$  — вершинные поправки:

$$\alpha_g = \alpha_1, \quad \alpha_d = \alpha_3, \quad \alpha_r = \alpha_2 \quad \text{при} \quad r > d,$$

$$(\alpha_1 - 1)/(\alpha_2 - 1) = R_\alpha = 0.863,$$

$$\alpha_3 = (1 - p)\alpha_2 + p\alpha_1,$$

$$J_1 = (1 - p)J, \quad J_2 = pJ,$$

$$K_{gd} = 8\alpha_1 C_g + 8\alpha_2 C_f, \quad K_{gg} = 4\alpha_2 C_{2g} + 8\alpha_3 C_d,$$

$$K_{dd} = 8\alpha_2 C_{2g} + 4\alpha_2 C_{2d}.$$

Значения  $\alpha_1, C_g, C_d, C_{2g}, C_{gd}, C_{2d}$  вычисляются самосогласованно для каждого  $p$  и  $T$  [49].

Уравнения (A.1)–(A.3) позволяют выразить спин-спиновый структурный фактор  $C(\mathbf{k})$ :

$$C(\mathbf{k}) = A \frac{1 + \exp(\omega_{\mathbf{k}}/T)}{\exp(\omega_{\mathbf{k}}/T) - 1}, \quad A = \frac{F(\mathbf{k})}{2\omega_{\mathbf{k}}}. \quad (\text{A.4})$$

Корреляционная длина  $\xi_{\mathbf{Q}}$  (относительно нееевской фазы) определяется с помощью разложения по степеням  $\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \mathbf{k}$  функции Грина (A.1) в точке  $\omega = 0$  [54]:

$$G(\mathbf{q}, 0) = \frac{G(\mathbf{Q}, 0)}{1 + \xi_{\mathbf{Q}}^2 \mathbf{q}^2}. \quad (\text{A.5})$$

## ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Представим явный вид матричных элементов матриц  $K$  и  $D$ . Приняты следующие обозначения:

$$\begin{aligned} D_{ij}(\mathbf{k}) &= \langle \{ [A_{\mathbf{k},i}, (\hat{\tau} + \hat{J} + \hat{h})], A_{\mathbf{k},j}^+ \} \rangle = \\ &= \tau \tilde{\tau}_{ij} + J_1 \tilde{J}_{ij}^{(1)} + J_2 \tilde{J}_{ij}^{(2)} - h \tilde{h}_{ij}, \end{aligned}$$

$K_{ij}, \tilde{\tau}_{ij}, \tilde{J}_{ij}^{(1)}, \tilde{J}_{ij}^{(2)}, \tilde{h}_{ij}$  — симметричные матрицы,

$$\gamma_g = \frac{1}{2} (\cos k_x + \cos k_y), \quad \gamma_d = \cos k_x \cos k_y,$$

$$\gamma_{2g} = \frac{1}{2} (\cos 2k_x + \cos 2k_y).$$

Ниже даны ненулевые матричные элементы.

### $K$ -матрица

$$K_{11} = \frac{1}{2} (1 + \cos k_x),$$

$$K_{16} = \frac{1}{2} u (1 + \cos k_x),$$

$$K_{22} = \frac{1}{2} (1 + \cos k_y),$$

$$K_{26} = \frac{1}{2} u (1 + \cos k_y),$$

$$K_{33} = \frac{3}{4} + C_g \gamma_g,$$

$$K_{34} = \frac{1}{2} (u + u_g \cos k_x),$$

$$K_{35} = \frac{1}{2} (u + u_g \cos k_y),$$

$$K_{36} = -u + \gamma_g C_g (v_g - v),$$

$$K_{44} = \frac{1}{2} (u + u_g \cos k_x),$$

$$K_{46} = -uv + \frac{1}{2} w + \frac{1}{2} \cos k_x (-v_g u - v u_g + w_g),$$

$$K_{55} = \frac{1}{2} (u + u_g \cos k_y),$$

$$K_{56} = -uv + \frac{1}{2} w + \frac{1}{2} \cos k_y (-v_g u - v u_g + w_g),$$

$$K_{66} = \frac{3}{4}u + 2uv - w + \gamma_g \left[ u_g C_g + u^2 - \frac{1}{3}u_g^2 - 4C_g \left( \frac{1}{3}u_g v + uv_g \right) + 2vv_g C_g + 2v_g^2 C_g^2 + C_g v^2 \left( 1 + \frac{2}{3}C_g \right) \right] - \frac{2}{3}\gamma_g W_g^{(\tau)}.$$

$\tilde{\tau}$ -матрица

$$\tau_{11} = \frac{1}{2}(1 + \cos k_x)^2,$$

$$\tau_{12} = \frac{1}{2} + \gamma_g + \frac{1}{2}\gamma_d,$$

$$\tau_{13} = \left( \frac{3}{2} + 2C_g \gamma_g \right) (1 + \cos k_x),$$

$$\tau_{14} = (1 + \cos k_x)(u + u_g \cos k_x),$$

$$\tau_{15} = u(1 + \cos k_x) + u_g(\cos k_y + \gamma_d),$$

$$\tau_{16} = (1 + \cos k_x) [u(-1 + \gamma_g) + 2C_g \gamma_g (v_g - v)],$$

$$\tau_{22} = \frac{1}{2}(1 + \cos k_y)^2,$$

$$\tau_{23} = (1 + \cos k_y) \left( \frac{3}{2} + 2C_g \gamma_g \right),$$

$$\tau_{24} = u(1 + \cos k_y) + u_g(\cos k_x + \gamma_d),$$

$$\tau_{25} = (1 + \cos k_y)(u + u_g \cos k_y),$$

$$\tau_{26} = (1 + \cos k_y) [u(-1 + \gamma_g) + 2C_g \gamma_g (v_g - v)],$$

$$\tau_{33} = -\frac{9}{8} - 4C_g \gamma_g + C_g + \frac{1}{2}C_{2g} \gamma_{2g} + C_d \gamma_d,$$

