

ОБ ЭФФЕКТИВНЫХ ГАМИЛЬТониАНАХ ДЛЯ МОДЕЛИ ХАББАРДА В РЕЖИМЕ СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ¹

В.В.Вальков, В.А.Мицкан*

На основе точного решения задачи об энергетическом спектре двухэлектронной системы в модели Хаббарда, $t - J$ и $t - J^$ моделях проанализирована корректность перехода к эффективному гамильтониану. Показано, что в режиме сильных электронных корреляций обоснованность перехода имеет место только по отношению к $t - J^*$ модели. При этом $t - J^*$ модель правильно воспроизводит низкоэнергетическую часть спектра лишь для $|t| < U/8$.*

Большая часть работ по теории высокотемпературной сверхпроводимости основана на механизмах, связанных с сильными электронными корреляциями (см., например [?]-[?]). Этим объясняется значительная популярность модели Хаббарда [?], гамильтониан которой может быть записан в виде

$$\hat{H} = \varepsilon \sum_{f\sigma} a_{f\sigma}^{\dagger} a_{f\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} a_{f\sigma}^{\dagger} a_{m\sigma} + U \sum_f \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow}, \quad \hat{n}_{f\sigma} = a_{f\sigma}^{\dagger} a_{f\sigma}, \quad (1)$$

где $a_{f\sigma}$, $(a_{f\sigma}^{\dagger})$ - фермиевские операторы рождения (уничтожения) электрона на узле f с проекцией спинового момента σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$); ε - значение энергии одноэлектронного состояния; t_{fm} - интегралы перескоков электронов с узла m на узел f ; U - параметр кулоновского отталкивания двух электронов с противоположными значениями проекций спиновых моментов, находящихся на одном узле; $\hat{n}_{f\sigma}$ - оператор числа электронов с проекцией спинового момента σ , находящихся на узле f .

В режиме сильных электронных корреляций, когда параметр кулоновского отталкивания U много больше абсолютных значений интегралов перескоков t_{fm} , а число электронов в расчете на один узел не превышает единицу, обычно переходят к описанию модели Хаббарда в рамках эффективного гамильтониана H_{eff} . Гильбертово пространство, в котором действует H_{eff} , не содержит двоичных состояний, т.е. состояний двух электронов с противоположными значениями проекций спиновых моментов, находящихся на одном узле. При этом в эффективном гамильтониане появляются дополнительные слагаемые, описывающие новые (по сравнению с исходной моделью Хаббарда) взаимодействия.

Построение эффективного гамильтониана может быть реализовано либо на основе унитарного преобразования [?], либо с помощью операторной формы теории возмущений [?, ?]. При этом с квадратичной по (t_{fm}/U) точностью H_{eff} в представлении операторов Хаббарда может быть записан в виде

$$\hat{H}_{eff} = \varepsilon \sum_{f\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \sum_{fmg\sigma} \frac{t_{fm} t_{mg}}{U} (X_f^{\bar{\sigma} 0} X_m^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma} - X_f^{\bar{\sigma} 0} X_m^{\sigma\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}}). \quad (2)$$

Операторы Хаббарда вводятся обычным образом (см., например [?]): $X^{pp'} = |p\rangle\langle p'|$, где $|p\rangle, |p'\rangle$ - собственные функции одноузельного гамильтониана. Действие операторов Хаббарда поясним следующим образом. При умножении оператора Хаббарда $X^{pp'}$ на состояние $|p'\rangle$ возникает новое состояние $|p\rangle$. Имея это в виду, говорят, что оператор Хаббарда $X^{pp'}$ изменяет одноузельное состояние с $|p'\rangle$ на $|p\rangle$. Умножение операторов Хаббарда, относящихся к одному узлу, осуществляется по правилу: $X_f^{pp'} X_f^{qq'} = \delta_{p'q} X_f^{pq}$. На разных узлах квазифермиевские операторы антикоммутируют, квазибозевские и квазибозевские с квазифермиевскими - коммутируют.

В исходной модели Хаббарда принимается во внимание, что одноузельное состояние системы может быть одним из следующих: 1) $|0\rangle$ - вакуумное состояние, т.е. состояние, не содержащее электронов; 2) $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ - состояния с одним электроном с проекцией спинового момента σ ; 3) $|2\rangle$ - двоичное состояние (двойка) описывает ситуацию, когда на узле находятся два электрона с разными проекциями спиновых моментов.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Программы П.3. Отделения физических наук, РФФИ (грант 03-02-16124), РФФИ+ККФН "Енисей" (грант 02-02-97705), а также Лаврентьевского конкурса молодежных проектов СО РАН.

* © В.В.Вальков, Институт физики им. Л.В.Киренского СО РАН, vvv@iph.krasn.ru; В.А.Мицкан, Красноярский государственный университет, mitskan@iph.krasn.ru, 2004.

В случае одноорбитальных систем представление фермиевских операторов через операторы Хаббарда записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} a_{f\sigma}^+ &= X_f^{\sigma 0} + \eta(\sigma) X^{2\bar{\sigma}} \\ a_{f\sigma} &= X_f^{0\sigma} + \eta(\sigma) X^{\bar{\sigma} 2} \end{aligned} \quad , \text{ где } \eta(\sigma) = \begin{cases} 1, & \text{при } \sigma = \uparrow \\ -1, & \text{при } \sigma = \downarrow \end{cases} . \quad (3)$$

Часто при использовании эффективного гамильтониана в последнем слагаемом (??) оставляют только те члены суммы, которые возникают, если $f = g$, предполагая, что слагаемые с $f \neq g$ (трехцентровые слагаемые — $\hat{H}_{(3)}$) дают малый вклад в дисперсионные зависимости энергетического спектра [?]. Тогда, введя обозначение $J_{fm} = 2t_{fm}t_{mf}/U$, получают гамильтониан $t - J$ модели:

$$\hat{H}_{t-J} = \varepsilon \sum_{f\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{f m \sigma} t_{f m} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{f m \sigma} J_{f m} (X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} - X_f^{\sigma\sigma} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}). \quad (4)$$

Учитывая результаты работ [?, ?, ?], показавших нетривиальную роль трехцентровых слагаемых при формировании сверхпроводящей фазы, представляется интересным проанализировать роль этих слагаемых при установлении соответствия исходной модели Хаббарда моделям, описываемым посредством H_{eff} .

