

СПЕКТР ДЫРОЧНЫХ СОСТОЯНИЙ В ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА С СИЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

В. Я. Кривнов

Найден спектр состояний одной дырки в одномерной модели Хаббарда с сильным взаимодействием. Показано, что нижняя граница континуума энергий имеет дисперсию с шириной $\mathcal{J}\pi/2$. Основное состояние имеет импульсы $(\pm\pi/2)$ и $(0, \pi)$ для цепочек с четным и нечетным числом узлов соответственно. Показано, что влияние движения дырки на спиновую систему отсутствует.

Модель Хаббарда является простейшей моделью, используемой для описания свойств систем сильнокоррелированных электронов. Ее интенсивное изучение в последние годы связано с развитием теории высокотемпературной сверхпроводимости, где эта модель используется в качестве эффективного гамильтониана.

В пределе сильного отталкивания ($u \gg t$) модель Хаббарда

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i, j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma}) + u \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

сводится к так называемой $t-\mathcal{J}^*$ модели, описываемой гамильтонианом

$$\begin{aligned} \hat{H}_{t-\mathcal{J}^*} = & -t \sum_{\langle i, j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma}) + \mathcal{J} \sum_{\langle i, j \rangle} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - n_i n_j / 4) + \\ & + \mathcal{J}/4 \sum_{\langle i, j \rangle \langle i, j' \rangle, j \neq j', \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{i, -\sigma} c_{j, -\sigma}^+ - c_{j' \sigma} - n_{i, -\sigma} c_{j\sigma}^+ c_{j' \sigma}), \end{aligned} \quad (2)$$

где $\mathcal{J} = 4t^2/u$; $\langle i, j \rangle$ означает, что узлы i и j являются ближайшими соседями, а операторы $c_{i\sigma}$ в (2) действуют в пространстве с запрещенным двукратным заполнением узлов. Пренебрежение третьим членом в (2) приводит к $t-\mathcal{J}$ модели.

Среди вопросов, касающихся свойств $t-\mathcal{J}$ или $t-\mathcal{J}^*$ модели, одним из основных является вопрос о взаимодействии спиновой системы с носителями, роль которых играют дырки (пустые узлы). Даже задача о движении одной дырки представляет собой нетривиальную многочастичную проблему. Еще Бринкман и Райс [1] показали, что движение дырки в антиферромагнитной неэлементарной конфигурации спинов при $u = \infty$ ($\mathcal{J} = 0$) является полностью некогерентным, т. е. спектральная функция $A(k, \omega)$ не зависит от k . Учет квантовых флуктуаций представляет собой весьма сложную задачу, для решения которой использовались как численные расчеты конечных кластеров [2-6], так и различные приближения [7-9]. Было показано, что квазидырка имеет существенно другой закон дисперсии по сравнению со свободной частицей и ее эффективная масса $\sim \mathcal{J}^{-1}$. Импульс дырки в основном состоянии лежит на поверхности

Ферми и равен $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$. (Положение этого импульса существенно для определения симметрии сверхпроводящего параметра порядка [5]). Наряду с исследованием двумерных систем в ряде работ рассматривалась аналогичная задача и для одномерного случая. В частности, были проведены численные и вариационные расчеты [4, 10, 11] цепочек, содержащих одну дырку. Эти расчеты показали, что, несмотря на имеющиеся отличия в поведении дырки в одно- и двумерных системах, в ряде отношений свойства этих систем похожи. Так, учет конечности \mathcal{J} приводит к дисперсии континуума Бринкмана и Райса и соответствующая ширина зоны оказывается $\sim \mathcal{J}$. С этой точки зрения исследование одномерной модели Хаббарда может оказаться полезным и для понимания двумерной ситуации.

Целью данной работы является нахождение точного спектра дырки в одномерной модели Хаббарда при $u \gg t$. Для его расчета будем использовать анзац Бете. Соответствующие уравнения для квазиимпульсов k_j и Λ_α , определяющих собственные значения энергии, имеют вид [12]

$$N_0 k_j = 2\pi I_j - \sum_\alpha \Theta \left(\frac{4(\sin k_j - \Lambda_\alpha)}{u} \right), \quad j = 1, \dots, N,$$

$$\sum_j \Theta \left(\frac{4(\Lambda_\alpha - \sin k_j)}{u} \right) = 2\pi \mathcal{J}_\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha} \Theta \left(\frac{2(\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta)}{u} \right), \quad \alpha = 1, \dots, M, \quad (3)$$

где $\Theta(x) = 2\text{arctg } x$, N_0 — число узлов цепочки, N — число электронов, $N = N_0 - 1$, M — число электронов со спином \downarrow ($S = N/2 - M$), I_j и \mathcal{J}_α — целые или полуцелые числа и t полагается равным единице.

