

Об основном состоянии системы сильно коррелированных фермионов в магнитном поле

© Ю.Б. Кудасов

Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики,
607180 Саров, Нижегородская обл., Россия

E-mail: kudasov@ntc.vniief.ru

(Поступила в Редакцию 28 декабря 2000 г.)

При помощи нового вариационного метода исследовано основное состояние модели Хаббарда с половинным заполнением в магнитном поле для одномерной цепочки, плоской квадратной и простой кубической решеток. В одномерной цепочке и простой квадратной решетке обнаружен метамагнитный переход. В случае простой кубической решетки метамагнитный переход отсутствовал.

Работа выполнена в рамках проекта № 829 Международного научно-технического центра.

1. В работах [1,2] разработан новый вариационный метод расчета энергии основного состояния системы сильно коррелированных фермионов, который позволяет учесть влияние сильного ближнего порядка в металлической фазе. При помощи этого метода исследовались парамагнитная и антиферромагнитная фазы модели Хаббарда с половинным заполнением зоны. Было показано, что для промежуточной связи (кулоновская энергия порядка ширины зоны) ближний порядок оказывает сильное влияние на энергию основного состояния системы. В последнее время появилось много работ, посвященных экспериментальному исследованию ближнего порядка в сильно коррелированных системах (например, [3]), в том числе и в сильном магнитном поле [4,5]. Поэтому представляет интерес обобщение результатов [1,2] на случай ненулевого магнитного поля.

В данной работе выполняется вариационный расчет энергии основного состояния для модели Хаббарда

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - mh, \quad (1)$$

где $a_{i\sigma}^+$ ($a_{i\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) фермиона спина $\sigma = \uparrow, \downarrow$ на i -м узле решетки. Индекс $\langle ij \rangle$ обозначает суммирование только по ближайшим соседям, $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$, $m = \langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle$ — магнитный момент, t — энергия переноса заряда, U — энергия корреляции, h — магнитное поле. Предполагается половинное заполнение исходной зоны, т.е. $\langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle = 1$. Вычисления выполняются для парамагнитной фазы одномерной (1D) цепочки, плоской квадратной (2D) и простой кубической (3D) решеток.

2. В работе [1] показано, что для учета короткодействующих корреляций необходимо обобщить пробную волновую функцию Гутцвиллера [6,7] следующим образом:

$$|\psi\rangle = \prod_{\lambda} g_{\lambda}^{P_{\lambda}} |\varphi_0\rangle, \quad (2)$$

где в произведение, кроме гутцвиллеровского сомножителя, входит набор проекционных операторов P_{λ} на все возможные конфигурации состояния узла решетки и

пары соседних узлов. Вещественные параметры g_i лежат в диапазоне $[0, \infty)$, что позволяет как уменьшать, так и увеличивать амплитуды различных конфигураций пары узлов, т.е. изменять структуру ближнего порядка. $|\varphi_0\rangle$ — исходная N -частичная волновая функция некоррелированных электронов, например состояний, ограниченных поверхностью Ферми,

$$\prod_{\mathbf{k} < V_{F\uparrow}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \prod_{\mathbf{k} < V_{F\downarrow}} a_{\mathbf{k}\downarrow}^+ |0\rangle, \quad (3)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор фермиона, $V_{F\sigma}$ — объем в импульсном пространстве, ограниченный поверхностью Ферми фермионов со спином σ .

Построим пробную волновую функцию для ПМ фазы полузаполненной зоны с произвольным полным моментом. Имеются четыре проекционных оператора, выделяющих определенное состояние узлов решетки. Из этих операторов для нас представляет интерес только оператор проектирования на двукратно занятые состояния

$$\hat{X} = \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.$$

Кроме того, имеются десять проекционных операторов на состояния пар ближайших узлов, например

$$\hat{Y}_1 = \sum_{\langle ij \rangle} (1 - n_{i\uparrow})(1 - n_{i\downarrow})(1 - n_{j\uparrow})(1 - n_{j\downarrow}),$$

$$\hat{Y}_2 = \sum_{\langle ij \rangle} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \quad (4)$$

и т.д. (см. таблицу). По сравнению со случаем нулевого полного момента [1,2] вырождение операторов \hat{Y}_{λ} частично снято.

