УДК 537.312.62

© Физика твердого тела, том 32, № 5, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 5, 1990

К ТЕОРИИ ТОКОВЫХ СОСТОЯНИЙ В ЦЕПОЧКЕ ХАББАРДА

А. А. Звягин

В последнее время вырос интерес к исследованию систем, которые описываются теоретически моделью Хаббарда. По-видимому, это происходит потому, что этой моделью пользуются при теоретическом изучении сверхпроводящих металлооксидов [1]. Одномерная модель Хаббарда интересна тем, что известно точное ее теоретическое решение: найдены основное состояние модели [2], некоторые ее возбуждения [3]. В настоящей работе рассматривается теоретически поведение токов в цепочке Хаббарда, индуцированных магнитным полем.

Гамильтониан исследуемой системы имеет вид

$$H = -\sum_{n,\sigma} t\,[(\vartheta + i\nu)\, a^+_{n,\sigma} a_{n+1,\sigma} + (\vartheta - i\nu)\, a^+_{n+1,\sigma} a_{n,\sigma}] + \\ + U \sum_n a^+_{n,\uparrow} a_{n,\uparrow} a^+_{n,\downarrow} a_{n,\downarrow}. \tag{1}$$

Здесь $a^+_{n,\sigma}$, $a_{n,\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона в n-м узле с проекцией спина σ; t — энергия перескока электронов; U — энергия кулоновского отталкивания электронов на одном узле; $\vartheta = \cos\alpha$; $\nu = \sin\alpha$; $\alpha = \Phi/N_a\Phi_0$, где Φ — поток магнитного поля через замкнутую в кольцо цепочку, Φ_0 — единичный квант магнитного потока. Таким образом, включенное магнитное поле описывает воздействие поля на систему зарядов. При этом мы предполагаем, что парамагнитным вкладом (т. е. влиянием поля на спины электронов) можно пренебречь.

Волновую функцию системы ищем в виде

$$\Psi = \sum_{x_1, \ldots x_N} \sum_{\alpha_1 \ldots \alpha_N} \psi_{\alpha_1, \ldots \alpha_N}(x_1, \ldots x_N)\, a^+_{x_1, \alpha_1} a^+_{x x_2, \alpha_2} \ldots a^+_{x, \alpha_N} |0\rangle, \tag{2}$$

где α_* принимают значения $\downarrow, \uparrow$; ψ — волновая функция в координатном представлении; $|0\rangle$ — электронный вакуум. Для ψ используем подстановку Бете [4]

$$\psi_{\alpha_1, \ldots \alpha_N}(x_1, \ldots x_N) = \sum_P C_{\alpha_1, \ldots \alpha_N}(0 \,|\, P) \exp i \sum_{j=1}^N x_j p_{P_j}. \tag{3}$$

Здесь Q, P — перестановки целых чисел, нумерующих электроны; p_j — импульсы электронов. Квантовый метод обратной задачи (простое описание которого есть в [4]) позволяет из вида двухчастичной матрицы рассеяния возбуждений системы получить характеристики всей системы (энергию, импульс, и т. д.). Система уравнений, связывающая импульсы и быстроты электронов λ_j с константами гамильтониана (1), имеет вид

$$\prod_{l=1}^N \frac{\lambda_j - \sin p_j + iV}{\lambda_j - \sin p_j - iV} = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq 1}}^M \frac{\lambda_i - \lambda_k}{\lambda_i - \lambda_k} \frac{+i2V}{-i2V}, \quad V = \frac{U}{4t}, \tag{4}$$

где M — число электронов с спином $\downarrow$. Периодические граничные условия приводят к системе уравнений (N_a — число узлов)

$$\exp(i(p_j - \alpha) N_a) = \prod_{i=1}^M \frac{\lambda_i - \sin p_j + i2V}{\lambda_i - \sin p_j - i2V}. \tag{5}$$

Энергия состояния с волновой функцией Ψ выражается следующим образом:

$$E = -2t \sum_{i=1}^{N} \cos p_i. \tag{6}$$

Из формулы (5) видно, что система периодична по α: при $\alpha N_a = 2\pi m$, где m — целое число, система остается такой же. Заметим, что выражения (4)—(6) являются точными, в них только перешли к новой переменной p_j: $p_j - \alpha$. Если пренебречь малым парамагнитным влиянием магнитного поля, то основное состояние системы электронов синглетное. При половинном заполнении ($N = N_a$) ток в системе при любых U и t равен нулю. Считая аналогично [5] $t/U \ll 1$ (если $\alpha \ll 1$) и решая системы уравнений (4)—(5) для синглетного основного состояния (при этом $M = N/2$), получим выражение для энергии основного состояния в термодинамическом пределе

$$E_0^{(s)} = -N_a t \left\{ \frac{2}{\pi} \sin\left(\pi \frac{N}{N_a}\right)\left(1 - \frac{\alpha^2}{2}\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{4t \ln 2}{U} \left(\frac{N}{N_a}\right)^2 \left[1 - \frac{\sin(2\pi N/N_a)}{2\pi N/N_a}\right] \right\}. \tag{7}$$

Для тока в основном состоянии имеем

$$\langle J \rangle_0 = -a\Phi t \frac{2}{\pi} \sin\left(\pi \frac{N}{N_a}\right)(\Phi_0)^{-2}, \tag{8}$$

где a — межатомное расстояние. При половинном и полном заполнении в случае, когда цепочка Хаббарда — диэлектрик, ток равен нулю; ток максимален при $N = N_a/2$. Видно, что система обладает симметрией электроны—дырки: при замене $N \to (N_a - N)$ и $\Phi_0 \to -\Phi_0$ ток в системе не меняется.

Найденный в настоящей работе ток существует в основном состоянии. Физический смысл найденного тока понятен: это движение электронов по замкнутой в кольцо цепочке под действием силы Лоренца. Изучение тока системы электронов, движущихся в основном состоянии как целое, возможно, будет полезным для понимания природы токовых состояний в сверхпроводящих металлооксидных системах.

Список литературы

[1] Anderson P. W. // Science. 1987. V. 235. N 4793. P. 1196—1198.
[2] Lieb E. H., Wu F. Y. // Phys. Rev. Lett. 1968. V. 20. P. 1445.
[3] Овчинников А. А. // ЖЭТФ. 1969. Т. 57. № 6. С. 2137—2147.
[4] Изюмов Ю. А., Скрябин Ю. Н. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987. 264с.
[5] Shiba H. // Phys. Rev. B. 1972. V. 6. N 3. P. 930—938.

Физико-технический институт низких температур
АН УССР
Харьков

Поступило в Редакцию
6 сентября 1989 г.
В окончательной редакции
20 ноября 1989 г.