Энергия E и импульс Q состояния выражаются в виде

$$E = -2 \sum_{j=1}^N \cos k_j,$$

$$Q = (2\pi/N_0) \left(\sum_j I_j + \sum_\alpha \mathcal{J}_\alpha \right).$$

Вообще говоря, уравнения (3) имеют действительные и комплексные решения. Необходимо, однако, иметь в виду, что комплексные k_j соответствуют состояниям, имеющим хотя бы один двукратно заполненный узел цепочки и, следовательно, отделенным от состояний с действительными k_j большой энергией $\sim u$. Что же касается комплексных решений Λ_α , то они наряду с действительными существенны при определении спектра низколежащих возбуждений.

При $u \gg 1$, как легко видеть из (3), $\Lambda_\alpha \sim u$. Произведем поэтому замену $\Lambda_\alpha = \lambda_\alpha u/2$ и разложим (3) с точностью до членов $\sim u^{-2}$

$$N_0 k_j = 2\pi I_j + (2\pi/N) \sum_\alpha \mathcal{J}_\alpha - \mathcal{J} \sin k_j \sum_\alpha 2(1 + 4\lambda_\alpha^2)^{-1}, \quad (4)$$

$$N\Theta(2\lambda_\alpha) = 2\pi \mathcal{J}_\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha} \Theta(\lambda_\alpha - \lambda_\beta). \quad (5)$$

Как видно из (4), при $u \gg 1$ происходит расщепление зарядовых и спиновых степеней свободы, а (5) представляет собой уравнение Бете для гейзенберговской антиферромагнитной N -узельной цепочки, энергия собственных состояний которой E_S равна

$$E_S = -\mathcal{J} \sum_\alpha 2(1 + 4\lambda_\alpha^2)^{-1}. \quad (6)$$

Согласно [13-15], комплексные решения (5) при $N \rightarrow \infty$ образуют «струны» длины n , причем каждая струна содержит n чисел $\lambda_{j,\alpha}^n$.

$$\lambda_{j,\alpha}^n = \lambda_j^n + (i/2)(n+1-2\alpha), \quad \alpha = 1, \dots, n, \quad (7)$$

где λ_j^n — действительные числа, $n=1$ соответствует действительным решениям (5).

С учетом этого обстоятельства (4) и (5) могут быть переписаны в виде [14, 15]

$$N_0 k_j = 2\pi I_j + Q_S + \sin k_j E_S, \quad (8)$$

$$N\Theta(2\lambda_\alpha^n/n) = 2\pi \mathcal{J}_\alpha^n + \sum_{m,\beta} \Theta_{nm}(\lambda_\alpha^n - \lambda_\beta^m), \quad (9)$$

где

$$\Theta_{nm}(x) = \begin{cases} \Theta(2x/|n-m|) + 2\Theta(2x/(|n-m|+2)) + \dots + 2\Theta(2x/(n+m-2)) + \Theta(2x/(n+m)), & n \neq m, \\ 2\Theta(x) + 2\Theta(x/(n-1)) + \dots + \Theta(x/n), & n = m, \end{cases}$$

$$Q_S = (2\pi/N) \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^{M_n} \mathcal{J}_\alpha^n, \quad (10)$$

M_n — число струн длины n и

$$M = \sum_n n M_n.$$

Отметим, что E_S в (8) зависит от набора чисел \mathcal{J}_α^n . N чисел I_j и M_n чисел \mathcal{J}_α^n в (8), (9) выбираются из наборов чисел, удовлетворяющих условиям [14, 15]: 1) I_j — последовательные целые (полуцелые) числа при $\sum_n M_n$ четной (нечетной). Этот набор включает N_0 чисел; 2) \mathcal{J}_α^n — последовательные целые (полуцелые) числа при $N - M_n$ нечетном (четном), ограниченные условием

$$|\mathcal{J}_\alpha^n| < A_n/2, \quad A_n = N - \sum_m t_{nm} M_m, \quad t_{nm} = 2 \min(n, m) - \delta_{n,m}. \quad (11)$$

Этот набор состоит из A_n чисел. Условие (11) выделяет состояние с фиксированными значениями S^x и S^z ($S = S^z = N/2 - M$). Выбор $N = N_0 - 1$ чисел I_j и M_n чисел \mathcal{J}_α^n из наборов 1) и 2) означает, что имеется одна вакансия (пропущено число I_0) в первом наборе и $A_n - M_n$ вакансий в наборах второго типа.