С этой целью рассмотрим точно решаемую задачу об энергетическом спектре двух электронов, движущихся по квадратной решетке. В начале получим решение этой задачи в рамках исходной модели Хаббарда.

Задача двух тел в модели Хаббарда

Гамильтониан модели Хаббарда запишем в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_t + \hat{H}_U, \quad (5)$$

введя следующие обозначения:

$$\hat{H}_0 = \varepsilon \sum_{f\sigma} a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma}, \quad \hat{H}_t = \sum_{f m \sigma} t_{f m} a_{f\sigma}^+ a_{m\sigma}, \quad \hat{H}_U = U \sum_f \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow}. \quad (6)$$

Точную функцию двух электронов представим в виде суперпозиции состояний, соответствующих нахождению двух электронов с противоположными проекциями спиновых моментов на разных узлах, а также состояний, когда два электрона находятся на одном узле:

$$|\psi\rangle = \sum_{m n} C_{m n} a_{m\uparrow}^+ a_{n\downarrow}^+ |0\rangle. \quad (7)$$

Два электрона могут обладать суммарным спиновым моментом $S=1$ и $S=0$ (триплетное и синглетное состояния соответственно). Нетрудно убедиться, что для синглетного состояния $C_{mn} = C_{nm}$, а в случае триплетного — $C_{mn} = -C_{nm}$. Видно, что в триплетном состоянии волновая функция формируется в виде суперпозиции, не содержащей доек ($C_{mm} = 0$). В результате получается спектр свободных электронов, что вполне естественно, т.к. частицы взаимодействуют только находясь на одном узле. Имея в виду это обстоятельство, остановимся на рассмотрении только синглетного случая.

Принимая во внимание алгебру фермиевских операторов, находим:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 |\psi\rangle &= 2\varepsilon \sum_{m n} C_{m n} a_{m\uparrow}^+ a_{n\downarrow}^+ |0\rangle; \\ \hat{H}_t |\psi\rangle &= \sum_{f m n} (C_{m n} t_{f m} + C_{f m} t_{m n}) a_{f\uparrow}^+ a_{n\downarrow}^+ |0\rangle; \\ \hat{H}_U |\psi\rangle &= U \sum_n C_{n n} a_{n\uparrow}^+ a_{n\downarrow}^+ |0\rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

При этом уравнение Шредингера $H |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ принимает следующий вид:

$$\sum_{m n} \left[2\varepsilon C_{m n} + \sum_f (C_{f n} t_{f m} + C_{f m} t_{f n}) + U \delta_{m n} \right] a_{m\uparrow}^+ a_{n\downarrow}^+ |0\rangle = E \sum_{m n} C_{m n} a_{m\uparrow}^+ a_{n\downarrow}^+ |0\rangle. \quad (9)$$

Домножая (??) справа на $\langle 0| a_{p\downarrow} a_{q\uparrow}$ и учитывая, что

$$\langle 0| a_{p\downarrow} a_{q\uparrow} a_{m\uparrow}^+ a_{n\downarrow}^+ |0\rangle = \delta_{pn} \delta_{qm}, \quad (10)$$

получаем уравнение для определения неизвестных коэффициентов C_{mn} :

$$(E - 2\varepsilon - \delta_{mn}U) C_{mn} = \sum_f (C_{fn} t_{mf} + C_{mf} t_{nf}). \quad (11)$$

Для решения полученной системы уравнений воспользуемся преобразованием Фурье:

$$\begin{aligned} C_{mn} &= \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i\frac{k}{2}(m+n)} \sum_q e^{iq(m-n)} C_k(q); \quad t_{fm} = \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(f-m)} t_k, \quad t_k = \sum_R e^{-ikR} t_R, \\ \sum_f (C_{fn} t_{mf} + C_{mf} t_{nf}) &= \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i\frac{k}{2}(m+n)} \sum_q e^{iq(m-n)} C_k(q) \left(t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} \right), \\ \delta_{mn} C_{mn} &= \frac{1}{N^2} \sum_k e^{i\frac{k}{2}(m+n)} \sum_q e^{iq(m-n)} \frac{1}{N} \sum_p C_k(p). \end{aligned} \quad (12)$$

С учетом этих преобразований уравнение (??) запишем в виде

$$(E - 2\varepsilon) C_k(q) - U \frac{1}{N} \sum_p C_k(p) = C_k(q) \left(t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} \right). \quad (13)$$

Из этого уравнения получим интегральное уравнение относительно $C_k(q)$:

$$C_k(q) = \frac{U}{\left[E - 2\varepsilon - \left(t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} \right) \right]} \frac{1}{N} \sum_p C_k(p). \quad (14)$$

Вводя обозначение

$$\mathbf{X}_k = \sum_p C_k(p), \quad (15)$$

после суммирования (??) по q находим:

$$\mathbf{X}_k = U \mathbf{X}_k \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{\left[E - 2\varepsilon - \left(t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} \right) \right]}. \quad (16)$$

Как видно из (??), равенство нулю \mathbf{X}_k равносильно $C_{mm} = 0$. Но отсутствие двоичных состояний имеет место только для триплетного решения. В случае же синглетного состояния двоичные состояния с необходимостью присутствуют, и поэтому $\mathbf{X}_k \neq 0$. Тогда, разделив обе части (??) на \mathbf{X}_k , получим дисперсионное уравнение для определения собственных значений энергий двух электронов в модели Хаббарда:

$$\frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{E - 2\varepsilon - \left(t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} \right)} = \frac{1}{U}. \quad (17)$$

Это уравнение имеет достаточно типичный вид для задачи двух тел. Качественная структура его графического решения продемонстрирована на рис. 1. Как обычно в интервале $(E - 2\varepsilon) \in (-8|t|, 8|t|)$ образуется квазинепрерывный спектр, практически совпадающий с решением для свободных электронов (в пределе большого N). Поскольку $U > 0$, в области $E + 2\varepsilon > 8|t|$ имеется одно антисвязанное состояние с энергией E_a .

