

Энергия основного состояния в $B-B'-U$ -модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций

© Г.И. Миронов

Марийский государственный педагогический институт,
424002 Йошкар-Ола, Россия
E-mail: mir@mgpi.mari.ru

(Поступила в Редакцию 13 февраля 2001 г.
В окончательной редакции 13 июня 2001 г.)

В приближении статических флуктуаций вычислена энергия основного состояния двухподрешеточной двумерной модели Хаббарда с учетом переноса электронов от узла ко второму ближайшему соседнему узлу. В частном случае вычислена энергия одномерной модели Хаббарда и проведено сравнение с точным решением.

1. Для объяснения некоторых свойств высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) как в сверхпроводящем, так и в нормальном состоянии возникает необходимость учета помимо медно-кислородных интегралов перескока B еще и интегралов перескока B' между ближайшими кислородными атомами. Качественные рассуждения показывают, что учет кислород-кислородного переноса дырок должен повлиять на характеристики системы, которые используются при описании физических свойств ВТСП. Поэтому весьма актуальной задачей является вычисление характеристик системы с учетом возможности переноса электронов (либо дырок) на следующий за ближайшим узел кристаллической решетки.

В [1,2] была разработана методика решения $B-B'-U$ -модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций, в [2] исследована зависимость энергетического спектра и намагниченности системы от величины интеграла переноса B' на второй по близости соседний узел в случае двумерной бипартитной модели Хаббарда [3,4].

Цель настоящей работы — вычисление и исследование энергии основного состояния $B-B'-U$ -модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций.

2. Гамильтониан $B-B'-U$ -двумерной бипартитной модели Хаббарда имеет вид (в отличие от стандартной модели Хаббарда по аналогии с моделью Эмери полагается, что решетка состоит из двух подрешеток, формируемых атомами разных сортов; кроме того, учитывается переход электронов на второй по близости соседний атом кристаллической решетки)

$$H = H_0 + V, \quad (1)$$

$$H_0 = \sum_{\sigma, f \in A} \varepsilon_1 n_{f\sigma} + \sum_{\sigma, l \in C} \varepsilon_2 n_{l\sigma} + \sum_{\sigma, f, l} B_{fl} (a_{f\sigma}^+ a_{l\sigma} + a_{l\sigma}^+ a_{f\sigma}) + \sum_{\sigma, l', l} B_{l'l} a_{l'\sigma}^+ a_{l\sigma}, \quad (2)$$

$$V = \frac{U_1}{2} \sum_{\sigma, f \in A} n_{f\sigma} n_{f\bar{\sigma}} + \frac{U_2}{2} \sum_{\sigma, f \in C} n_{f\sigma} n_{f\bar{\sigma}}, \quad (3)$$

где $a_{j\sigma}^+$, $a_{j\sigma}$ — Ферми-операторы рождения и уничтожения электронов на узле j ($j = f, l$) решетки со

спином σ ; $n_{f\sigma} = a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma}$; ε_1 (ε_2) — собственная энергия электрона на узле подрешетки A (C); $B_{fl} = B(f-l)$, $B_{l'l} = B(l'-l)$ — интегралы переноса, описывающие перескоки электронов за счет кинетической энергии кристаллического поля на ближайший соседний узел и на второй ближайший узел соответственно; $\bar{\sigma} = -\sigma$; U_1 (U_2) — энергия кулоновского отталкивания двух электронов, находящихся на узле подрешетки A (C). Для того чтобы приблизить поведение системы, описываемое гамильтонианом (1), к ситуации, возникающей при движении дырок на CuO_2 -плоскостях в ВТСП-соединениях, полагается, что лишь электроны одной подрешетки (по аналогии с кислородом на CuO_2 -плоскостях) могут переноситься по диагонали квадрата на узлы этой же подрешетки (подчеркнем, что для простоты рассуждений рассматривается гипотетическая квадратная решетка).

