Вычисление магнитной восприимчивости двумерной двухрешеточной 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 29 июля 2004 г.)

В приближении статических флуктуаций вычисляется поперечная динамическая восприимчивость в двумерной двухрешеточной модели Хаббарда. Исследуется поведение статической магнитной восприимчивости в зависимости от различных параметров системы. В частном случае одномерной модели Хаббарда проводится сравнение с результатом точного решения.

В [1,2] была разработана методика решения модели Хаббарда [3] в приближении статических флуктуаций. В [4] вычислена и исследована энергия основного состояния двумерной двухрешеточной модели Хаббарда [5]. Сравнение полученных в [4] результатов с точным решением одномерной модели Хаббарда [6] показало, что приближение статических флуктуаций довольно адекватно передает поведение системы, описываемой гамильтонианом Хаббарда, как в области слабых, так и в области сильных корреляций. В [4] показано, что пределах $U = 0$ и $U = \infty$ энергии основного состояния в приближении статических флуктуаций [1,2] и в случае точного решения [6] совпадают, в области промежуточных значений U имеется хорошее согласие с точным решением. Это позволяет сделать вывод о том, что приближение статических флуктуаций хорошо работает как при слабых, так и при промежуточных и сильных корреляциях, что особенно важно в случае слоистых купратов [5].

Цель настоящей работы — вычисление и исследование поперечной динамической восприимчивости двумерной модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций.

Исследованию магнетизма в модели Хаббарда посвящено большое число работ (см., например, [7–15]). Теория ферромагнетизма в модели коллективизированных электронов в рамках приближения молекулярного поля была развита Стонером [13]. Но оказалось, что при конечных температурах теория Стонера не дает последовательного описания всех физических свойств магнитных переходных металлов. Развитие теории Стонера связано с использованием Хаббардом [3] расщепления запаздывающих функций Грина и применением приближения случайных фаз [7]. Однако и применение этих методов не устранило основные недостатки теории Стонера, возникающие при описании магнитных и термодинамических свойств при конечных температурах.

Дальнейший прогресс в вычислении восприимчивости связан с использованием диаграммной техники для операторов Хаббарда [14,15]. Эта техника является обобщением диаграммной техники [16–19] для спиновых операторов локализованных магнитных моментов. Если в случае локализованных электронов обоснование диаграммного анализа не вызывает сложностей (можно, например, с учетом кондовских аномалий [20] вычислить поперечную динамическую восприимчивость связанной системы коллективизированных и локализованных электронов с точностью до третьего порядка по константе $s-d$-обменного взаимодействия) [21,22], то в случае модели Хаббарда диаграммная техника как четкий геометрический алгоритм не построена и структура диаграммных рядов не выяснена [8]. Например, „неизвестен способ, которым можно было бы априори получить графические ряды, не связанные с какой-либо определенной системой старшинств“ [8]. В последнее время для исследования восприимчивости в модели Хаббарда интенсивно используется численный анализ с помощью квантового метода Монте-Карло (см. [11]). Но во многих случаях необходимо иметь аналитические решения для восприимчивости, поэтому вычисление динамической восприимчивости представляет собой актуальную задачу, особенно если учесть, что появились новые эксперименты, требующие объяснения [23,24].

Гамильтониан $B-B'-U$ двумерной двухрешеточной модели Хаббарда (в отличие от стандартной модели Хаббарда по аналогии с [5] полагается, что решетка состоит из двух подрешеток, построенных из атомов разных сортов; кроме того, учитывается переход электронов на второй по близости соседний атом кристаллической решетки) имеет вид

$$H = H_0 + V, \tag{1}$$

$$H_0 = \sum_{\sigma, f\in A}\Big(\varepsilon_1 + \frac{1}{2}\sigma\omega_{e1}\Big)n_{f\sigma} + \sum_{\sigma, l\in C}\Big(\varepsilon_2 + \frac{1}{2}\sigma\omega_{e2}\Big)n_{l\sigma} + \sum_{\sigma, f, l} B_{fl}(a^+_{f\sigma}a_{l\sigma} + a^+_{l\sigma}a_{f\sigma}) + \sum_{\sigma, l', l} B_{l'l}a^+_{l'\sigma}a_{l\sigma}, \tag{2}$$