Для нахождения этого значения энергии в (??) проведем в явном виде интегрирование по квазиимпульсу q . При этом уравнение, определяющее зависимость энергии E_a антисвязанного состояния от компонент суммарного квазиимпульса, примет следующий вид:

$$\frac{1}{U} = \left(\frac{2}{\pi} \right) \left\{ (E_a - 2\varepsilon)^2 - 16t^2 \left(\cos \frac{k_x}{2} - \cos \frac{k_y}{2} \right)^2 \right\}^{-1/2} K(m). \quad (18)$$

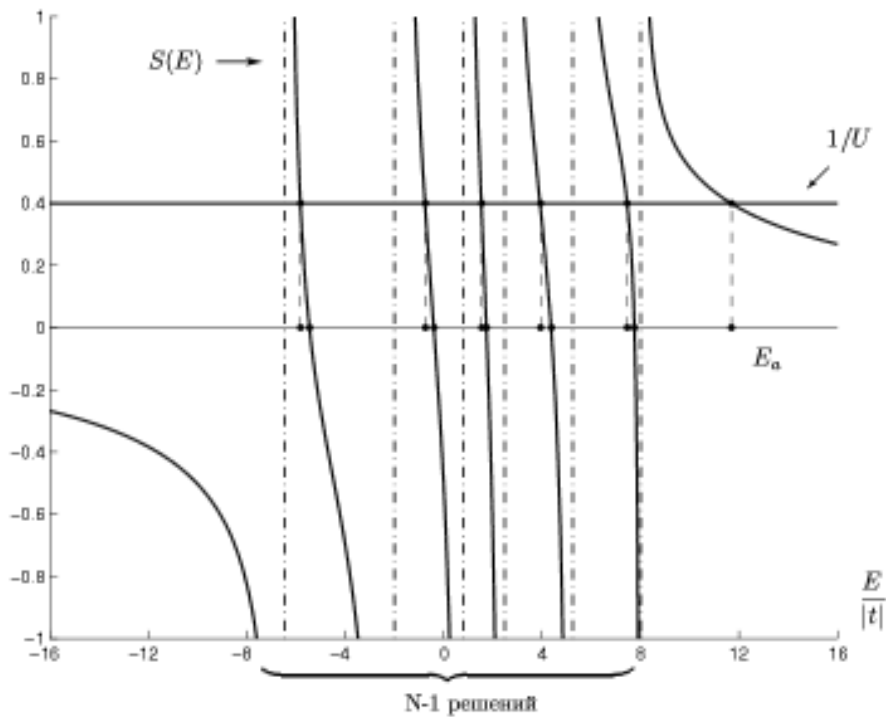


Рис. 1: Графическое решение уравнения

Здесь m — модуль эллиптического интеграла $K(m)$, определяемый выражением

$$m = 2 \left\{ \frac{16t^2 \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2}}{(E_a - 2\varepsilon)^2 - 16t^2 \left(\cos \frac{k_x}{2} - \cos \frac{k_y}{2} \right)^2} \right\}^{1/2}. \quad (19)$$

В режиме сильных электронных корреляций с точностью до членов $\sim t^2/U$ получим простое аналитическое решение уравнения (??):

$$E_a(k_x, k_y) = 2\varepsilon + U + \left(\frac{8t^2}{U} \right) \left(\cos^2 \frac{k_x}{2} + \cos^2 \frac{k_y}{2} \right). \quad (20)$$

Из (??) видно, что для антисвязанного состояния реализуется такое коррелированное движение электронов, когда вклад двоичных состояний велик. При этом в силу замкнутости системы энергия должна оставаться постоянной и большой. Это и вынуждает электроны не расходиться на большие расстояния. Для дальнейшего существенным является то обстоятельство, что ниже непрерывного континуума состояний (их иногда называют состояниями "типа рассеяния") никакого связанного состояния не формируется. Это вполне понятно, так как взаимодействие имеет характер отталкивания. Заметим, что при $U < 0$ реализуется, как нетрудно видеть по рис. 1, обратная ситуация: ниже континуума имеется связанное состояние (антисвязанное состояние отсутствует), поскольку в этом случае электроны притягиваются друг к другу.

На рис. ?? приведена общая структура энергетического спектра для рассмотренной задачи двух тел при изменении квазиимпульса k центра масс для трех характерных направлений зоны Бриллюэна. Сплошными линиями ограничена область энергий, соответствующих состояниям типа рассеяния. Отщепленные линии отражают зависимости энергии антисвязанного состояния от квазиимпульса для тех же характерных направлений зоны Бриллюэна при различных значениях параметра $|t|/U$. Энергия измеряется в единицах $|t|$.