3. В [2] были получены решения для операторов рождения электронов в представлении Гейзенберга, определяющих эволюцию системы, в виде

$$a_{k\sigma}^+(\tau) = \left\{ \left[a_{k\sigma}^+(0) [((\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k) \text{sh}(t_k\tau) + \text{ch}(t_k\tau)] + b_{k\sigma}^+(0) \text{sh}(t_k\tau) B_k/t_k \right] \text{ch}(U_1\Phi\tau) + \left[\Delta n_{1\bar{\sigma}} a_{k\sigma}^+(0) [((\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k) \text{sh}(t_k\tau) + \text{ch}(t_k\tau)] + \Delta n_{1\bar{\sigma}} b_{k\sigma}^+(0) \text{sh}(t_k\tau) B_k/t_k \right] \text{sh}(U_1\Phi\tau) / \Phi \right\} \times \exp(\tau(\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2), \quad (4)$$

$$b_{k\sigma}^+(\tau) = \left\{ \left[b_{k\sigma}^+(0) [((\varepsilon'_{2k} - \varepsilon'_1)/2t_k) \text{sh}(t_k\tau) + \text{ch}(t_k\tau)] + a_{k\sigma}^+(0) \text{sh}(t_k\tau) B_k/t_k \right] \text{ch}(U_2\Phi\tau) + \left[\Delta n_{2\bar{\sigma}} b_{k\sigma}^+(0) [((\varepsilon'_{2k} - \varepsilon'_1)/2t_k) \text{sh}(t_k\tau) + \text{ch}(t_k\tau)] + \Delta n_{2\bar{\sigma}} a_{k\sigma}^+(0) \text{sh}(t_k\tau) B_k/t_k \right] \text{sh}(U_2\Phi\tau) / \Phi \right\} \times \exp(\tau(\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2), \quad (5)$$

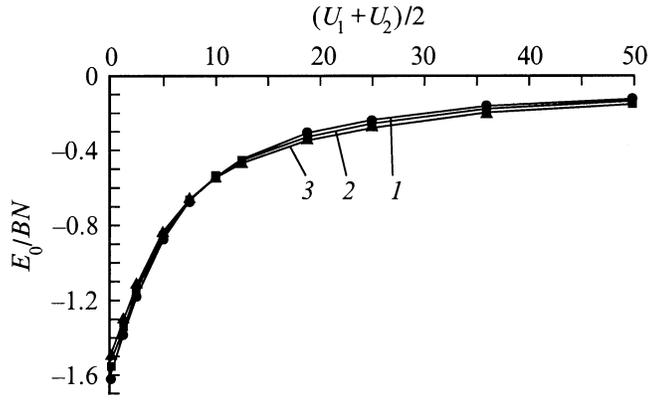


Рис. 1. Энергия основного состояния E_0 как функция $(U_1 + U_2)/2$ при $n = 1$, $B = 1.5\text{eV}$, $T = 0$, $B' = 0$ (1), $-0.3B$ (2), $-0.45B$ (3).

где

$$\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + (U_1 + U_2)/2 + \sigma S(U_1 - U_2) - 4B' \cos(k_x a) \cos(k_y a),$$

$$\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k} = \varepsilon_1 - \varepsilon_2 + (U_1 - U_2)/2 + \sigma S(U_1 + U_2) + 4B' \cos(k_x a) \cos(k_y a).$$

Остальные обозначения те же, что и в [2].

Вычислим с помощью (4), (5) энергию основного состояния (среднюю энергию модели Хаббарда $E_0 = \langle H \rangle$ при температуре $T \rightarrow 0$).

Следуя методике, изложенной в [2], вычислим антикоммутаторные функции Грина следующего вида:

$$\langle a_{k\sigma}^+ | b_{k\sigma} \rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{4} \frac{B_k}{t_k} \left\{ \frac{1}{E - U_1 \Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} + \frac{1}{E + U_1 \Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} - \frac{1}{E - U_1 \Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} - \frac{1}{E + U_1 \Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} \right\}. \quad (6)$$

Для антикоммутаторной функции Грина $\langle b_{k\sigma}^+ | a_{k\sigma} \rangle_E$ можно получить выражение, аналогичное (6), с заменой $U_1 \rightarrow U_2$. Для учета вклада энергии кулоновского отталкивания (3) в энергию основного состояния нам необходимо также вычислить антикоммутаторные функции Грина $\langle a_{k+k_1-k_2\downarrow}^+ | a_{k_1\downarrow}(0) a_{k_2\uparrow}^+(0) a_{k\uparrow}(0) \rangle_E$, $\langle b_{k+k_1-k_2\downarrow}^+ | b_{k_1\downarrow}(0) b_{k_2\uparrow}^+(0) b_{k\uparrow}(0) \rangle_E$, для электронов разных подсистем и просуммировать по всем возможным значениям k_1, k_2, k в пределах первой зоны Бриллюэна.