Далее ограничим наше рассмотрение решетками, у которых полное число пар ближайших соседей равно $zL/2$, где z — число ближайших соседей узла, L — полное число узлов решетки. Определим нормированные собственные значения операторов (3) и (4) как

$$x|\Phi\rangle = L^{-1}\hat{X}|\Phi\rangle,$$

$$y_{\lambda}|\Phi\rangle = (zL/2)^{-1}\hat{Y}_{\lambda}|\Phi\rangle. \quad (5)$$

Операторы проектирования на различные состояния пары узлов решетки и соответствующие им конфигурации

Оператор	Конфигурация		Кратность вырождения
	узел i	узел j	
\hat{Y}_1			1
\hat{Y}_2	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	1
\hat{Y}_3	$\uparrow\downarrow$		2
\hat{Y}_4	\uparrow		2
\hat{Y}_5	\downarrow		2
\hat{Y}_6	\uparrow	\uparrow	1
\hat{Y}_7	\uparrow	\downarrow	2
\hat{Y}_8	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	2
\hat{Y}_9	$\uparrow\downarrow$	\downarrow	2
\hat{Y}_{10}	\downarrow	\downarrow	1

Тогда собственные значения оказываются связанными условиями нормировки [8]

$$\sum_{\lambda} x_{\lambda} = 1, \quad \sum_{\lambda} \beta_{\lambda} y_{\lambda} = 1, \quad (6)$$

где β_{λ} — кратность вырождения, и самосогласованности [8]

$$\begin{aligned} y_1 + y_3 + y_4 + y_5 &= x, \\ y_2 + y_3 + y_8 + y_9 &= x, \\ y_4 + y_6 + y_7 + y_8 &= 1/2 + m/2 - x, \\ y_5 + y_7 + y_9 + y_{10} &= 1/2 - m/2 - x. \end{aligned} \quad (7)$$

Для половинного заполнения сохраняется электрон-дырочная симметрия, поэтому возникают дополнительные условия

$$y_1 = y_2, \quad y_4 = y_5, \quad y_8 = y_9. \quad (8)$$

Теперь в качестве независимых параметров можно выбрать m, x, y_3, y_4, y_5 и y_7 , а зависимыми параметрами будут

$$\begin{aligned} y_2 &= x - y_3 - y_4 - y_5, \\ y_6 &= 1/2 + m/2 - x - y_7 - 2y_4, \\ y_{10} &= 1/2 - m/2 - x - y_7 - 2y_5. \end{aligned} \quad (9)$$

Учитывая вырождение, запишем пробную волновую функцию как

$$|\psi(m)\rangle = g_0^x g_3^{\beta_3 \hat{Y}_3} g_4^{4\beta_4 \hat{Y}_4} g_5^{2\beta_5 \hat{Y}_5} g_7^{\beta_7 \hat{Y}_7} |\varphi_0(m)\rangle. \quad (10)$$

Следует обратить внимание на то, что при разложении исходной волновой функции в виде суперпозиции по конфигурациям все конфигурации имеют один и тот же полный спин. Поэтому оператор в правой части (10) не должен изменять магнитный момент. Тогда магнитный момент исходной волновой функции соответствует моменту пробной волновой функции.