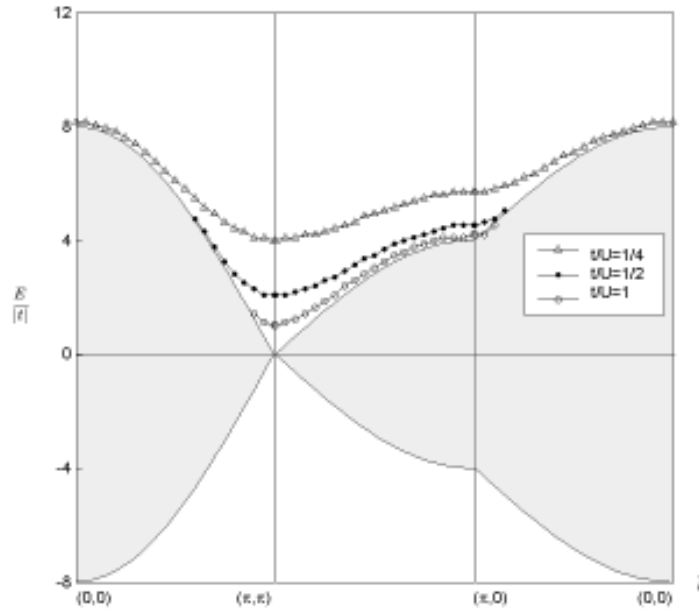


Рис. 2: Энергетическая структура задачи двух тел в модели Хаббарда

Модель Хаббарда в пределе $U = \infty$, t -модель

Остановимся кратко на методологии перехода к эффективному гамильтониану. Рассмотрение начнем с t -модели, которая соответствует предельному случаю модели Хаббарда при $U \rightarrow \infty$. Эта модель является своеобразной реперной точкой, т.к. в ней полностью отсутствуют двоичные состояния, а в эффективном гамильтониане константы взаимодействия обращаются в нуль. Заметим, что t -модель не является моделью невзаимодействующих электронов. Физически это проявляется в невозможности двум электронам находиться на одном узле. Математически это отражается посредством алгебры операторов Хаббарда, которая отлична от алгебры исходных фермиевских операторов. В динамических уравнениях своеобразность алгебры операторов Хаббарда проявляется как наличие дополнительного взаимодействия, которое принято называть кинематическим взаимодействием.

Для получения эффективного гамильтониана воспользуемся методом унитарного преобразования: $H_{eff} = e^S H e^{-S}$. Здесь S - антиэрмитовый оператор, e^S понимается в смысле разложения в ряд: $e^S = 1 + S + \frac{1}{2} S S + \dots$, и выполняется тождество $e^S e^{-S} = 1$. Необходимо иметь в виду, что при унитарном преобразовании изменяется также и функция состояния. Действительно, записав уравнение Шредингера $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ и домножив его справа на e^S , получим: $e^S H|\psi\rangle = E e^S|\psi\rangle$. Нетрудно видеть, что это тождественно $e^S H e^{-S} e^S|\psi\rangle = E e^S|\psi\rangle$. Отсюда следует, что для нахождения собственных значений гамильтониана в равной мере можно использовать уравнение Шредингера $H_{eff}|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$ с новым (эффективным гамильтонианом) $H_{eff} = e^S H e^{-S}$ и новой функцией Φ , которая очевидным образом связана с исходной функцией посредством унитарного преобразования $\Phi = e^S|\psi\rangle$.

При построении эффективного гамильтониана H_{eff} для модели Хаббарда оператор S выбирается в виде

$$S = \sum_{mn} \frac{t_{mn}}{U} \eta(\sigma) (X_m^{2\sigma} X_n^{0\sigma} - X_m^{\sigma 0} X_n^{\bar{\sigma} 2}). \quad (21)$$

Как уже отмечалось, эффективный гамильтониан строится на пространстве состояний $|0\rangle$ и $|\sigma\rangle$. Поэтому, после преобразования, функция основного состояния примет вид $|\psi\rangle = \sum_{m,n} \tilde{C}_{m,n} X_m^{\dagger 0} X_n^{1 0} |0\rangle$

(двойки отбрасываются). \tilde{C}_{mn} выражается через C_{mn} следующим образом:

$$\tilde{C}_{mn} = C_{mn} - t_{mn}(C_{mm} + C_{nn}) - \sum_f \frac{t^2}{U} (C_{fn}t_{fn} + C_{fm}t_{fm}). \quad (22)$$

Как и в модели Хаббарда, эта функция будет соответствовать синглету при $C_{mn} = C_{nm}$ и триплету при $C_{mn} = -C_{nm}$.

Рассмотрим задачу синглетного состояния двух электронов в рамках t -модели. Гамильтониан t -модели запишем в виде

$$H = H_0 + H_t = \varepsilon \sum_{f\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{f m \sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma}. \quad (23)$$

Волновую функцию рассматриваемой системы из двух частиц представим выражением

$$|\psi\rangle = \sum_{m n} C_{m n} X_m^{\uparrow 0} X_n^{\downarrow 0} |0\rangle. \quad (24)$$

Тогда

$$\begin{aligned} H_0 |\psi\rangle &= 2\varepsilon \sum_{m n} C_{m n} X_m^{\uparrow 0} X_n^{\downarrow 0} |0\rangle; \\ H_t |\psi\rangle &= \sum_{f m n} (C_{fn}t_{fm} + C_{fm}t_{fn}) X_m^{\uparrow 0} X_n^{\downarrow 0} |0\rangle - \sum_{m n} t_{mn} (C_{mm} + C_{nn}) X_m^{\uparrow 0} X_n^{\downarrow 0} |0\rangle. \end{aligned} \quad (25)$$

Домножим $H |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ слева на $\langle 0 | X_p^{0\downarrow} X_q^{0\uparrow}$. Используя соотношение

$$\langle 0 | X_p^{0\downarrow} X_q^{0\uparrow} \cdot X_m^{\uparrow 0} X_n^{\downarrow 0} |0\rangle = \delta_{m q} \delta_{n p} (1 - \delta_{m n}) \quad (26)$$

и принимая во внимание равенства

$$\begin{aligned} \langle 0 | X_m^{0\downarrow} X_n^{0\uparrow} H_0 |\psi\rangle &= 2\varepsilon C_{m n} (1 - \delta_{m n}); \\ \langle 0 | X_m^{0\downarrow} X_n^{0\uparrow} E |\psi\rangle &= E C_{m n} (1 - \delta_{m n}); \\ \langle 0 | X_m^{0\downarrow} X_n^{0\uparrow} H_t |\psi\rangle &= \sum_f (C_{fn} t_{mf} + C_{mf} t_{fn}) (1 - \delta_{m n}) - t_{m n} (C_{m m} + C_{n n}), \end{aligned} \quad (27)$$