Из (4) можно получить, что

$$\begin{aligned} & \frac{2U}{N} \sum_{k_1, k_2, k} \langle a_{k+k_1-k_2\uparrow}^+ | a_{k_1\uparrow}(0) a_{k_2\downarrow}^+(0) a_{k\downarrow}(0) \rangle_E \\ &= \frac{i}{2\pi} \frac{U}{4} \sum_{k_1, k} \langle a_{k_1\downarrow}^+ a_{k_1\downarrow} \rangle \left\{ \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E - U_1 \Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} + \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E + U_1 \Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} + \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E - U_1 \Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} + \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E + U_1 \Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} \right\} \\ &+ \frac{i}{2\pi} \frac{U}{4\Phi} \sum_{k_1, k} \langle \Delta n_{1\downarrow} a_{k_1\downarrow}^+ a_{k_1\downarrow} \rangle \\ &\times \left\{ \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E - U_1 \Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} - \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E + U_1 \Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} + \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E - U_1 \Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} - \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E + U_1 \Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} \right\}. \quad (7) \end{aligned}$$

Аналогичное выражение можно получить и для функции Грина $\langle b_{k+k_1-k_2\downarrow}^+ | b_{k_1\downarrow}(0) b_{k_2\uparrow}^+(0) b_{k\uparrow}(0) \rangle_E$, но ввиду громоздкости мы его выписывать не будем.

Рассмотрим случай, когда в среднем на каждый узел кристаллической решетки приходится один электрон ($n = 1$), обобщение на случай произвольного значения концентрации электронов n производится несложным образом. С помощью флуктуационно-диссипационной теоремы из (6), (7) можно получить следующее выражение для средней энергии системы:

$$E_0 = \langle H_0 \rangle + \langle V \rangle, \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \langle H_0 \rangle = & - \sum_{k, \sigma} \frac{B_k^2}{4t_k} \left\{ f^+ \left(U_1 \Phi - t_k - \frac{B'_k + \sigma S(U_1 - U_2)}{2} \right) + f^+ \left(U_1 \Phi - t_k + \frac{B'_k + \sigma S(U_1 - U_2)}{2} \right) + f^+ \left(U_2 \Phi - t_k - \frac{B'_k + \sigma S(U_1 - U_2)}{2} \right) + f^+ \left(U_2 \Phi - t_k + \frac{B'_k + \sigma S(U_1 - U_2)}{2} \right) \right\}, \quad (9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle V \rangle = & \frac{U_1}{8N} \sum_k \left\{ \left(1 + \frac{S(U_1 + U_2) - B'_k}{2t_k} \right) \right. \\
& \times f^+ \left(t_k - U_1 \Phi + \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2} \right) + \left(1 - \frac{S(U_1 + U_2) - B'_k}{2t_k} \right) \\
& \times \left[1 + f^+ \left(U_1 \Phi - t_k + \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2} \right) \right] \left. \right\} \\
& \times \sum_p \left\{ \left(1 - \frac{S(U_1 + U_2) + B'_p}{2t_p} \right) \right. \\
& \times f^+ \left(t_p - U_p \Phi + \frac{B'_p - S(U_1 - U_2)}{2} \right) + \left(1 + \frac{S(U_1 + U_2) + B'_p}{2t_p} \right) \\
& \times \left[1 + f^+ \left(U_1 \Phi - t_p + \frac{B'_p - S(U_1 - U_2)}{2} \right) \right] \left. \right\} \\
& + \frac{U_2}{8N} \sum_k \left\{ \left(1 - \frac{S(U_1 + U_2) - B'_k}{2t_k} \right) \right. \\
& \times f^+ \left(t_k - U_2 \Phi + \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2} \right) + \left(1 + \frac{S(U_1 + U_2) - B'_k}{2t_k} \right) \\
& \times \left[1 + f^+ \left(U_2 \Phi - t_k + \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2} \right) \right] \left. \right\} \\
& \times \sum_p \left\{ \left(1 + \frac{S(U_1 + U_2) + B'_p}{2t_p} \right) \right. \\
& \times f^+ \left(t_p - U_2 \Phi + \frac{B'_p - S(U_1 - U_2)}{2} \right) + \left(1 - \frac{S(U_1 + U_2) + B'_p}{2t_p} \right) \\
& \times \left[1 + f^+ \left(U_2 \Phi - t_p + \frac{B'_p - S(U_1 - U_2)}{2} \right) \right] \left. \right\} \\
& - \frac{U_1 \Phi}{4} \sum_k \left[\left(1 + \frac{S(U_1 + U_2) - B'_k}{2t_k} \right) \right. \\
& \times f^+ \left(t_k - U_1 \Phi + \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2} \right) + \left(1 - \frac{S(U_1 + U_2) - B'_k}{2t_k} \right) \\
& \times f^+ \left(t_k - U_1 \Phi - \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2} \right) \left. \right] \\
& - \frac{U_2 \Phi}{4} \sum_k \left[\left(1 - \frac{S(U_1 + U_2) - B'_k}{2t_k} \right) \right. \\
& \times f^+ \left(t_k - U_2 \Phi + \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2} \right) + \left(1 + \frac{S(U_1 + U_2) - B'_k}{2t_k} \right) \\
& \times f^+ \left(t_k - U_2 \Phi - \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2} \right) \left. \right]. \quad (10)
\end{aligned}$$