3. Вычислим норму пробной волновой функции. Ее можно представить как

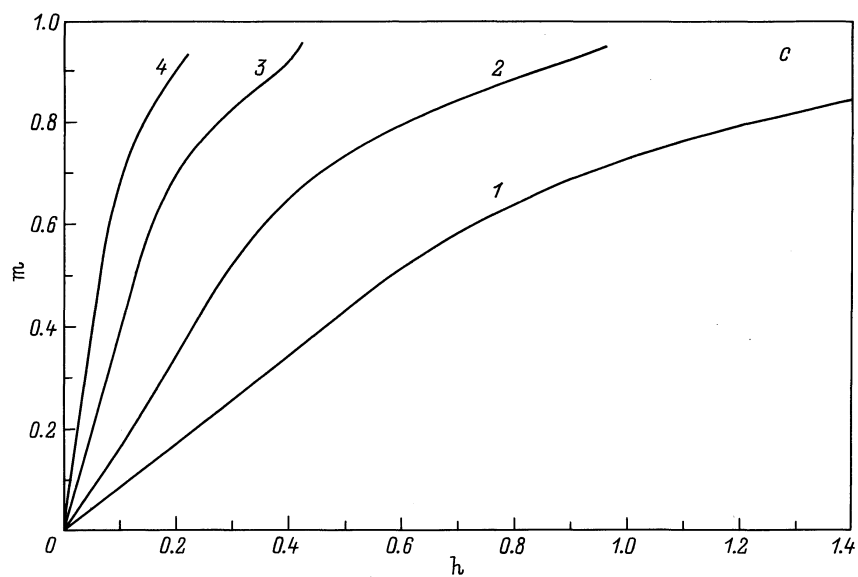
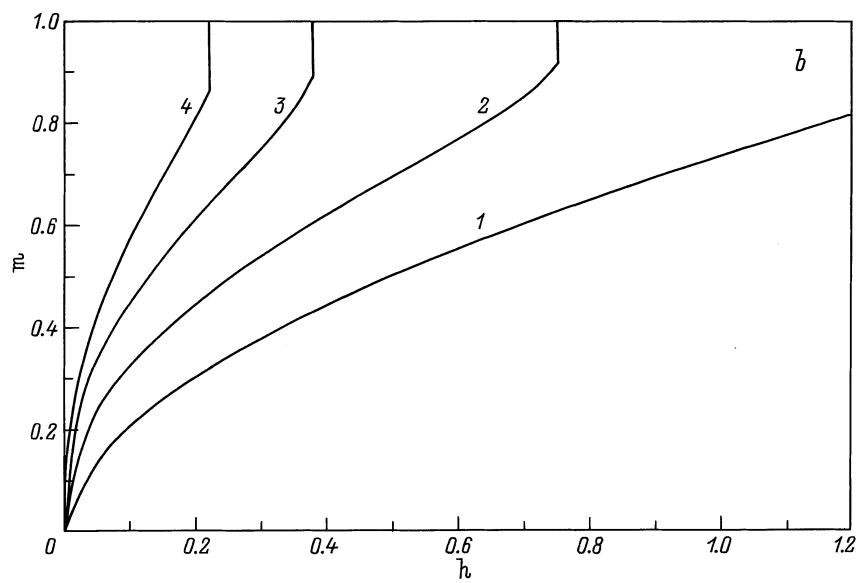
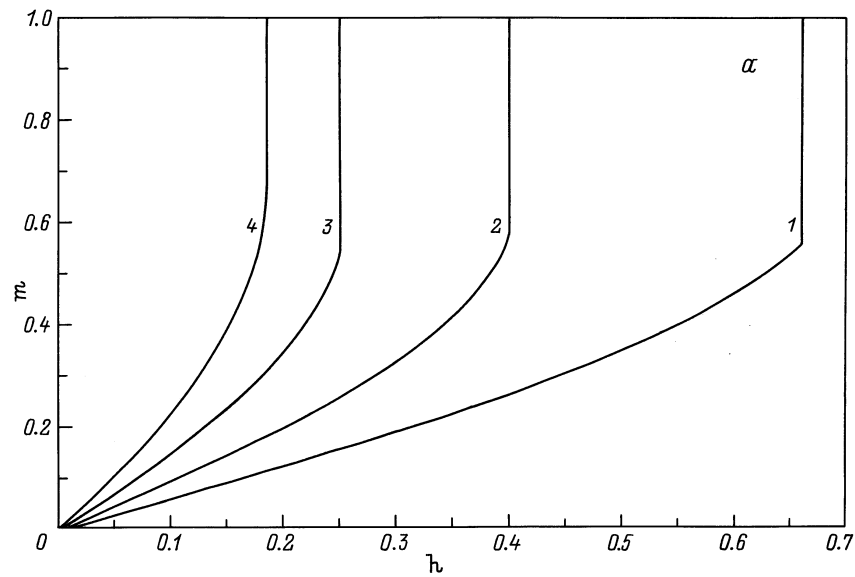
$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= A(m) \\ &\times \sum_{\{x, y_3, y_4, y_5, y_7\}} W_{\{x, y_3, y_4, y_5, y_7, m\}} g_0^{2Lx} g_3^{2zLy_3} g_4^{4zLy_4} g_5^{4zLy_5} g_7^{2zLy_7} \\ &= A(m) \sum_{\{x, y_3, y_4, y_5, y_7\}} R_{\{x, y_3, y_4, y_5, y_7, m\}}. \end{aligned} \quad (11)$$

Суммирование в (11) выполняется по всем наборам $\{x, y_3, y_4, y_5, y_7\}$. $W_{\{x, y_3, y_4, y_5, y_7, m\}}$ — число конфигураций, соответствующих набору $\{x, y_3, y_4, y_5, y_7\}$ при некотором значении m . Нормировочный множитель $A(m)$ зависит от полного спина. Нет необходимости в его вычислении, так как он будет автоматически учтен при нормировке матрицы плотности. Для решеток, имеющих замкнутые пути, можно вычислить (11) лишь приближенно. Следуя работе [2], используем для этого метод псевдоансамбля Кикучи [9]. В пределе большого числа частиц $L \rightarrow \infty$, как обычно [1,2,7], можно ограничиться суммированием только тех членов ряда (11), которые близки к максимуму. Вместо максимума функции R удобно искать максимум ее логарифма. Преобразуем все факториалы, входящие в R , при помощи асимптотической формулы Стирлинга. Затем логарифмируем полученное выражение и удержим только главные члены по L . Тогда получаем