получим уравнение на коэффициенты

$$(E - 2\varepsilon) C_{m n} (1 - \delta_{m n}) = \sum_f (t_{mf} C_{fn} + t_{nf} C_{fm}) (1 - \delta_{m n}) - t_{m n} (C_{m m} + C_{n n}). \quad (28)$$

Делая преобразование Фурье

$$C_{m n} = \frac{1}{N} \sum_k e^{i \frac{k}{2}(m+n)} \sum_q e^{i q(m-n)} C_k(q) \quad (29)$$

и учитывая, что $C_{m n} = C_{n m}$, находим $C_k(q) = C_k(-q)$. При этом уравнение (28) в импульсном представлении переписется в следующем виде (здесь положено, что $\varepsilon = 0$):

$$\left(E - \left(t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} \right) \right) C_k(q) = \left(E - \left(t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} \right) \right) \sum_p C_k(p) - \sum_p \left(t_{\frac{k}{2}+p} + t_{\frac{k}{2}-p} \right) C_k(p). \quad (30)$$

Выделяя $C_k(q)$

$$C_k(q) = \sum_p C_k(p) - \frac{\sum_p \left(t_{\frac{k}{2}+p} + t_{\frac{k}{2}-p} \right) C_k(p)}{E - \left(t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} \right)} \quad (31)$$

и суммируя (30) по q , получим

$$\sum_p \left(t_{\frac{k}{2}+p} + t_{\frac{k}{2}-p} \right) C_k(p) * \sum_q \frac{1}{E - \left(t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} \right)} = 0. \quad (32)$$

Из (??) следует, что $\sum_p \left(t_{\frac{k}{2}+p} + t_{\frac{k}{2}-p} \right) C_k(p) \neq 0$ (в противном случае $C_k(q)$ не является функцией от q , но тогда $C_{mn} = 0$, и волновая функция тождественно равнялась бы нулю). Принимая во внимание этот факт, находим дисперсионное уравнение

$$\sum_q \frac{1}{E - \left(t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} \right)} = 0. \quad (33)$$

Видно, что оно в точности соответствует дисперсионному уравнению для модели Хаббарда в пределе $U \rightarrow \infty$.

$t - J$ модель

Перейдем к рассмотрению той же самой задачи двух электронов, но решаемой в $t - J$ модели. Гамильтониан модели состоит из кинетической части (t -модель) и слагаемого, соответствующего антиферромагнитному обменно-взаимодействию:

$$H_{t-J} = \varepsilon \sum_{f\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{f m \sigma} t_{f m} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{f m \sigma} J_{f m} (X_f^{\sigma \bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma} \sigma} - X_f^{\sigma \sigma} X_m^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}}). \quad (34)$$

Как и ранее, будем считать, что два электрона по спиновым переменным находятся в синглетном состоянии и описываются волновой функцией (??). Для решения уравнения Шредингера с гамильтонианом H_{t-J} воспользуемся результатами предыдущего параграфа, учитывая дополнительный вклад в уравнение, происходящий от обменной части гамильтониана $t - J$ модели:

$$H_J |\psi\rangle = -2 \sum_{m n} J_{m n} C_{m n} X_m^{\uparrow 0} X_n^{\downarrow 0} |0\rangle. \quad (35)$$

Добавив в уравнение (??) слагаемое

$$\langle 0 | X_m^{\downarrow 0} X_n^{\uparrow 0} H_J |\psi\rangle = -2 C_{m n} J_{m n}, \quad (36)$$

получим уравнение на коэффициенты разложения волновой функции для $t - J$ модели:

$$\begin{aligned} (E - 2\varepsilon + 2J_{m n}) C_{m n} - (E - 2\varepsilon) C_{m n} \delta_{m n} = \\ = \sum_f (t_{m f} C_{f n} + t_{n f} C_{f m}) (1 - \delta_{m n}) - t_{m n} (C_{m m} + C_{n n}). \end{aligned} \quad (37)$$

Переходя обычным образом к импульсному представлению, находим более простой вид уравнения ($\varepsilon = 0$):

$$C_k(q) = \frac{1}{N} \sum_p C_k(p) - \frac{\frac{1}{N} \sum_p C_k(p) \left(t_{\frac{k}{2}+p} + t_{\frac{k}{2}-p} + J_{q+p} + J_{q-p} \right)}{E - \left(t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} \right)}, \quad (38)$$

где

$$J_k = \frac{1}{N} \sum_R e^{i k R} J_R. \quad (39)$$

В дальнейшем ограничимся рассмотрением приближения ближайших соседей. Тогда, введя обозначение

$$\varphi(k, q) = \cos(k_x) \cos(q_x) + \cos(k_y) \cos(q_y), \quad (40)$$

получим:

$$\begin{aligned} J_{p+q} + J_{p-q} &= 4J \varphi(p, q); \\ t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q} &= -4 |t| \varphi\left(\frac{k}{2}, q\right). \end{aligned} \quad (41)$$

Приближение ближайших соседей позволяет факторизовать интегральное уравнение на коэффициенты. С этой целью введем неизвестные величины

$$\begin{aligned} X_k &= \sum_p \cos(p_x) C_k(p); \\ Y_k &= \sum_p \cos(p_y) C_k(p), \end{aligned} \quad (42)$$

а также следующие функции искомой энергии:

$$\begin{aligned} A_0 &= \sum_q \frac{1}{E + 4|t| \varphi\left(\frac{k}{2}, q\right)}; & A_{1(2)} &= \sum_q \frac{\cos(q_{x(y)})}{E + 4|t| \varphi\left(\frac{k}{2}, q\right)}; \\ A_{11(22)} &= \sum_q \frac{\cos^2(q_{x(y)})}{E + 4|t| \varphi\left(\frac{k}{2}, q\right)} & A_{12} &= \sum_q \frac{\cos(q_x) \cos(q_y)}{E + 4|t| \varphi\left(\frac{k}{2}, q\right)}. \end{aligned} \quad (43)$$