Запишем теперь выражение для энергии, используя уравнение (8). При этом будем предполагать, что N_0 четно. Это выражение имеет вид

$$E = \pm 2 \cos(Q - Q_S) + E_S(1 - N_0^{-1}) + E_S N_0^{-1} \cos(2Q - 2Q_S), \quad (12)$$

причем знак $+$ ($-$) в (12) соответствует нечетной (четной) величине $\sum_n M_n$. Легко видеть, что первые два члена в (12) представляют собой энергию $t - \mathcal{J}$ модели, тогда как третий является кинетической энергией, связанной с перескоком дырки на две постоянных решетки (третий член в (2)).

В связи с формулой (12) отметим следующее обстоятельство. Нами в [16] была получена волновая функция одномерной модели Хаббарда при $u = \infty$ (независимо полученная также в [17]), которую для случая одной дырки можно преобразовать к виду

$$\psi(n; l_1, \dots, l_M) = f(n) \varphi_n(l_1, \dots, l_M), \quad (13)$$

где n, l_i — координаты дырки и перевернутых спинов,

$$f(n) = N_0^{-1/2} \exp \left[i \left(Q - Q_S + \pi \left(1 + \sum_n M_n \right) n \right) \right],$$

$$\varphi_n(l_1, \dots, l_M) = \Phi(l_1 - 1, l_2 - 1, \dots, l_i - 1, l_{i+1}, \dots, l_M)$$

при

$$l_1 > l_2 > \dots > l_i > n > l_{i+1} > \dots > l_M,$$

$\Phi(l_1, \dots, l_N)$ — волновая функция гейзенберговской антиферромагнитной цепочки.

Проводя несложные выкладки, легко убедиться в том, что среднее

$$\langle \psi | \hat{H}_{i-\mathcal{J}^*} | \psi \rangle$$

совпадает с (12) с точностью до членов $\sim N_0^{-1}$. Таким образом, следует ожидать, что вычисление средних с волновой функцией (13) будет точным в первом порядке по u^{-1} при $N_0 \rightarrow \infty$.

Из вида первого члена в (12) следует, что при $u = \infty$ дырку в одномерной системе можно рассматривать как частицу, движущуюся во внешнем поле, создаваемом спиновой системой, с эффективным интегралом перескока $(t_{n, n+1})_{\text{эфф}} = \pm t \exp(iQ_S)$. Для частного случая $N_0 = 4$ ($N = 3$) указанная эквивалентность была замечена в [5]. Это обстоятельство интересно в связи с обсуждаемой в литературе [18, 19] возможностью сведения двумерной $t-\mathcal{J}$ модели к модели невзаимодействующих электронов в магнитном поле.

Энергия (12), естественно, зависит от конкретной спиновой конфигурации. Рассмотрим некоторые из них.

Для ферромагнитного состояния все $M_n = 0$. При этом $Q_S = 0$ и $E_S = 0$ и энергия дырки совпадает с энергией свободной частицы

$$E = 2 \cos Q.$$

В состоянии с одним перевернутым спином ($S = N/2 - 1$) $M_1 = 1$, $M_n = 0$ для $n > 1$. В соответствии с условием (11)

$$|\mathcal{J}_1^1| < (N - 1)/2,$$

т. е. $-\pi < Q_S < \pi$, а $E_S = -\mathcal{J}(1 + \cos Q_S)$ и

$$E = 2 \cos(Q - Q_S) - \mathcal{J}(1 + \cos Q_S). \quad (14)$$

Спектр энергий (14) образует двухпараметрический континуум, границами которого являются

$$E_{\max}(Q) = 2 - \mathcal{J}(1 + \cos Q),$$

$$E_{\min}(Q) = -2 - \mathcal{J}(1 - \cos Q).$$

Отметим, однако, что спектральная функция $A_\alpha(Q, \omega) = \pi^{-1} \text{Im } G(Q, \omega)$ ($G(Q, \omega)$ — гриновская функция), вычисленная с волновой функцией (13) при $N_0 \rightarrow \infty$, совпадает со спектральной функцией свободной частицы

$$A_\alpha(Q, \omega) = \delta(\omega - 2 \cos Q),$$

т. е. движение дырки остается когерентным, хотя редкие (при $N_0 \rightarrow \infty$) акты рассеяния ее на перевернутом спине формируют континуум (14).