$$\tau_{34} = -\frac{3}{4}u - \frac{1}{2}vC_g - u_g \cos k_x + \left( \cos^2 k_x - \frac{1}{2} \right) \left( v_{2g} C_g + \frac{1}{2}u_{2g} \right) + \gamma_g (u_g + 2v_g C_g - 2v_g C_g \cos k_x - 2vC_g) + \gamma_d \left( \frac{1}{2}u_d + v_d C_g \right),$$

$$\tau_{35} = -\frac{3}{4}u - \frac{1}{2}vC_g - u_g \cos k_y + \left( \cos^2 k_y - \frac{1}{2} \right) \left( v_{2g} C_g + \frac{1}{2}u_{2g} \right) + \gamma_g (u_g + 2v_g C_g - 2v_g C_g \cos k_y - 2vC_g) + \gamma_d \left( \frac{1}{2}u_d + v_d C_g \right),$$

$$\tau_{36} = \frac{9}{2}u - \frac{1}{4}u_g + \gamma_g(3u + 4vC_g + 3u_g - 4v_g C_g) + \gamma_{2g} \left( C_g u + \frac{1}{2}v_{2g} C_{2g} - \frac{2}{3}v_{2g} C_g C_{2g} - \frac{1}{2}vC_{2g} - \frac{2}{3}vC_g C_{2g} - \frac{1}{3}u_g C_{2g} - 2v_g C_g^2 + u_{2g} C_g \right) + \gamma_d \left( 2C_g u + v_d C_d - vC_d - \frac{4}{3}C_g C_d (v_d + v) - \frac{2}{3}u_g C_d - 4v_g C_g^2 + 2u_d C_g \right),$$

$$\tau_{44} = \frac{3}{4}u - v_g u_g - 2uv + w + \frac{1}{2}w_g^{(1)} + \cos k_x (u_g - 2v u_g - 2v_g u + 2w_g) + \left( \cos^2 k_x - \frac{1}{2} \right) \left( \frac{1}{2}u_{2g} - 2v_g u_g + w_g^{(2)} \right),$$

$$\tau_{45} = \frac{1}{2}u + 2\gamma_g \left( -v u_g - v_g u + w_g + \frac{1}{2}u_g \right) - 2uv + w + \gamma_d \left( \frac{1}{2}u_d - 2u_g v_g + w_g^{(3)} \right),$$