Домножая (??) на $\cos(q_x)$ или $\cos(q_y)$ и суммируя по q (учитывая, что $\sum_q \cos(q) = \sum_q \sin(q) = 0$), получим факторизованную систему двух алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} X_k = -4J(X_k A_{11} + Y_k A_{12}) + 4|t| \left(X_k \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) A_1 + Y_k \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) A_1 \right), \\ Y_k = -4J(X_k A_{12} + Y_k A_{22}) + 4|t| \left(X_k \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) A_2 + Y_k \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) A_2 \right). \end{cases} \quad (44)$$

Нетривиальное решение существует при равенстве нулю определителя этой системы:

$$\begin{bmatrix} 1 + 4JA_{11} - 4|t| \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) A_1 & 4JA_{12} - 4|t| \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) A_1 \\ 4JA_{12} - 4|t| \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) A_2 & 1 + 4JA_{22} - 4|t| \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) A_2 \end{bmatrix}. \quad (45)$$

Раскрывая этот определитель и приравнявая его к нулю, получим дисперсионное уравнение

$$\begin{aligned} EA_0 &= -4J(A_{11} + A_{22}) + 16|t|J \left[\cos\left(\frac{k_x}{2}\right) (A_1 A_{22} - A_2 A_{12}) + \right. \\ &\quad \left. + \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) (A_2 A_{11} - A_1 A_{12}) \right]. \end{aligned} \quad (46)$$

При этом было учтено, что

$$4|t| \left(\cos\left(\frac{k_x}{2}\right) A_1 + \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) A_2 \right) = 1 - EA_0, \quad (47)$$

и при $U \rightarrow \infty$ J стремится к нулю. В этом предельном случае уравнение (??), как и положено, переходит в дисперсионное уравнение t -модели (??). Таким образом, предельный переход выполняется. Однако при конечных значениях параметра кулоновского отталкивания U ситуация представляется иной. Численное решение дисперсионного уравнения показывает, что в области энергий, лежащих ниже континуума, всегда имеется отщепленное решение. Очевидно, что оно соответствует связанному состоянию, когда рассматриваемые два электрона движутся таким коррелированным образом, что не расходятся на большие расстояния друг от друга. Это означает, что между ними возникает эффективное притяжение, которое и обеспечивает устойчивость связанного состояния. С физической точки зрения механизм притяжения в $t - J$ модели достаточно прозрачен и заключается в следующем. Если два электрона находятся далеко друг от друга, то вклад обменного слагаемого гамильтониана в энергию пары равен нулю. Если же рассмотреть два электрона, находящихся на ближайшем расстоянии друг от друга в синглетном состоянии, то энергия обменной части гамильтониана равна $-2J$. Наличие такого эффекта и проявляется как эффективное взаимодействие между электронами.

Сравнивая полученный результат с абсолютным отсутствием тенденции к связанному состоянию в исходной модели Хаббарда, мы вынуждены признать наличие принципиального несоответствия между моделью Хаббарда и $t - J$ моделью. Появление в модели связанного состояния означает, по существу, привнесение в $t - J$ модель новых физических взаимодействий, отсутствовавших в первоначальной модели. Формальное подтверждение этого тезиса нетрудно увидеть по рис. ??, на котором представлена картина энергетической структуры двух электронов для $t - J$ модели. Видно, что область реализации связанного состояния уменьшается по мере увеличения параметра кулоновского отталкивания, но существует всегда, если этот параметр конечен. Так, например, в точке $Q = (\pi, \pi)$ энергия связи $E_{св} = 2J$ всегда положительна, если U конечно. Только в предельном случае ($U = \infty$) имеется соответствие, но это соответствует t -, а не $t - J$ модели.

В заключение этого параграфа хотелось бы подчеркнуть следующее: $t - J$ модель, как самостоятельная модель, естественно, имеет большое значение и способна описать нетривиальные физические явления (включая ВТСП). Но говорить о том, что $t - J$ модель эквивалентна модели Хаббарда, нельзя даже для режима сильных электронных корреляций. Далее вернемся к обсуждению этого несоответствия после рассмотрения $t - J^*$ модели.

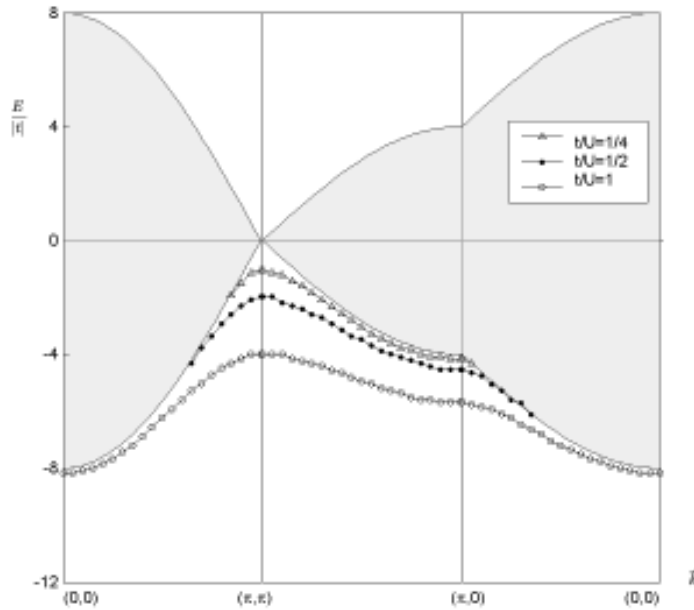


Рис. 3: Энергетическая структура задачи двух тел в $t - J$ модели

Задача двух тел в $t - J^*$ модели

Как известно, при построении эффективного гамильтониана с точностью до членов $\sim t^2/U$, $t - J$ модель возникает только в том случае, если отбрасываются трехцентровые слагаемые. Это обстоятельство наводит на мысль о том, что отмеченное несоответствие обусловлено пренебрежением трехцентровых слагаемых эффективного гамильтониана. В данном параграфе показывается, что этот тезис в принципиальном отношении абсолютно правилен. При этом оказывается, что в количественном отношении сокращенное описание модели Хаббарда в рамках $t - J^*$ модели возможно лишь при $|t| < 8U$.