Состояние с $S = 1/2$. Энергия E_S для этого состояния была вычислена Фаддеевым и Тахтаджяном [15]. Воспользовавшись результатами [15], получим

$$E_S = E_0 + \varepsilon(p_1) + \varepsilon(p_2) + \dots + \varepsilon(p_m), \quad (15)$$

где $E = -N \varepsilon_0$ ($\varepsilon_0 = \mathcal{J} \ln 2$) — энергия основного состояния N -узельной гейзенберговской цепочки,

$$\varepsilon(p) = (\mathcal{J}\pi/2) \cos p, \quad |p| < \pi/2, \quad (16)$$

m равно числу вакансий в наборе A_1

$$m = N_0 - 1 - 2 \sum_{i=1} M_i. \quad (17)$$

Кроме того,

$$p_1 + p_2 + \dots + p_m = Q_S + \alpha\pi, \quad (18)$$

где $\alpha = 1$ (0), если $\sum_{n=1} M_{2n}$ нечетна (четна).

Отметим, что формула (17) имеет место при условии, что $N_0 \rightarrow \infty$, но величина $N_0/2 - M$ конечна. Подставляя (15) в (12), получим

$$E = \pm 2 \cos(Q - p_1 - \dots - p_m) + \varepsilon(p_1) + \dots + \varepsilon(p_m) - (N_0 - 2)\varepsilon_0 - \varepsilon_0 \cos 2(Q - p_1 - \dots - p_m), \quad (19)$$

где знак $+$ ($-$) соответствует $N_0/2$ четному (нечетному).

При $m=1$, как следует из (19), спектр энергий $E(Q, p_1)$ образует двухпараметрический континуум, границами которого являются

$$\begin{aligned} E_{\min}(Q) &= -2 \sin Q - (N - 2)\varepsilon_0 + \varepsilon_0 \cos 2Q, \\ E_{\max}(Q) &= 2 + (\mathcal{J}\pi/2) \cos Q - (N_0 - 1)\varepsilon_0, \\ &|Q| < \pi/2 \quad (\pi/2 < |Q| < \pi), \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} E_{\min}(Q) &= -2 - (\mathcal{J}\pi/2) \cos Q - (N_0 - 1)\varepsilon_0, \\ E_{\max}(Q) &= 2 \sin Q - (N_0 - 2)\varepsilon_0 + \varepsilon_0 \cos 2Q, \\ &\pi/2 < |Q| < \pi \quad (|Q| < \pi/2), \end{aligned} \quad (21)$$

для $N_0/2$ четного (нечетного).

Аналогично для $2n-1$ вакансий в наборе A_1 спектр энергий представляет собой $2n$ -параметрический континуум с границами

$$\begin{aligned} E_{\min}(Q) &= -2 + (\mathcal{J}\pi/2) \cos Q - (N_0 - 1)\varepsilon_0, \\ E_{\max}(Q) &= 2 + (2n + 1)(\mathcal{J}\pi/2) \cos(Q/(2n + 1)) - (N_0 - 1)\varepsilon_0, \\ &|Q| < \pi, \end{aligned} \quad (22)$$

формулы (20)–(22) имеют место, разумеется, при $N_0 \rightarrow \infty$. Как следует из этих формул, энергия основного состояния дырки при фиксированном значении Q равна

$$E_{\text{осн}}(Q) = -2 + (\mathcal{J}\pi/2) |\cos Q| - (N_0 - 1)\varepsilon_0. \quad (23)$$

Минимум (23) достигается при $Q = \pm \pi/2$, и «когерентная ширина зоны» ΔE равна $\mathcal{J}\pi/2$. Отметим, что численные расчеты конечных цепочек дают $\Delta E \simeq \simeq 1.5\mathcal{J}$ [4].

До сих пор рассматривались системы, содержащие четное число центров. Для N_0 нечетного вычисление спектра производится аналогичным образом. В этом случае, согласно (17), для состояния с $S=0$ число вакансий m в наборе A_1 всегда четно [15]. В частности, $m=0$ для $M_1 = (N_0 - 1)/2$ и $M_n = 0$ ($n > 1$) и

$$E = \pm 2 \cos Q - (N_0 - 2)\varepsilon_0 - \varepsilon_0 \cos 2Q, \quad (24)$$

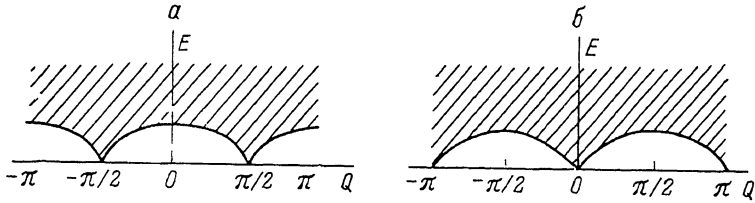
где знаки $+$ ($-$) соответствуют $(N_0 - 1)/2$ четным (нечетным).