$$\begin{aligned}
 \tau_{46} = & \frac{3}{2}uv + \frac{3}{2}u - \frac{3}{4}w + \frac{1}{2} \left( uC_g + C_gv^2 + C_gvv_g + C_gv_g^2 - \frac{8}{3}u_gv_gC_g + \frac{2}{3}uu_g - \frac{8}{3}uvC_g + \frac{8}{3}vv_gC_g^2 \right) - \\
 & - \frac{1}{3}W_1^{(\tau)} + \gamma_g \left( -v_gu - vu_g + w_g + 2u_gC_g + 2v^2C_g + \frac{4}{3}v^2C_g^2 + 4vv_gC_g + 4v_g^2C_g^2 + 2u^2 - \frac{2}{3}u_g^2 - \right. \\
 & - \left. \frac{8}{3}u_gvC_g - 8uv_gC_g - \frac{4}{3}W_g^{(\tau)} \right) + \cos k_x \left( -w_g + \frac{3}{2}u_g + uv_g + u_gv \right) + (2 \cos^2 k_x - 1) \times \\
 & \times \left( \frac{1}{4}w_{2g} - \frac{1}{4}uv_{2g} - \frac{1}{4}vu_{2g} + \frac{1}{2}C_gu_{2g} + \frac{1}{2}C_gvv_{2g} + C_g^2v_gv_{2g} - \frac{1}{3}C_gu_{2g}v - C_guv_{2g} - \frac{1}{6}u_gu_{2g} + \right. \\
 & + \frac{1}{2}C_gvv_g + \frac{1}{2}C_gv_g^2 + \frac{1}{3}C_g^2vv_g - \frac{4}{3}C_gu_gv_g + \frac{1}{2}uu_g - \frac{1}{3}W_2^{(\tau)} \left. \right) + 2\gamma_d \left( \frac{1}{4}w_d - \frac{1}{4}uv_d - \frac{1}{4}vu_d + \right. \\
 & + \frac{1}{2}C_gu_d + \frac{1}{2}C_gvv_d + C_g^2v_gv_d - \frac{1}{3}C_gu_dv - C_guv_d - \frac{1}{6}u_gu_d + \frac{1}{2}C_gvv_g + \frac{1}{2}C_gv_g^2 + \\
 & \left. + \frac{1}{3}C_g^2vv_g - \frac{4}{3}C_gu_gv_g + \frac{1}{2}uu_g - \frac{1}{3}W_3^{(\tau)} \right), \\
 \tau_{55} = & \frac{3}{4}u - v_gu_g - 2uv + w + \frac{1}{2}w_g^{(1)} + \cos k_y (u_g - 2vu_{2g} - 2v_gu + 2w_g) + \left( \cos^2 k_y - \frac{1}{2} \right) \left( \frac{1}{2}u_{2g} - 2v_gu_g + w_g^{(2)} \right), \\
 \tau_{56} = & \frac{3}{2}uv + \frac{3}{2}u - \frac{3}{4}w + \frac{1}{2} \left( uC_g + C_gv^2 + C_gvv_g + C_gv_g^2 - \frac{8}{3}u_gv_gC_g + \right. \\
 & + \frac{2}{3}uu_g - \frac{8}{3}uvC_g + \frac{8}{3}vv_gC_g^2 \left. \right) - \frac{1}{3}W_1^{(\tau)} + \gamma_g \left( -v_gu - vu_g + w_g + 2u_gC_g + 2v^2C_g + \right. \\
 & + \frac{4}{3}v^2C_g^2 + 4vv_gC_g + 4v_g^2C_g^2 + 2u^2 - \frac{2}{3}u_g^2 - \frac{8}{3}u_gvC_g - 8uv_gC_g - \frac{4}{3}W_g^{(\tau)} \left. \right) + \\
 & + \cos k_y \left( -w_g + \frac{3}{2}u_g + uv_g + u_gv \right) + (2 \cos^2 k_y - 1) \left( \frac{1}{4}w_{2g} - \frac{1}{4}uv_{2g} - \right. \\
 & - \frac{1}{4}vu_{2g} + \frac{1}{2}C_gu_{2g} + \frac{1}{2}C_gvv_{2g} + C_g^2v_gv_{2g} - \frac{1}{3}C_gu_{2g}v - C_guv_{2g} - \frac{1}{6}u_gu_{2g} + \\
 & + \frac{1}{2}C_gvv_g + \frac{1}{2}C_gv_g^2 + \frac{1}{3}C_g^2vv_g - \frac{4}{3}C_gu_gv_g + \frac{1}{2}uu_g - \frac{1}{3}W_2^{(\tau)} \left. \right) + 2\gamma_d \left( \frac{1}{4}w_d - \frac{1}{4}uv_d - \frac{1}{4}vu_d + \right. \\
 & + \frac{1}{2}C_gu_d + \frac{1}{2}C_gvv_d + C_g^2v_gv_d - \frac{1}{3}C_gu_dv - C_guv_d - \frac{1}{6}u_gu_d + \frac{1}{2}C_gvv_g + \frac{1}{2}C_gv_g^2 + \\
 & \left. + \frac{1}{3}C_g^2vv_g - \frac{4}{3}C_gu_gv_g + \frac{1}{2}uu_g - \frac{1}{3}W_3^{(\tau)} \right), \\
 \tau_{66} = & -9vu - \frac{9}{8}u + \frac{9}{2}w - \frac{1}{4}w_g^{(1)} + u \left( C_g + \frac{2}{3}u_g - \frac{8}{3}C_gv \right) + v^2C_g + v_g^2C_g + vv_g \left( C_g + \frac{8}{3}C_g^2 \right) + \\
 & + v_g \left( \frac{1}{2}u_g - \frac{8}{3}C_gu_g \right) - \frac{2}{3}W_1^{(\tau)} + \gamma_g \left( vu_g \left( -6 + \frac{16}{3}C_g \right) + v_gu \left( -6 + 16C_g \right) - \right. \\
 & - 8vv_gC_g - v^2 \left( 4C_g + \frac{8}{3}C_g^2 \right) - 4u^2 + \frac{4}{3}u_g^2 - 8v_g^2C_g^2 - 4u_gC_g + 6w_g + \frac{8}{3}W_g^{(\tau)} \left. \right) + \\
 & + \gamma_{2g} \left[ \frac{1}{2}u_{2g}C_{2g} + vv_{2g} \left( C_{2g} + \frac{4}{3}C_gC_{2g} \right) + v^2 \left( \frac{1}{2}C_{2g} + \frac{4}{3}C_gC_{2g} + \frac{1}{3}C_{2g}^2 \right) + v_{2g}^2 \left( C_{2g}^2 + \frac{8}{3}C_gC_{2g} \right) + \right. \\
 & + v \left( -\frac{2}{3}u_{2g}C_{2g} + \frac{2}{3}u_gC_{2g} - 2u_{2g}C_g - 2uC_g \right) - v_{2g} \left( 2uC_{2g} + \frac{2}{3}u_gC_{2g} + \frac{2}{3}u_{2g}C_g + 2uC_g \right) + \\
 & \left. + \frac{1}{2}u^2 - \frac{1}{6}M_{2g}^2 - \frac{14}{3}v_g^2C_g^2 + vv_g \left( 4C_g^2 - \frac{4}{3}C_gC_{2g} \right) + \frac{8}{3}v_gv_{2g} \left( C_g^2 - C_gC_{2g} \right) + \right.
 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& +v_g \left( \frac{2}{3}u_g C_{2g} + \frac{2}{3}u_{2g} C_g + 2u C_g \right) + 2w_{2g} C_g - \frac{1}{3}w_g^{(2)} C_{2g} - \frac{1}{3}W_{2g}^{(\tau)} \Big] + \\
& +2\gamma_d \left[ \frac{1}{2}u_d C_d + v v_d \left( C_d + \frac{4}{3}C_g C_d \right) + v^2 \left( \frac{1}{2}C_d + \frac{4}{3}C_g C_d + \frac{1}{3}C_d^2 \right) + \right. \\
& +v_d^2 \left( C_d^2 + \frac{8}{3}C_g C_d \right) + v \left( -\frac{2}{3}u_d C_d + \frac{2}{3}u_g C_d - 2u_d C_g - 2u C_g \right) - v_d \left( 2u C_d + \frac{2}{3}u_g C_d + \frac{2}{3}u_d C_g + 2u C_g \right) + \\
& +\frac{1}{2}u^2 - \frac{1}{6}u_d^2 - \frac{14}{3}v_g^2 C_g^2 + v v_g \left( 4C_g^2 - \frac{4}{3}C_g C_d \right) + \frac{8}{3}v_g v_d (C_g^2 - C_g C_d) + \\
& \left. +v_g \left( \frac{2}{3}u_g C_d + \frac{2}{3}u_d C_g + 2u C_g \right) + 2w_d C_g - \frac{1}{3}w_g^{(3)} C_d - \frac{1}{3}W_d^{(\tau)} \right].
\end{aligned}$$