Трехцентровые слагаемые, как известно, в представлении операторов Хаббарда имеют вид

$$\hat{H}_{(3)} = \sum_{\substack{f g l \sigma \\ f \neq g}} \frac{t_f t_l t_g}{U} (X_f^{\sigma 0} X_l^{\bar{\sigma} \sigma} X_g^{0 \bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_l^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} X_g^{0 \sigma}). \quad (48)$$

Обозначим посредством $H'_{(3)}$ сумму двух операторов $\hat{H}_{(3)}$ и \hat{H}_J , которую запишем единым слагаемым:

$$\hat{H}'_{(3)} = \hat{H}_{(3)} + \hat{H}_J = \sum_{f g l \sigma} \frac{t_f t_l t_g}{U} (X_f^{\sigma 0} X_l^{\bar{\sigma} \sigma} X_g^{0 \bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_l^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} X_g^{0 \sigma}). \quad (49)$$

Тогда гамильтониан $t - J^*$ модели представим как сумму гамильтониана t -модели и $H'_{(3)}$:

$$\hat{H}_{t-J^*} = \varepsilon \sum_{f \sigma} X_f^{\sigma \sigma} + \sum_{f m \sigma} t_{f m} X_f^{\sigma 0} X_m^{0 \sigma} + \sum_{f g l \sigma} \frac{t_f t_l t_g}{U} (X_f^{\sigma 0} X_l^{\bar{\sigma} \sigma} X_g^{0 \bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_l^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} X_g^{0 \sigma}). \quad (50)$$

Волновую функцию ищем в том же самом виде, как и ранее в t -модели. Учитывая, что

$$H'_{(3)} |\psi\rangle = - \sum_{f m n} \frac{2 t_{m n}}{U} (t_{f m} C_{f m} + t_{f n} C_{f n}) X_m^{\uparrow 0} X_n^{\downarrow 0} |0\rangle, \quad (51)$$

а также

$$\langle 0 | X_m^{\downarrow 0} X_n^{\uparrow 0} H'_{(3)} |\psi\rangle = - \sum_f \left(\frac{2 t_{m n} t_{m f}}{U} C_{m f} + \frac{2 t_{m n} t_{n f}}{U} C_{n f} \right), \quad (52)$$

получим уравнение для определения коэффициентов:

$$(E - 2\varepsilon) C_{mn} - (E - 2\varepsilon) C_{mn} \delta_{mn} = \sum_f (t_{mf} C_{fn} + t_{nf} C_{fm}) (1 - \delta_{mn}) - t_{mn} (C_{mm} + C_{nn}) - \sum_f \left(\frac{2t_{nm} t_{mf}}{U} C_{fm} + \frac{2t_{mn} t_{nf}}{U} C_{fn} \right). \quad (53)$$

После перехода в импульсное пространство дисперсионное уравнение примет следующий вид (при $\varepsilon = 0$):

$$C_k(q) = \sum_p C_k(p) - \sum_p \left(t_{\frac{k}{2}+p} + t_{\frac{k}{2}-p} \right) C_k(p) \left(\frac{1}{U} \frac{t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q}}{E - (t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q})} + \frac{1}{E - (t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q})} \right). \quad (54)$$

Введя обозначение

$$Y_k = \sum_p \left(t_{\frac{k}{2}+p} + t_{\frac{k}{2}-p} \right) C_k(p), \quad (55)$$

после суммирования по q получим

$$Y_k \left(\frac{1}{U} \sum_q \frac{t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q}}{E - (t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q})} + \sum_q \frac{1}{E - (t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q})} \right) = 0. \quad (56)$$

Из (??) видно, что $Y_k \neq 0$ (по тем же соображениям, что и в t -модели). Тогда, учитывая, что

$$\sum_q \frac{t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q}}{E - (t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q})} = E \sum_q \frac{1}{E - (t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q})} - 1, \quad (57)$$

находим окончательный вид дисперсионного уравнения, которое определяют энергетические уровни энергий двух электронов, описываемых $t - J^*$ моделью

$$\frac{1}{U + E} = \sum_q \frac{1}{E - (t_{\frac{k}{2}+q} + t_{\frac{k}{2}-q})}. \quad (58)$$

Отметим прежде всего, что это уравнение в существенно большей степени соответствует уравнению, получаемому в рамках исходной модели Хаббарда. Действительно, при $U \gg |t|$ в области энергий $E \sim t$ левая часть уравнения представима в виде $\frac{1}{U + E} \approx \frac{1}{U} - \frac{E}{U^2} + \dots$. При этом следует удерживать только первое слагаемое $1/U$, т.к. при построении эффективного гамильтониана из всего бесконечного ряда учитывались только слагаемые порядка t^2/U . Поэтому учет в левой части уравнения других (кроме первого) слагаемых означал бы превышение точности. Таким образом, в принципиальном отношении учет трехцентровых слагаемых эффективного гамильтониана приводит к тому, что дисперсионное уравнение $t - J^*$ модели совпадает с уравнением модели Хаббарда.

При рассмотрении многоэлектронной проблемы в рамках эффективного гамильтониана вопрос о превышении точности не решается так просто, как это оказалось в данной задаче. В этой связи важным в практическом отношении является знание граничного значения отношения $|t|/U$, такого, что при больших значениях этого параметра $t - J^*$ модель становится неадекватной модели Хаббарда. В данном случае численные расчеты показывают, что $t - J^*$ моделью можно пользоваться при $|t|/U < 1/8$. При $|t|/U > 1/8$ в системе, как представлено на рис. 4 возникает связанное состояние. Раньше всего связанное состояние возникает в области, близкой к $\vec{k} = (0, 0)$. Тот факт, что $t - J^*$ модель переходит в модель Хаббарда только при $|t|/U < 1/8$, с необходимостью приводит к следующему заключению. Если при описании конкретных веществ полагается, что $J/|t| > 1/4$, то $t - J^*$ модель (а тем более $t - J$ модель) может выступать только как самостоятельная модель, без привязки к модели Хаббарда как к исходной модели.