$$\begin{aligned} L^{-1} \ln W &= (z-1)[2x \ln x + (1/2 + m/2 - x) \\ &\times \ln(1/2 + m/2 - x) + (1/2 - m/2 - x) \\ &\times \ln(1/2 - m/2 - x)] - \frac{z}{2}(2y_2 \ln y_2 \\ &+ 2y_3 \ln y_3 + 4y_4 \ln y_4 + 4y_5 \ln y_5 \\ &+ y_6 \ln y_6 + 2y_7 \ln y_7 + y_{10} \ln y_{10}). \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь и далее y_2, y_6 и y_{10} используются как сокращенная запись (9). Необходимыми условиями максимума (12) будут уравнения [1,2] $\partial(\ln R)/\partial \eta_{\lambda} = 0$, где $\eta_{\lambda} = x, y_3, y_4, y_5, y_7$. Эти уравнения позволяют выразить g_{λ} через x и y_{λ} . Тогда получаем

$$\begin{aligned} g_0 &= \left(\frac{(1/2 + m/2 - x)(1/2 - m/2 - x)}{x^2} \right)^{(z-1)/2} \\ &\times \left(\frac{y_2^2}{y_6 y_{10}} \right)^{z/4}, \\ g_3 &= \sqrt{\frac{y_3}{y_2}}, \quad g_4 = \sqrt{\frac{y_4}{\sqrt{y_6 y_2}}}, \\ g_5 &= \sqrt{\frac{y_5}{\sqrt{y_{10} y_2}}}, \quad g_7 = \sqrt{\frac{y_7}{\sqrt{y_6 y_{10}}}}. \end{aligned} \quad (13)$$



Зависимости магнитного момента от магнитного поля при различных значениях энергии корреляции $I = U/8\varepsilon_0(0)$: $I = 0.4$ (1), 0.6 (2), 0.8 (3), 1 (4). 1D цепочка (a), плоская квадратная (b) и простая кубическая решетки (c).

Для вычисления энергии основного состояния гамильтониана (1) необходимо вычислить матрицу плотности первого порядка на пробной функции

$$\rho = L^{-1} \frac{\langle \psi | \sum_{(i),\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \text{h.c.}) | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (14)$$

Процедура вычисления матрицы плотности подробно описана в [2]. ρ можно представить в виде суммы двух слагаемых $\rho = \rho_{\text{band}} + \rho_{\text{inter}}$, где первый член отвечает за движение фермиона в подзонах Хаббарда, а второй — за переходы между подзонами. В результате прямых вычислений получаем

$$\rho_{\text{band}} = 4y_4 \left[\frac{L_1^2}{x(1/2 + m/2 - x)} \right]^{z-1} + 4y_5 \left[\frac{L_2^2}{x(1/2 - m/2 - x)} \right]^{z-1},$$

$$\rho_{\text{inter}} = 8\sqrt{y_3 y_7} \left(\frac{L_1 L_2}{x\sqrt{(1/2 + m/2 - x)(1/2 - m/2 - x)}} \right), \quad (15)$$

где

$$L_1 = \sqrt{y_2 y_4} + \sqrt{y_3 y_4} + \sqrt{y_4 y_6} + \sqrt{y_5 y_7},$$

$$L_2 = \sqrt{y_2 y_5} + \sqrt{y_3 y_5} + \sqrt{y_4 y_7} + \sqrt{y_5 y_{10}}.$$

Теперь полную энергию системы коррелированных фермионов можно представить в гуцвиллеровской форме [6]

$$E = \frac{1}{L} \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = q(m) \varepsilon_0(m) + xU, \quad (16)$$

где $q = \rho(m)/\rho_0(m)$, $\rho_0(m)$ — значение матрицы плотности некоррелированных фермионов, т.е. при $U = 0$ с заданным спиновым моментом, $\varepsilon_0(m)$ — средняя энергия некоррелированных фермионов как функция спинового момента. Нетрудно видеть, что такая нормировка дает правильное значение полной энергии системы при $U = 0$ и произвольном спиновом моменте, т.е. мы автоматически учли нормировочный множитель в выражении (11).