### $\tilde{J}^{(1)}$ -матрица

$$J_{33} = -4C_g + C_g \gamma_g,$$

$$J_{34} = 2C_g(v_g - v) + \cos k_x C_g \left( \frac{1}{2}v - 2v_g + \frac{1}{2}v_{2g} + v_d \right),$$

$$J_{35} = 2C_g(v_g - v) + \cos k_y C_g \left( \frac{1}{2}v - 2v_g + \frac{1}{2}v_{2g} + v_d \right),$$

$$\begin{aligned}
J_{36} = 2C_g(v - v_g) + 2u_g + \gamma_g \left( \frac{1}{2}C_g(v_g - v) - 2C_g^2 v_g - \frac{1}{2}u_g - \frac{2}{3}u_g C_{2g} - \right. \\
\left. -\frac{4}{3}u_g C_d + \frac{4}{3}v_d C_g C_d + \frac{2}{3}v_{2g} C_g C_{2g} + \frac{2}{3}u_{2g} C_g + \frac{4}{3}u_d C_g \right),
\end{aligned}$$

$$J_{44} = 2C_g(v_g - v) + C_g \cos k_x \left( \frac{1}{2}v - 2v_g + \frac{1}{2}v_{2g} + v_d \right),$$

$$\begin{aligned}
J_{46} = \frac{4}{3}C_g(w_g - w) + \frac{4}{3}C_g u(v - v_g) + v_g^2 \left( C_g + \frac{4}{3}C_g^2 \right) + 2v^2 C_g + \frac{4}{3}W_{g^4}^{(J)} + v v_g C_g \left( -3 - \frac{4}{3}C_g \right) + \\
+ \frac{1}{2} \cos k_x \left( \frac{8}{3}u_g^2 - \frac{2}{3}u^2 - \frac{2}{3}u u_{2g} - \frac{4}{3}u u_d + \frac{8}{3}u v_g C_g - \frac{8}{3}u_g v_g C_g + \frac{2}{3}u v_g C_g + \frac{2}{3}u_{2g} v_g C_g + \frac{4}{3}u_d v_g C_g - \right. \\
\left. -\frac{2}{3}u_g v C_g - \frac{2}{3}u_g v_{2g} C_g - \frac{4}{3}u_g v_d C_g + 4v_g^2 C_g \left( -\frac{1}{2} - \frac{2}{3}C_g \right) + 4v v_g C_g - v^2 C_g - v v_{2g} C_g - 2v v_d C_g + \right. \\
\left. +v_g v \left( \frac{1}{2}C_g + \frac{2}{3}C_g^2 \right) + v_g v_{2g} C_g \left( \frac{1}{2} + \frac{2}{3}C_g \right) + 2v_g v_d C_g \left( \frac{1}{2} + \frac{2}{3}C_g \right) + \right. \\
\left. + \frac{2}{3}C_g (w_g^{(2)} + w_g^{(1)} + 2w_g^{(3)} - 4C_g w_g) + \frac{4}{3}W_{g^3}^{(J)} \right),
\end{aligned}$$

$$J_{55} = 2C_g(v_g - v) + C_g \cos k_y \left( \frac{1}{2}v - 2v_g + \frac{1}{2}v_{2g} + v_d \right),$$