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

где $a^+_{j\sigma}, a_{j\sigma}$ — Ферми-операторы рождения и уничтожения электронов на узле j $(j = f, l)$ решетки со спином σ; $n_{f\sigma} = a^+_{f\sigma}a_{f\sigma}$; $\varepsilon_1(\varepsilon_2)$ — собственная энергия электрона на узле подрешетки $A(C)$; $B_{fl} = B(f - l)$, $B_{l'l} = B(l' - l)$ — интегралы переноса, описывающие перескоки электронов от атома к атому за счет кинетической энергии и кристаллического поля на ближайший соседний узел и на второй ближайший соседний узел по диагонали квадрата соответственно; $\bar{\sigma} = -\sigma$; ω_{e1}, ω_{e2} — зеемановские частоты электронов разных подрешеток; $U_1(U_2)$ — энергия кулоновского отталкивания двух электронов, находящихся на узле подрешетки $A(C)$. Для того чтобы приблизить поведение системы, описываемой гамильтонианом (1), к ситуации, возникающей при движении дырок на плоскостях CuO_2 в ВТСП-соединениях, полагается, что лишь электроны одной подрешетки (по аналогии с кислородом на плоскостях CuO_2) могут переноситься по диагонали квадрата на узлы этой же подрешетки (подчеркнем, что нами для простоты рассуждений рассматривается гипотетическая квадратная решетка).

Магнитное возбуждение электронов представим операторами

$$S_a^-(p, q) = a^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow}, \quad S_b^-(p, q) = b^+_{p\downarrow} b_{p+q\uparrow}.$$

Здесь электрон с волновым вектором $p + q$ и спином вверх ($\uparrow$) возбуждается в состояние с волновым вектором p и спином вниз ($\downarrow$), индекс a относится к подрешетке A, индекс b — к подрешетке C. Если операторы спиновой плотности выразить в представлении Гейзенберга

$$S_a^-(p, q, \tau) = \exp(H\tau) a^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow} \exp(-H\tau),$$

будем иметь следующее уравнение движения:

$$\frac{d}{d\tau} a^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow} = -\omega_{e1} a^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow} + B(p) b^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow}$$
$$- B(p+q) a^+_{p\downarrow} b_{p+q\uparrow} + \frac{2U_1}{N} \sum_{k_2,k} a^+_{k+p-k_2\downarrow} a_{p+q\uparrow} a^+_{k_2\uparrow} a_{k\uparrow}$$
$$- \frac{2U_1}{N} \sum_{k_1,k} a^+_{k+k_1-p-q\downarrow} a_{k_1\downarrow} a^+_{p\downarrow} a_{k\uparrow}, \qquad (4)$$

где $B(p) = -2B\big(\cos(p_x a) + \cos(p_y a)\big)$; подобным образом можно выразить и $B(p+q)$. Аналогично записываются уравнения движения для операторов $b^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow}$, $a^+_{p\downarrow} b_{p+q\uparrow}$ и $b^+_{p\downarrow} b_{p+q\uparrow}$.

Рассмотрим последние слагаемые в дифференциальном уравнении (4). В теории Стонера [13], которая основывается на приближении Хартри–Фока, ограничиваются вкладом [7]

$$\frac{2U_1}{N} \sum_{k_2,k} a^+_{k+p-k_2\downarrow} a_{p+q\uparrow} a^+_{k_2\uparrow} a_{k\uparrow}$$
$$- \frac{2U_1}{N} \sum_{k_1,k} a^+_{k+k_1-p-q\downarrow} a_{k_1\downarrow} a^+_{p\downarrow} a_{k\uparrow}$$
$$= \frac{2U_1}{N} \sum_{k} \big(\langle n_{k\uparrow}\rangle - \langle n_{k\downarrow}\rangle\big) a^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow}$$
$$= 2U_1 S a^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow} = 2U_1 S S_a^-(p, q). \qquad (5)$$

В (5) введено понятие спина S следующим образом:

$$2S = 2\langle S_z\rangle = \frac{2}{N} \sum_k \big(\langle n_{k\uparrow}\rangle - \langle n_{k\downarrow}\rangle\big).$$

Выделим в последних двух слагаемых в (4) по аналогии с [1,2] оператор флуктуации проекции спина. В результате получим

$$\frac{d}{d\tau} a^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow} = (-2SU_1 - \omega_{e1}) a^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow} + B(p) b^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow}$$
$$- B(p+q) a^+_{p\downarrow} b_{p+q\uparrow} - 2U_1 \Delta S a^+_{p\downarrow} a_{p+q\uparrow}, \qquad (6)$$

где ΔS — оператор флуктуации спина,

$$\Delta S = \frac{1}{N} \sum_k (n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) - \frac{1}{N} \sum_k \big(\langle n_{k\uparrow}\rangle - \langle n_{k\downarrow}\rangle\big).$$