4. Расчет энергии основного состояния парамагнитной фазы выполнялся (а) для линейной однородной цепочки $z = 2$ с законом дисперсии $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2 \cos k_x$, (б) для плоской квадратной решетки $z = 4$, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2[\cos(k_x) + \cos(k_y)]$ и (с) для простой кубической решетки $z = 6$, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2[\cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_z)]$. Средняя энергия некоррелированного фермиона, нормированная на один узел решетки, определялась как

$$\varepsilon_0(m) = \frac{1}{V_{BZ}} \int_{BZ} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} \theta(\varepsilon_{F\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}) d\mathbf{k}, \quad (17)$$

где $\varepsilon_{F\sigma} = -\varepsilon_{F-\sigma}$, интегрирование выполняется по зоне Бриллюэна, V_{BZ} — объем зоны Бриллюэна, $\theta(x) = 0$ при

$x < 0$, $\theta(x) = 1$ при $x > 0$. Поскольку предполагается половинное заполнение зоны, средние энергии фермионов с разными спинами одинаковы.

Энергия основного состояния вычислялась численной минимизацией полной энергии системы фермионов по шести переменным (m, x, y_3, y_4, y_5, y_7). На рисунке приведены графики зависимости магнитного момента от магнитного поля. Для плоской квадратной решетки возникают трудности при минимизации вблизи в узкой области $m = 0$. В этой области энергия системы фермионов оказывается почти плоской функцией момента. На рисунке, часть б, видно, что магнитная восприимчивость становится очень большой. Такое поведение связано с тем, что в центре спектра квадратной решетки имеется особенность ван Хофа. Плотность состояний в этой точке логарифмически расходится [10], т.е. магнитная восприимчивость стремится к бесконечности. Корреляции даже несколько усиливают эту особенность (см. рисунок, часть б). Если в качестве модельного спектра выбирается, например, эллиптическая зона Хаббарда [7], в спектре которой особенность отсутствует, то проблемы минимизации не возникают. Был также исследован предел бесконечномерной решетки. Для этого была вычислена энергия основного состояния решеток с $z = 10, 20, 40$ и исходным спектром $z/2$ -мерной гиперкубической решетки. Результат расчета с увеличением z быстро сходится к решению Гутцвиллера [7], что связано с ослаблением пространственных корреляций с увеличением размерности решетки.

В расчетах, выполненных выше, мы пренебрегли расщеплением фермионного спектра на уровни Ландау. Наибольший интерес представляют результаты, полученные при больших U (порядка ширины зоны и больше). Можно показать, что в этом случае эффективные массы $\propto q^{-1}$ носителей велики, поэтому расщепление спектра на уровни Ландау ($\Delta\varepsilon \propto q$) малосущественно. В принципе его можно учесть через функцию $\varepsilon_0(m)$.

На графиках видно возникновение метамагнитного перехода при больших U для 1D цепочки и плоской квадратной решетки. Для простой кубической решетки метамагнитный переход не возникал вплоть до $I = 1$. Таким образом, особенности спектра и размерность решетки важны для решения вопроса о метамагнитном переходе в сильно коррелированной системе, поэтому вывод о таком переходе, сделанный на основании анализа бесконечномерной решетки [6], не всегда справедлив для реальных решеток.

Автор признателен проф. Дж. Бруксу и др., а также В. Левису за неоценимую поддержку.

Список литературы

- [1] Yu.B. Kudasov. Phys. Lett. **A245**, 153 (1998).
- [2] Ю.Б. Кудасов. ЖЭТФ **117**, 3 (2000).
- [3] W. Bao, C. Broholm, G. Aeppli, S.A. Carter, P. Dai, C.D. Frost, J.M. Honig, P. Metcalf. J. Magn. Magn. Mater. **177–181**, 283 (1998).

- [4] Ю.Б. Кудасов, А.Г. Волков, А.А. Повзнер, П.В. Баянкин, А.И. Быков, В.Г. Гук, М.И. Долотенко, Н.П. Колокольчиков, В.В. Крюк, М.П. Монахов, И.М. Маркевцев, В.В. Платонов, В.Д. Селемир, О.М. Таценко, А.В. Филиппов. *ЖЭТФ* **116**, 11, 1770 (1999).
- [5] G. Aeppli, E. Bucher, T.E. Mason. In: *Physical Phenomena at High Magnetic Fields* / Ed. by E. Manousakis et al. Addison-Wesley, Redwood City (1992). P. 175.
- [6] M.C. Gutzwiller. *Phys. Rev.* **137**, 6A, 1726 (1965).
- [7] D. Vollhardt. *Rev. Mod. Phys.* **56**, 1, 99 (1984).
- [8] Дж. Займан. *Модели беспорядка*. Мир, М. (1982).
- [9] R. Kikuchi, S.G. Brush. *J. Chem. Phys.* **47**, 195 (1967).
- [10] P. Fazekas. *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. World Scientific, Singapore (1999).