$$\begin{aligned}
J_{56} = \frac{4}{3}C_g(w_g - w) + \frac{4}{3}C_g u(v - v_g) + v_g^2 \left( C_g + \frac{4}{3}C_g^2 \right) + 2v^2 C_g + \frac{4}{3}W_{g^4}^{(J)} + v v_g C_g \left( -3 - \frac{4}{3}C_g \right) + \\
+ \frac{1}{2} \cos k_y \left[ \frac{8}{3}u_g^2 - \frac{2}{3}u^2 - \frac{2}{3}u u_{2g} - \frac{4}{3}u u_d + \frac{8}{3}u v_g C_g - \frac{8}{3}u_g v_g C_g + \frac{2}{3}u v_g C_g + \frac{2}{3}u_{2g} v_g C_g + \frac{4}{3}u_d v_g C_g - \right. \\
\left. -\frac{2}{3}u_g v C_g - \frac{2}{3}u_g v_{2g} C_g - \frac{4}{3}u_g v_d C_g + 4v_g^2 C_g \left( -\frac{1}{2} - \frac{2}{3}C_g \right) + 4v v_g C_g - v^2 C_g - v v_{2g} C_g - 2v v_d C_g + \right. \\
\left. +v_g v \left( \frac{1}{2}C_g + \frac{2}{3}C_g^2 \right) + v_g v_{2g} C_g \left( \frac{1}{2} + \frac{2}{3}C_g \right) + 2v_g v_d C_g \left( \frac{1}{2} + \frac{2}{3}C_g \right) + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{2}{3}C_g(w_g^{(2)} + w_g^{(1)} + 2w_g^{(3)} - 4C_g w_g) + \frac{4}{3}W_{g3}^{(J)} \Big], \\
 J_{66} & = F_0 + \gamma_g(F_1 + F_2), \\
 F_0 & = -4uC_g - \frac{8}{3}uu_g + 8C_g uv + \frac{8}{3}wC_g - \frac{8}{3}w_g C_g + v_g u_g \left( \frac{32}{3}C_g - 4 \right) + \frac{8}{3}v_g uC_g + 3v_g C_g - 3vC_g - 8v^2 C_g - 6v_g^2 C_g - \\
 & - \frac{8}{3}v_g^2 C_g^2 + 2vv_g C_g - 8C_g^2 vv_g + 2w_g^{(1)} + \frac{8}{3}(W_1^{(\tau)} - W_{g1}^{(J)} - W_{g2}^{(J)}), \\
 F_1 & = \frac{2}{3}u^2 + u_g C_g - \frac{10}{3}uv_g C_g - 2u_g vC_g + \frac{1}{2}u_g v + \frac{1}{2}uv_g + v^2 C_g \left( \frac{3}{4} + C_g \right) + v_g^2 C_g \left( \frac{1}{4} + \frac{5}{3}C_g \right) + 2vv_g C_g - \frac{1}{2}w_g - \\
 & - \frac{2}{3}w_g(C_{2g} + 2C_d) + uvC_g - uv_g C_g - \frac{2}{3}u_{2g} v_g C_g + \frac{2}{3}u_g vC_{2g} - \frac{2}{3}u_g vC_g + \frac{2}{3}uvC_{2g} + u_g v_g C_g + \frac{2}{3}uv_g C_{2g} - \\
 & - u_g v_{2g} C_g - \frac{2}{3}uv_{2g} C_{2g} + \frac{2}{3}v^2 C_g(C_g - C_{2g}) + v_g^2 C_g \left( \frac{5}{3}C_g - \frac{7}{3}C_{2g} \right) - \frac{8}{3}vv_g C_g^2 + vv_{2g} C_g \left( -\frac{5}{3}C_{2g} + C_g \right) + \\
 & + 4v_g v_{2g} C_g C_{2g} + 2(uvC_g - uv_g C_g - \frac{2}{3}u_d v_g C_g + \frac{2}{3}u_g vC_d - \frac{2}{3}u_g vC_g + \frac{2}{3}uvC_d + u_g v_g C_g + \frac{2}{3}uv_g C_d - \\
 & - u_g v_d C_g - \frac{2}{3}uv_d C_d + \frac{2}{3}v^2 C_g(C_g - C_d) + v_g^2 C_g \left( \frac{5}{3}C_g - \frac{7}{3}C_d \right) - \frac{8}{3}vv_g C_g^2 + vv_d C_g \left( -\frac{5}{3}C_d + C_g \right) + \\
 & + 4v_g v_d C_g C_d + \frac{2}{3}C_g(w_{g,2g}^{(1)} + 2w_{gd}^{(1)}) - \frac{2}{3}W_g^{(\tau)}, \\
 F_2 & = 3u_g v_g C_g + 3uv_g C_g + \frac{2}{3}uv_g C_{2g} + \frac{2}{3}u_{2g} v_g C_g - \frac{2}{3}uv_{2g} C_{2g} - u_g v_{2g} C_g - 3uvC_g - \frac{2}{3}u_{2g} vC_g + \frac{4}{3}u_d v_g C_g - \\
 & - \frac{4}{3}uv_d C_d - 2u_g v_d C_g - \frac{4}{3}u_d vC_g + \frac{4}{3}uv_g C_d + \frac{1}{2}uv_g - \frac{1}{2}uv + \\
 & + C_g^2(v_{2g} + v + 2v_d - 4v_g) + v^2 \left( -\frac{11}{3}C_g^2 - \frac{1}{4}C_g + \frac{2}{3}C_{2g}C_g + \frac{4}{3}C_g C_d \right) + v_g^2 \left( -\frac{50}{3}C_g^2 - \right. \\
 & - \frac{7}{3} \left( C_g C_{2g} - \frac{14}{3}C_g C_d - \frac{1}{4}C_g \right) + vv_g \left( \frac{52}{3}C_g^2 + \frac{1}{2}C_g - \frac{2}{3}C_g C_{2g} - \frac{4}{3}C_g C_d \right) + v_g v_{2g} \left( \frac{8}{3}C_g^2 + \frac{4}{3}C_g C_{2g} \right) + \\
 & + vv_{2g} \left( -\frac{5}{3}C_g^2 + C_g C_{2g} \right) + v_g v_d \left( \frac{8}{3}C_g C_d + \frac{16}{3}C_g^2 \right) + vv_d \left( -\frac{10}{3}C_g^2 + 2C_g C_d \right) + \frac{1}{6}W_g^{(J)}.
 \end{aligned}$$