В приведенных выражениях (9), (10) $f^+x = (1 + \exp(\beta x))^{-1}$ — распределение Ферми, $\Phi = \sqrt{0.25 - S^2}$,

суммирование по k и p производится в пределах первой зоны Бриллюэна, $B_k = -2B[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$, $B'_k = -4B' \cos(k_x a) \cos(k_y a)$.

На рис. 1 приведена зависимость энергии основного состояния E_0 от $(U_1 + U_2)/2$ для трех значений интеграла переноса на второй ближайший соседний узел (по диагонали квадрата). Анализ этих зависимостей показывает, что в случае сильных корреляций энергия основного состояния понижается при $B' < 0$ по мере увеличения величины интеграла переноса на второй по близости соседний узел. Это связано с тем, что в случае сильных корреляций учет интеграла переноса B' приводит к делокализации электронов, в результате чего общая энергия системы понижается. В случае слабых корреляций, наоборот, энергия основного состояния повышается — из-за того, что коллективизированные вследствие малости энергии кулоновского взаимодействия электроны при учете интеграла переноса B' проявляют тенденцию к локализации.

4. Сравним наши результаты с полученными ранее. В [5] было найдено точное выражение для энергии основного состояния одномерной модели Хаббарда. Для того чтобы полученные результаты сравнить с результатом [5], выведем из (8), (9) в частном случае выражение для энергии основного состояния одномерной модели Хаббарда, полагая $U_1 = U_2 = U$, $B_k = -2B \cos(k_x a)$, $B'_k = 0$:

$$\begin{aligned}
\frac{E_0}{BN} = & -\frac{2}{BN} \sum_k \frac{B_k^2}{t_k} f^+(U\Phi - t_k) \\
& + \frac{U}{4B} \left\{ 1 - \left[\frac{2}{N} \sum_k \frac{SU}{t_k} f^+(U\Phi - t_k) \right]^2 \right\} \\
& - \frac{u\Phi}{BN} \sum_k f^+(-U\Phi + t_k). \quad (11)
\end{aligned}$$

На рис. 2 приведена зависимость энергии основного состояния от отношения U/B в трех разных случаях — точного вычисления E_0 Либа и Ву [5], вычисления энергии основного состояния по формуле (11) с учетом зависимости спина S от величины кулоновского потенциала U и вычисления E_0 по формуле (11) в случае спина $S = 1/2$. Анализ графиков зависимостей энергии E_0 от U/B показывает, что в пределе $U = 0$ и ∞ энергии, вычисленные по формуле (11) и в случае точного решения, совпадают; качественно точное решение и решение в приближении статических флуктуаций ведут себя одинаково. Имеется весьма неплохое качественное совпадение точного и приближенного решений: например, при $U/B = 4$ отношение $((E_0 - E_{0\text{exact}})/E_{0\text{exact}})$, играющее роль относительной погрешности, порядка 18%, тогда как при $U/B = 2$ это отношение порядка 2%. Таким образом, сравнение точного и приближенного решений свидетельствует о том, что приближение статических флуктуаций довольно адекватно описывает поведение рассматриваемой модели Хаббарда как в области слабых, так и в области сильных корреляций. В области