Как и для N_0 четных, рассмотрение состояний с комплексными λ_α приводит к $(m+1)$ -параметрическому континууму с нижней границей

$$E_{\min}(Q) = -2 + (\mathcal{J}\pi/2) |\sin Q| - (N_0 - 1) \epsilon_0,$$

т. е. минимум энергии достигается при $Q=0, \pi$. Схематически спектр энергий для N_0 четных (нечетных) изображен на рисунке, а (б). В точках минимума нижней границы спектра первая производная по Q испытывает скачок. Такое поведение $E(Q)$ было обнаружено в численных расчетах конечных кластеров [4, 18].

Полученные выше результаты относились к состоянию с $S=S_{\min}$. Что касается состояний с $S > S_{\min}$, то их энергии в пределе $N_0 \rightarrow \infty$ (но для конечных значений $S - S_{\min}$) также могут быть вычислены по формуле (19). Так, например, для $S=3/2$ число вакансий $m=3, 5, \dots$ и спектр совпадает с изображенным на рисунке.



Спектр энергий для цепочек с четным (а) и нечетным (б) числом узлов.

До сих пор нами рассматривалось влияние спиновой системы на характер движения дырки. Представляет интерес вопрос об обратном влиянии дырки на систему спинов. Для его решения были вычислены корреляционные функции

$$\langle S_j^z \rangle_n, \langle S_j S_{j+1} \rangle_n, \quad (25)$$

где индекс h означает, что узел j находится на расстоянии j от дырки. Вычисление средних (25) с волновой функцией (13) производится элементарно и показывает, что $\langle S_j^z \rangle_h = 0$, а $\langle S_j S_{j+1} \rangle_h$ сводится к соответствующему коррелятору для N -узельной гейзенберговской цепочки и не зависит от j . Таким образом, обратное влияние дырки на спиновую систему отсутствует. Это, безусловно, связано с одномерностью задачи. Как показывают численные расчеты конечных кластеров [2], в двумерном случае указанные корреляторы зависят от j .

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Brinkman W. F., Rice T. M. // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. N 5. P. 1324—1338.
- [2] Elser V., Huse D. A., Shraiman B. I., Siggia E. D. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. N 10. P. 6715—6723.
- [3] Sega I., Prelovsek P. // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. N 1. P. 892—897.
- [4] Szczepanski K. J., Horsch P., Stephan W., Ziegler M. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. N 4. P. 2017—2029.
- [5] Dagotto E., Joint R., Moreo A., Bacci S., Gagliano E. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. N 13. P. 9049—9073.
- [6] Bonca J., Prelovsek P., Sega I. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 10. P. 7074—7080.
- [7] Trugman S. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 4. P. 1597—1603.
- [8] Kane C., Lee P., Read N. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 10. P. 6880—6897.
- [9] Sachdev S. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 16. P. 12232—12247.
- [10] Ziegler M., Horsch P. // Dynamics of magnetic fluctuations in high temperature superconductors / Ed. G. Reiter, P. Horsch and G. Psaltakis. Plenum, New York, 1990.
- [11] Schmitt-Rink S., Varma C., Ruckenstein A. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. N 24. P. 2793—2800.
- [12] Годен М. Волновая функция Бете. М.: Мир, 1987.
- [13] Овчинников А. А. // Письма в ЖЭТФ. 1967. Т. 5. № 2. С. 48—51.

- [14] Takahashi M. // *Progr. Theor. Phys.* 1971. V. 46. N 2. P. 401—405.
[15] Faddeev L. D., Takhtajan L. A. // *Phys. Lett. A.* 1981. V. 85. N 6—7. P. 375—377.
[16] Кривнов В. Я., Овчинников А. А., Черановский В. О. // *ТМФ.* 1990. Т. 82. № 2. С. 216—223; *Synt. Metals.* 1989. V. 33. P. 65—79.
[17] Ogata M., Shiba H. // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 41. N 5. P. 2326—2341.
[18] Anderson P. W., Shastry B. S., Hristopoulos D. // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 40. N 13. P. 8939—8944.
[19] Lederer P., Poilblanc D., Rice T. M. // *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 63. N 14. P. 1519—1522.

Институт химической физики
им. Н. Н. Семенова
Москва

Поступило в Редакцию
5 мая 1991 г.