**$\tilde{J}^{(2)}$ -матрица**

$$\begin{aligned}
 J_{33} & = -4C_d, \\
 J_{34} & = 2C_d(v_d - v) + \cos k_x C_d(v_g + v_f - 2v_g), \\
 J_{35} & = 2C_d(v_d - v) + \cos k_y C_d(v_g + v_f - 2v_g), \\
 J_{36} & = 2C_d(v - v_d) + 2u_d + \frac{4}{3}\gamma_g(C_d(C_g v_g + C_f v_f) - 2C_g C_d v_g + C_g(u_g + u_f) - u_g(C_g + C_f)), \\
 J_{44} & = 2C_d(v_d - v) + \cos k_x(C_d(v_g + v_f) - 2C_d v_g), \\
 J_{55} & = 2C_d(v_d - v) + \cos k_y(C_d(v_g + v_f) - 2C_d v_g), \\
 J_{64} & = \frac{4}{3}uC_d(v - v_d) + \frac{4}{3}C_d(w_d - w) + 2v^2 C_d + v_d^2 \left( C_d + \frac{4}{3}C_d^2 \right) + \frac{4}{3}W_{d4}^{(J)} - vv_d \left( 3C_d + \frac{4}{3}C_d^2 \right) + \\
 & + \cos k_x \left\{ \frac{4}{3}C_d(uv_g - u_g v_d) + \frac{4}{3}u_g u_d - \frac{4}{3}C_d w_{2g} + v_g v_d \left( C_d - \frac{4}{3}C_d^2 \right) + 2C_d v_g(v - v_d) - \frac{2}{3}u(u_g + u_f) + \right. \\
 & \left. + \frac{2}{3}C_d[v_d(u_g + u_f) - u_d(v_g + v_f)] + \left( \frac{2}{3}C_d^2 + \frac{1}{2}C_d \right) v_d(v_g + v_f) - C_d v(v_g + v_f) + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2}{3}C_d(w_{gd}^{(2)} + w_{gd}^{(1)}) + \frac{4}{3}W_{d3}^{(J)} \Big\}, \\
J_{65} = & \frac{4}{3}uC_d(v - v_d) + \frac{4}{3}C_d(w_d - w) + 2v^2C_d + v_d^2 \left( C_d + \frac{4}{3}C_d^2 \right) + \frac{4}{3}W_{d4}^{(J)} - vv_d \left( 3C_d + \frac{4}{3}C_d^2 \right) + \\
& + \cos k_y \left\{ \frac{4}{3}C_d(uv_g - u_gv_d) + \frac{4}{3}u_gu_d - \frac{4}{3}C_dw_g + v_gv_d \left( C_d - \frac{4}{3}C_d^2 \right) + 2C_dv_g(v - v_d) - \frac{2}{3}u(u_g + u_f) + \right. \\
& \left. + \frac{2}{3}C_d[v_d(u_g + u_f) - u_d(v_g + v_f)] + \left( \frac{2}{3}C_d^2 + \frac{1}{2}C_d \right) v_d(v_g + v_f) - C_dv(v_g + v_f) + \frac{2}{3}C_d(w_{gd}^{(2)} + w_{gd}^{(1)}) + \frac{4}{3}W_{d3}^{(J)} \right\}, \\
J_{66} = & F_0 + \gamma_g(F_1 + F_2), \\
F_0 = & -4uC_d - \frac{8}{3}uu_d + 8C_duv + \frac{8}{3}wC_d - \frac{8}{3}w_dC_d + v_du_d \left( \frac{32}{3}C_d - 4 \right) + \frac{8}{3}v_duC_d + 3v_dC_d - 3vC_d - 8v^2C_d - 6v_d^2C_d - \\
& - \frac{8}{3}v_d^2C_d^2 + 2vv_dC_d - 8C_d^2vv_d + 2w_d^{(1)} + \frac{8}{3} \left( W_1^{(\tau)} - W_{d1}^{(J)} - W_{d2}^{(J)} \right), \\
F_1 = & -\frac{4}{3}w_g(C_g + C_f) + \frac{4}{3}C_g(w_{gd}^{(1)} + w_{fd}^{(1)}) + uv \left( 4C_d + \frac{4}{3}(C_g + C_f) \right) + \\
& + \frac{4}{3}u_gv(C_g + C_f) - \frac{8}{3}u_dvC_g - 4uv_dC_d + \frac{4}{3}uv_g(C_g + C_f) - \frac{4}{3}u(v_gC_g + v_fC_f) - \frac{4}{3}v_dC_g(u_g + u_f) + \\
& + \frac{4}{3}u_gv_gC_d + \frac{8}{3}u_dv_gC_g - \frac{4}{3}u_dC_g(v_g + v_f) - \frac{2}{3}u_gC_d(v_g + v_f) + v^2 \left( \frac{8}{3}C_gC_d - \frac{4}{3}C_g(C_g + C_f) \right) - \\
& - \frac{32}{3}vv_gC_gC_d + 2vC_gC_d(v_g + v_f) - \frac{10}{3}vC_d(v_gC_g + v_fC_f) + v_gv_d \left[ \frac{20}{3}C_gC_d - 2C_d(C_g + C_f) \right] + \\
& + \frac{8}{3}v_gC_g(v_gC_g + v_fC_f) + \frac{16}{3}v_dC_d(v_gC_g + v_fC_f) - \frac{8}{3}v_g^2C_g(C_g + C_f) + vv_d \left[ \frac{4}{3}C_g(C_g + C_f) - \frac{4}{3}C_d(C_g + C_f) \right], \\
F_2 = & v^2 \left[ -\frac{8}{3}C_gC_d + \frac{4}{3}C_g(C_g + C_f) \right] + 16C_gC_dvv_g - 4C_duv + 2vv_gC_gC_d + 2vv_fC_dC_f - \frac{10}{3}vC_dC_g(v_g + v_f) - \\
& - \frac{4}{3}C_g(u_g + u_f)v + \frac{4}{3}C_du_gv_g + \frac{8}{3}C_gu_dv_g + \frac{4}{3}(C_g + C_f)uv_g - v_gv_d [20C_gC_d + 2C_d(C_g + C_f)] - \\
& - \frac{8}{3}C_g(C_g + C_f)v_g^2 + vv_d \left( \frac{8}{3}C_gC_d - \frac{4}{3}C_g(C_g + C_f) \right) + 4C_duv_d + v_dC_d [2C_g(v_g + v_f) - 2(v_gC_g + v_fC_f)] + \\
& + \frac{4}{3}C_g(u_g + u_f)v_d - \frac{2}{3}C_du_g(v_g + v_f) - \frac{4}{3}u(C_gv_g + C_fv_f) - \frac{4}{3}C_gu_d(v_g + v_f) + \frac{10}{3}C_gC_dv_d(v_g + v_f) + \frac{1}{6}W_d^{(J)} + \\
& + 2C_dv_d(C_gv_g + C_fv_f) + \frac{8}{3}C_gv_g(C_gv_g + C_fv_f) - 4C_gC_dv_g + 2C_gC_d(v_g + v_f).
\end{aligned}$$

### $\tilde{h}$ -матрица

$$h_{12} = 2 \left( \frac{1}{2} + \gamma_g + \frac{1}{2}\gamma_d \right),$$

$$h_{16} = 2u \left( \frac{1}{2} + \gamma_g + \frac{1}{2}\gamma_d \right),$$

$$h_{26} = h_{16},$$

$$h_{33} = 2 \left( \frac{3}{4} + 2C_g\gamma_g + C_d\gamma_d \right),$$

$$h_{34} = 2 \left( \frac{1}{2}u + u_g\gamma_g + \frac{1}{2}u_d\gamma_d \right),$$

$$\begin{aligned}
 h_{35} &= h_{34}, \\
 h_{36} &= 2[-u + 2C_g\gamma_g(v_g - v) + C_d\gamma_d(v_d - v)], \\
 h_{45} &= h_{34}, \\
 h_{46} &= 2\left[-uv + \gamma_g(w_g - u_gv - v_gu) + \frac{1}{2}w + \frac{1}{2}\gamma_d(w_d - uv_d - u_dv)\right], \\
 h_{56} &= h_{46}, \\
 h_{66} &= 2\left\{\frac{3}{4}u + 2uv - w + \gamma_g\left[2C_gu_g + 2C_g(v^2 + 2v_gv) + \frac{4}{3}C_g^2(v^2 + 3v_g^2) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + 2u^2 - \frac{2}{3}u_g^2 - 8C_g\left(\frac{1}{3}u_gv + uv_g\right)\right] - \frac{4}{3}\gamma_gW_g^{(\tau)} + \gamma_d\left[C_du_d + C_d(v^2 + 2vv_d) + \frac{2}{3}C_d^2(v^2 + 3v_d^2) - \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - 4C_d\left(\frac{1}{3}u_dv + uv_d\right) + u^2 - \frac{1}{3}u_d^2\right] - \frac{2}{3}\gamma_dW_d^{(\tau)}\right\}.
 \end{aligned}$$