Проведенное исследование задачи двух тел в $t - J^*$ модели показало, что учет трехцентровых слагаемых имеет существенное значение для воспроизведения эффективным гамильтонианом той физики, которая заложена в исходной модели Хаббарда. При этом еще раз подчеркнем, что если в $t - J^*$ модели для такого правильного воспроизводства вопрос упирается в количественную оценку малости параметра разложения, то для $t - J$ модели ситуация совершенно иная. Структуры спектров модели Хаббарда и $t - J$ модели принципиально иные. Существование связанного состояния в $t - J$ модели при сколь угодно малом значении параметра разложения, а значит, и существование эффективного притяжения между электронами в $t - J$ модели отделяет ее от модели Хаббарда.

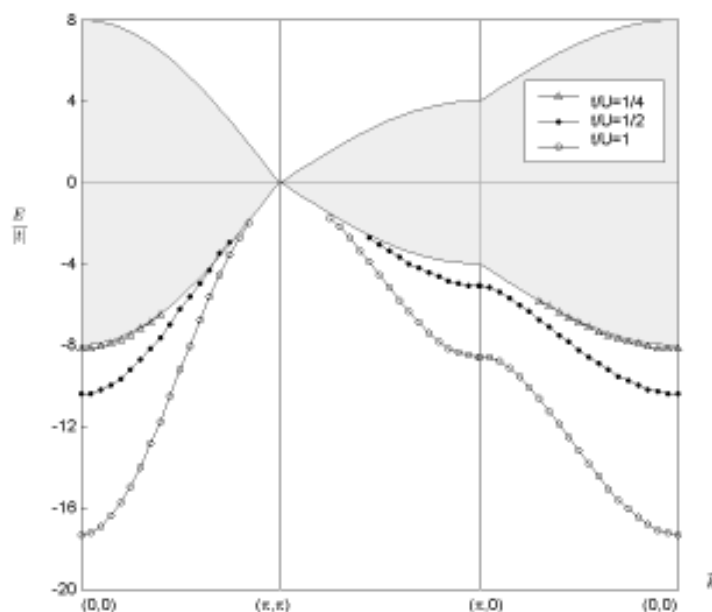


Рис. 4: Структура энергетического спектра задачи двух тел $t - J^*$ модели

Список литературы

- [1] ANDERSON P.W. *The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity* / P.W.Anderson // Science. – 1987. – V. 235. – P. 1196-1198
- [2] КАМПС А.Р. *Magnetic correlations in high temperature superconductivity.* / А.Р.Кампф // Phys. Rep. – 1994. – V. 249. – P. 219-351
- [3] ПЛАКИДА Н.М. *High-temperature superconductivity* / N.N.Plakida. – Berlin: Springer, 1995
- [4] ИЗЮМОВ Ю.А. *Сильно коррелированные электроны: t - J модель* / Ю.А.Изюмов // УФН. – 1997. – Т. 167. – С. 465-497
- [5] ИЗЮМОВ Ю.А. *Спин-флуктуационный механизм высокотемпературной сверхпроводимости и симметрия параметра порядка* / Ю.А.Изюмов // УФН. – 1999. – Т. 169. – С. 225-255
- [6] ПЛАКИДА Н.М. *Антиферромагнитный обменный механизм сверхпроводимости в купратах* / Н.М.Плакида // Письма в ЖЭТФ. – 2001. – Т. 74. – С. 38-43
- [7] ОВЧИННИКОВ С.Г. *Квазичастицы в сильно коррелированных электронных системах в оксидах меди* / С.Г.Овчинников // УФН. – 1997. – Т. 167. – С. 1043-1068
- [8] HUBBARD J. *Electron correlations in narrow energy bands* / J.Hubbard // Proc. Roy. Soc. – 1963. – V. A276. – P. 238
- [9] БОГОЛЮБОВ Н.Н. *Лекции по квантовой статистике* / Н.Н.Боголюбов. – Киев: Наукова думка, 1949.
- [10] ВАЛЬКОВ В.В. *Сильное влияние трехцентровых взаимодействий на формирование сверхпроводимости $d_{x^2-y^2}$ -симметрии в t - J^* -модели* / В.В.Вальков, Т.А.Валькова, Д.М.Дзедзиса-швили, С.Г.Овчинников // Письма в ЖЭТФ. – 2002. – Т.75. – С. 450-455.
- [11] ВАЛЬКОВ В.В. *Квазичастицы в сильно коррелированных системах* / В.В.Вальков, С.Г.Овчинников. – Новосибирск: Из-во СО РАН, 2001.

- [12] YUSHANKHAY V.YU. *Proper reduction scheme to an extended $t - J$ -model and the hole dispersion in $Sr_2CuO_2Cl_2$* / V.Yu.Yushankhay, V.S.Oudovehko, R.Hayn // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 55. – P. 15562-15576.
- [13] HIRSCH J.E. *Singlet pairs, covalent bonds, superexchange, and superconductivity* / J.E.Hirsch // Phys. Lett. A. – 1989. – V. 136. – P. 163-166.
- [14] YUSHANKHAY V.YU. *Singlet pairing in the single-band Hubbard model: contributions of second order in t/U* / V.Yu.Yushankhay, G.M. Vujcic, R.B.Zakula // Phys. Lett. A. – 1990. – V. 151. – P. 254-258.

**ABOUT EFFECTIVE HAMILTONIANS FOR HUBBARD MODEL IN REGIME OF
STRONG ELECTRON CORRELATION**

V.V.Valkov, V.A.Mitskan

On the basis of the exact solution of the energy spectrum task for the two electron system in Hubbard model, $t - J$ and $t - J^$ models the validity of transfer to the effective Humiltonian is analyzed. It is shown, that in the strong electron correlation regime transfer to effective Hamiltonian is correct in $t - J^*$ model only. In this case $t - J^*$ model reproduce low-energy spectrum correctly for $|t| < U/8$.*