Гейзенберговские операторы представим следующим образом [1,2]:

$$S^-(p, q, \tau) = \exp(H_0\tau) \tilde{S}^-(p, q, \tau) \exp(-H_0\tau), \qquad (7)$$

где

$$\tilde{S}^-(p, q, \tau) = \exp(-H_0\tau) \exp(H\tau) S^-(p, q, 0)$$
$$\times \exp(-H\tau) \exp(H_0\tau). \qquad (8)$$

Представление гейзенберговских операторов в виде (7) будем условно называть представлением „типа представления взаимодействия“. Отметим, что гамильтониан H_0 в (7) — это тот же гамильтониан H_0, что и в (1), с учетом перенормировки

$$\varepsilon \to \varepsilon + U\left(\frac{1}{2} - \sigma S\right).$$

В этом случае получим систему двух дифференциальных уравнений для определения неизвестного оператора (8) и оператора $\Delta \tilde{S} \tilde{S}^-(p, q, \tau)$

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{S}_a^-(p, q, \tau) = -2U_1 \Delta\tilde{S} \tilde{S}_a^-(p, q, \tau),$$

$$\frac{d}{d\tau} \Delta\tilde{S} \tilde{S}_a^-(p, q, \tau) = 4SU_1 \Delta\tilde{S} \tilde{S}_a^-(p, q, \tau)$$
$$- 2U_1 \Phi^2 \tilde{S}_a^-(p, q, \tau), \qquad (9)$$

где мы ввели обозначение $\Phi^2 = 1/4 - S^2$, а также при получении системы уравнений (9) учли, что для оператора флуктуации проекции спина $\Delta\tilde{S}(\tau) = \exp(-H_0\tau) \times \Delta S(\tau)\exp(H_0\tau)$ выполняется равенство

$$\frac{d}{d\tau}\Delta\tilde{S}(\tau) = 0,$$

поэтому $\Delta\tilde{S}(\tau) = \Delta S(0) = \Delta S$, причем $(\Delta S)^2 = \Phi^2 - 2S\Delta S$. Последняя формула легко доказывается, если оператор числа частиц выразить через оператор флуктуации спина и воспользоваться равенством $n_{f\sigma}^2 = n_{f\sigma}$.

Решение системы дифференциальных уравнений (8) для оператора $\tilde{S}_a^-(p,q,\tau)$ имеет вид

$$\tilde{S}_a^-(p,q,\tau) = \exp(2U_1S\tau)\big\{S_a^-(p,q,0)[\mathrm{ch}(U_1\tau) - 2S\,\mathrm{sh}(U_1\tau)] - 2\Delta S S_a^-(p,q,0)\,\mathrm{sh}(U_1\tau)\big\}. \quad (10)$$

Тогда общее решение дифференциального уравнения (4) будет иметь вид

$$S_a^-(p,q,\tau) = \exp(H_0\tau)\tilde{S}_a^-(p,q,\tau)\exp(-H_0\tau)$$
$$= \exp(2U_1S\tau)\Big\{\bar{S}_a^-(p,q,\tau)[\mathrm{ch}(U_1\tau) - 2S\,\mathrm{sh}(U_1\tau)] - 2\Delta S(0)\bar{S}_a^-(p,q,\tau)\,\mathrm{sh}(U_1\tau)\Big\}, \quad (11)$$

где $\bar{S}_a^-(p,q,\tau) = \exp(H_0\tau)S_a^-(p,q,0)\exp(-H_0\tau)$.

Решив систему четырех дифференциальных уравнений, можно получить решения для операторов спиновой плотности