Выше использовались следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
 v &= \frac{1}{N} \sum_{\kappa} 1, \quad \frac{1}{N} \sum_{\kappa} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\kappa \in \Omega}, \\
 v_l &= \frac{1}{N} \sum_{\kappa} e^{i\kappa \cdot \mathbf{l}}, \quad \mathbf{l} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, 2\mathbf{g}, \mathbf{f}, \\
 u &= \frac{1}{N} \sum_{\kappa} C_{\kappa}, \\
 u_l &= \frac{1}{N} \sum_{\kappa} e^{i\kappa \cdot \mathbf{l}} C_{\kappa}, \quad \mathbf{l} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, 2\mathbf{g}, \mathbf{f}, \\
 w &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2} C_{\kappa_1 - \kappa_2}, \\
 w_l &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2} e^{-i\kappa_1 \cdot \mathbf{l}} C_{\kappa_1 - \kappa_2}, \quad \mathbf{l} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, 2\mathbf{g}, \\
 w_{l_1 l_2}^{(m)} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2} e^{-i\kappa_1 \cdot \mathbf{l}_1} e^{i\kappa_2 \cdot \mathbf{l}_2} C_{\kappa_1 - \kappa_2}, \quad \mathbf{l}_{1,2} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, 2\mathbf{g}, \mathbf{f}, \\
 m = 1: \quad \mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{l}_2 > 0, \quad m = 2: \quad \mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{l}_2 < 0, \quad m = 3: \quad \mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{l}_2 = 0, \\
 w_l^{(m)} &= w_{l_1 l_2}^{(m)} (l_1 = l_2), \\
 W_l^{(\tau)} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \rho} \exp[-i(\kappa_1 - \kappa_2) \cdot \rho] \exp(-i\kappa_2 \cdot \mathbf{l}) C_{\rho} C_{\rho - \mathbf{l}}, \quad \mathbf{l} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, 2\mathbf{g}, \\
 W_1^{(\tau)} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \rho} \exp[-i(\kappa_1 - \kappa_2) \cdot \rho] C_{\rho} C_{\rho - \mathbf{g}}, \\
 W_2^{(\tau)} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \rho} \exp[-i(\kappa_1 + \kappa_2) \cdot \mathbf{g}] \exp[-i(\kappa_1 - \kappa_2) \cdot \rho] C_{\rho} C_{\rho - \mathbf{g}}, \\
 W_3^{(\tau)} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \rho} \exp(-i\kappa_1 \cdot \mathbf{g}_x) \exp(-i\kappa_2 \cdot \mathbf{g}_y) C_{\rho} C_{\rho - \mathbf{g}}, \\
 W_{l_1}^{(J)} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2} \exp(i\kappa_2 \cdot \mathbf{l}) C_{\kappa_1 - \kappa_2} C_{\kappa_2}, \quad \mathbf{l} = \mathbf{g}, \mathbf{d},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{l2}^{(J)} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2} \exp[i(\kappa_1 - \kappa_2) \cdot \mathbf{l}] C_{\kappa_1 - \kappa_2} C_{\kappa_2}, \quad \mathbf{l} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, \\
W_{l3}^{(J)} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2} \exp(-i\kappa_2 \cdot \mathbf{g}) [\gamma_l(\kappa_2) - \gamma_l(\kappa_1 - \kappa_2)] C_{\kappa_1 - \kappa_2} C_{\kappa_2}, \quad \mathbf{l} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, \\
W_{l4}^{(J)} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2} [\gamma_l(\kappa_2) - \gamma_l(\kappa_1 - \kappa_2)] C_{\kappa_1 - \kappa_2} C_{\kappa_2}, \quad \mathbf{l} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, \\
W_l^{(J)} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2} \sum_{\mathbf{l}} \left[ \sum_{\rho} \exp(-i\kappa_1 \cdot \rho) (C_{\rho+\mathbf{l}} C_{\rho-\mathbf{g}} - C_{\rho} C_{\rho+\mathbf{l}-\mathbf{g}}) - \sum_{\rho} \exp[-i(\kappa_1 - \kappa_2) \cdot \rho] \times \right. \\
&\quad \left. \times \exp(-i\kappa_1 \cdot \mathbf{g}) C_{\rho} C_{\rho+\mathbf{l}+\mathbf{g}} + \sum_{\rho} \exp[-i(\kappa_1 - \kappa_2) \cdot \rho] \exp[-i\kappa_1 \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{g})] C_{\rho} C_{\rho+\mathbf{l}-\mathbf{g}} \right], \quad \mathbf{l} = \mathbf{g}, \mathbf{d}.
\end{aligned}$$