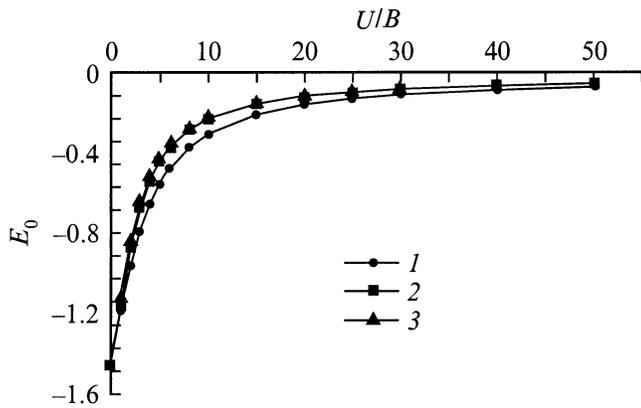


Рис. 2. Энергия основного состояния E_0 как функция U/B при $n = 1$, $T = 0$: 1 — точное решение [5], 2 — вычисление по формуле (11) с учетом зависимости S от величины кулоновского потенциала U , 3 — вычисление по формуле (11) при $S = 1/2$.

промежуточных корреляций в приближении статических флуктуаций происходит, по-видимому, переоценка роли кулоновского взаимодействия. Самосогласованный учет зависимости спина S от величины кулоновского потенциала снижает величину переоценки роли кулоновского взаимодействия (кривая 2 на рис. 2).

Отметим, что в случае сильных корреляций энергия основного состояния антиферромагнитной фазы оказалась ниже энергии парамагнитной фазы. Аналогичный результат был получен в [6] вариационным методом. В случае слабых корреляций при низких температурах (вблизи $T = 0$ К) в рамках выбранного приближения имеется определенная тенденция к понижению энергии парамагнитного состояния по сравнению с энергией антиферромагнитной фазы; например, при $U/B = 1$ отношение $\left| \frac{E_0^{\text{PM}} - E_0^{\text{AFM}}}{E_0^{\text{PM}}} \right| = 4\%$, где E_0^{PM} , E_0^{AFM} — средние энергии системы в парамагнитной и антиферромагнитной фазах соответственно. Поэтому можно высказать предположение, что при низких температурах возможен переход антиферромагнитный диэлектрик–парамагнитный диэлектрик при уменьшении величины кулоновского потенциала U (мы рассматриваем случай половинного заполнения). По-видимому, уменьшение величины U при постоянной низкой температуре аналогично повышению температуры при постоянной величине U . Что касается магнитной структуры основного состояния ($T = 0$ К) в режиме слабых корреляций, то необходимо его исследование с учетом природы элементарных возбуждений при $t = 0$ [7–11].

Таким образом, предложенная в работах [1,2] методика расчета антикоммутирующей функции Грина в приближении статических флуктуаций позволяет исследовать энергетический спектр $B-B'-U$ -модели Хаббарда и намагниченность системы [2], а также производить вычисление энергии основного состояния. Учет переноса на второй по близости соседний узел влияет на поведение энергии основного состояния модели Хаббарда.

Автор выражает благодарность Р.Р. Нигматуллину за неоценимую поддержку и внимание к работе.

Список литературы

- [1] Г.И. Миронов. ФТТ **39**, 9, 1594 (1997).
- [2] Г.И. Миронов. ФТТ **41**, 6, 951 (1999).
- [3] V.I. Belinicher, A.L. Chernyshev. Phys. Rev. **B49**, 14, 9746 (1994).
- [4] F. Onufrieva, J. Rossat-Mignod. Phys. Rev. **B52**, 10, 7572 (1995).
- [5] H. Lieb, F. Wu. Phys. Rev. Lett. **20**, 25, 1445 (1968).
- [6] Ю.Б. Кудасов. ЖЭТФ **117**, 3, 624 (2000).
- [7] J. Carnelo, A.A. Ovchinnikov. J. Phys.: Cond. Matter **3**, 757 (1991).
- [8] H. Frahm, V.E. Korepin. Phys. Rev. **B43**, 7, 5663 (1991).
- [9] J. Solyom. Adv. Phys. **28**, 2, 202 (1979).
- [10] A.E. Mattson, S. Eggert, H. Jahanesson. Preprint cond-mat/9711204 (1997).
- [11] H. Tasaki. Preprint cond-mat/9707286 (1997).