## ЛИТЕРАТУРА

1. B. O. Wells, Z. X. Shen, A. Matsuura et al., Phys. Rev. Lett. **74**, 964 (1995).
2. D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser et al., Phys. Rev. Lett. **76**, 4841 (1996).
3. F. Ronning, C. Kim, D. L. Feng et al., Science **282**, 2067 (1998).
4. J. G. Tobin, C. G. Olson, C. Gu et al., Phys. Rev. B **45**, 5563 (1992).
5. K. Gofron, J. C. Campuzano, H. Ding et al., J. Phys. Chem. Sol. **54**, 1193 (1993).
6. A. A. Abrikosov, J. C. Campuzano, and J. C. Gofron, Physica C **214**, 73 (1993).
7. D. S. Dessau, Z. X. Shen, D. M. King et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 278 (1993).
8. D. M. King, Z. H. Shen, D. S. Dessau et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 3298 (1994).
9. P. Aebi, J. Osterwalder, P. Schwaller et al., Phys. Rev. Lett. **72**, 2757 (1994).
10. V. Borisenko, M. S. Golden, S. Legner et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 4453 (2000).
11. A. P. Kampf and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. B **42**, 7967 (1990).
12. A. G. Loeser, Z. X. Shen, D. S. Dessau et al., Science **273**, 325 (1996).
13. H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano et al., Nature **382**, 51 (1996).
14. H. Ding, M. R. Norman, T. Yokoya et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 2628 (1997).
15. M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria et al., Nature **392**, 157 (1998).
16. K. J. Szczepanski, P. Horsch, W. Stephan, and M. Ziegler, Phys. Rev. B **41**, 2017 (1990).
17. E. Dagotto, R. Joynt, A. Moero et al., Phys. Rev. B **41**, 9049 (1990).
18. D. Duffy, A. Nazarenko, S. Haas et al., Phys. Rev. B **56**, 5599 (1997).
19. C. L. Kane, P. A. Lee, and N. Read, Phys. Rev. B **39**, 6880 (1989).
20. G. Martinez and P. Horsch, Phys. Rev. B **44**, 317 (1991).
21. T. Toyama, Y. Sibata, S. Maekawa et al., J. Phys. Soc. Jap. **69**, 9 (2000).
22. J. Bala and A. M. Oleś, Phys. Rev. B **61**, 6907 (2000).
23. R. Eder and K. Becker, Z. Phys. B **78**, 219 (1990).
24. A. V. Chubukov and D. K. Morr, Phys. Rep. **288**, 355 (1997).
25. C. E. Carneiro, M. J. De Oliveira, S. R. A. Salinas, and G. V. Uimin, Physica C **166**, 206 (1990).
26. R. Hayn, A. F. Barabanov, and J. Schulenburg, Z. Phys. B **102**, 359 (1997).
27. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, Э. Жасинас, Р. О. Кузьян, Л. А. Максимов, ЖЭТФ **83**, 819 (1996); A. F. Barabanov, R. O. Kuzian, L. A. Maksimov et al., J. Phys. Cond. Matter **3**, 9129 (1991); Physica C **252**, 308 (1995); **212**, 375 (1993).
28. Y. Sibata, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. B **59**, 1840 (1999).
29. R. Eder, Y. Ohta, and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **55**, R3414 (1997).
30. C. Kim, P. J. White, Z. X. Shen et al., Phys. Rev. Lett. **80**, 4245 (1998).

31. W. Yin, C. Gong, and P. Leung, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2534 (1998).
32. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев, and А. М. Belemouk, *Phys. Lett. A* **265**, 221 (2000); А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев, *ДАН* **44**, 188 (1999); *Письма в ЖЭТФ* **68**, 412 (1998).
33. V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
34. V. J. Emery and G. Reiter, *Phys. Rev. B* **38**, 4547 (1988).
35. А. Ф. Барабанов, Э. Жасинас, О. В. Уразаев, Л. А. Максимов, *Письма в ЖЭТФ* **66**, 182 (1997).
36. R. O. Kuzian, R. Наун, А. Ф. Barabanov, and L. A. Maksimov, *Phys. Rev. B* **58**, 6194 (1998).
37. G. Shirane, Y. Endoh, R. J. Birgenau et al., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 161 (1987).
38. M. Inui, S. Doniach, and M. Gabay, *Phys. Rev. B* **38**, 6631 (1988).
39. J. F. Annet, R. M. Martin, A. K. McMahan, and S. Satpathy, *Phys. Rev. B* **40**, 2620 (1989).
40. S. Bacci, E. Gagliano, and F. Nori, *Int. J. Mod. Phys. B* **5**, 325 (1991).
41. A. Moreo, E. Dagotto, T. Jolicoeur, and J. Riera, *Phys. Rev. B* **42**, 6283 (1990).
42. J. R. Schrieffer, *J. Low. Temp. Phys.* **99**, 397 (1995).
43. P. Prelovshak, *Phys. Lett. A* **126**, 287 (1988).
44. A. Ramsak and P. Prelovshak, *Phys. Rev. B* **42**, 10415 (1990).
45. J. Zaanen and A. M. Oleś, *Phys. Rev. B* **37**, 9423 (1988).
46. M. S. Hybertsen, M. Schlüter, and N. E. Christensen, *Phys. Rev. B* **39**, 9028 (1989).
47. K. T. Park, K. Terakura, T. Oguchi et al., *J. Phys. Soc. Jap.* **57**, 3445 (1988).
48. A. K. McMahan, R. M. Martin, and S. Satpathy, *Phys. Rev. B* **38**, 6650 (1988).
49. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, *ЖЭТФ* **79**, 627 (1994); А. Ф. Barabanov, V. M. Berezovskii, *J. Phys. Soc. Jap.* **63**, 3974 (1994); *Phys. Lett. A* **186**, 175 (1994).
50. Y. Takahashi, *Z. Phys. B* **71**, 425 (1988).
51. M. S. Golden, V. Borisenko, S. Legner et al., in *Adv. Sol. St. Phys.*, ed. by B. Kramer (2000), Vol. 40, p. 697.
52. S. Lenger, V. Borisenko, C. Dürr et al., *Phys. Rev. B* **62**, 154 (2000).
53. V. G. Grigoryan, G. Paasch, and S. L. Drechsler, *Phys. Rev. B* **60**, 1340 (1999).
54. H. Shimahara, *J. Phys. Soc. Jap.* **62**, 1317 (1993).