$$\bar{S}_a^-(k,q,\tau) = \frac{1}{4}\Bigg\{\Bigg[a_{p\downarrow}^+a_{p+q\uparrow}(0)\left(1 - \frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right)\left(1 + \frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right) - a_{p\downarrow}^+b_{p+q\uparrow}(0)\left(1 - \frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right)\frac{B_{p+q}}{t_{p+q}} + b_{p\downarrow}^+a_{p+q\uparrow}(0)$$
$$\times \frac{B_p}{t_p}\left(1 + \frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right) - b_{p\downarrow}^+b_{p+q\uparrow}(0)\frac{B_p}{t_p}\frac{B_{p+q}}{t_{p+q}}\Bigg]e^{(t_p+t_{p+q})\tau} + \Bigg[a_{p\downarrow}^+a_{p+q\uparrow}(0)\left(1 - \frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right)\left(1 - \frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right)$$
$$+ a_{p\downarrow}^+b_{p+q\uparrow}(0)\frac{B_{p+q}}{t_{p+q}}\left(1 - \frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right) + b_{p\downarrow}^+a_{p+q\uparrow}(0)\frac{B_p}{t_p}\left(1 - \frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right) + b_{p\downarrow}^+b_{p+q\uparrow}(0)\frac{B_p}{t_p}\frac{B_{p+q}}{t_{p+q}}\Bigg]e^{(t_p-t_{p+q})\tau}$$
$$+ \Bigg[a_{p\downarrow}^+a_{p+q\uparrow}(0)\left(1 + \frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right)\left(1 + \frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right) - a_{p\downarrow}^+b_{p+q\uparrow}(0)\left(1 + \frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right)\frac{B_{p+q}}{t_{p+q}} - b_{p\downarrow}^+a_{p+q\uparrow}(0)$$
$$\times \frac{B_p}{t_p}\left(1 + \frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right) - b_{p\downarrow}^+b_{p+q\uparrow}(0)\frac{B_p}{t_p}\frac{B_{p+q}}{t_{p+q}}\Bigg]e^{(-t_p+t_{p+q})\tau} + \Bigg[a_{p\downarrow}^+a_{p+q\uparrow}(0)\left(1 + \frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right)\left(1 - \frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right)$$
$$+ a_{p\downarrow}^+b_{p+q\uparrow}(0)\left(1 + \frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right)\frac{B_{p+q}}{t_{p+q}} - b_{p\downarrow}^+a_{p+q\uparrow}(0)\frac{B_p}{t_p}\left(1 - \frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right) - b_{p\downarrow}^+b_{p+q\uparrow}(0)\frac{B_p}{t_p}\frac{B_{p+q}}{t_{p+q}}\Bigg]$$
$$\times e^{(-t_p-t_{p+q})\tau}e^{\frac{1}{2}\left(-\omega_{e1}-\omega_{e2}+J_p-J_{p+q}+2S(U_2-U_1)\right)\tau}\Bigg\}, \quad (12)$$

где

$$\varepsilon_{1\sigma} = \varepsilon_1 + \frac{1}{2}\omega_{e1} + \left(\frac{1}{2} + \sigma S\right)U_1,$$

$$\varepsilon_{2\sigma} = \varepsilon_2 + \frac{1}{2}\omega_{e2} + \left(\frac{1}{2} - \sigma S\right)U_2 + J_{p+q}\delta_{\uparrow,\sigma} + J_P\delta_{\downarrow,\sigma},$$

$$t_p = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2}\right) + B_p^2},$$

$$t_{p+q} = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2}\right) + B_{p+q}^2},$$

$$J_p = -4B'\cos(p_xa)\cos(p_ya),$$

$$J_{p+q} = -4B'\cos\big((p_x+q_x)a\big)\cos\big((p_y+q_y)a\big).$$

Аналогичное выражение можно получить для оператора спиновой плотности $\bar{S}_b^-(k,q)$. Подставляя полученное выражение для $\bar{S}_a^-(k,q)$ в формулу (11), получим общее решение для оператора $S_a^-(p,q,\tau)$. Подобная процедура проводится для оператора $S_b^-(p,q,\tau)$. Имея эти решения, вычислим поперечную динамическую восприимчивость электронов подрешеток A и C.

Поперечная динамическая восприимчивость определяется следующим образом:

$$\chi^{+-}(q,\omega) = i\int_0^\infty dte^{-i\omega t}\sum_{p,p'}\Big\langle\big[S_a^-(p,q,t) + S_b^-(p,q,t), \quad S_a^+(p',-q,0) + S_b^+(p',-q,0)\big]\Big\rangle. \quad (13)$$

Используя формулу (11) и решение для $S_b^-(p,q,\tau)$, можно получить выражение для поперечной динамической восприимчивости, которое весьма громоздко. Применительно к случаю высокотемпературной сверхпроводимости нас в первую очередь интересует случай сильных корреляций. Показано [2], что в этом случае $S = 1/2$. В частном случае сильных корреляций и $n = 1$ получим следующее выражение для суммарной поперечной восприимчивости системы:

$$\chi^{+-}(q,\omega)=\chi^{+-}_{aa}(q,\omega)+\chi^{+-}_{ab}(q,\omega)+\chi^{+-}_{ba}(q,\omega)+\chi^{+-}_{bb}(q,\omega)$$

$$=\sum_p\sum_{\beta,\gamma}\frac{1}{4}\left\{\frac{\left(\langle n^a_{p\downarrow}\rangle-\langle n^a_{p+q\uparrow}\rangle\right)\left[\left(1-\frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2\beta t_p}\right)\left(1+\frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2\gamma t_{p+q}}\right)-\beta\gamma\frac{B_p}{t_p}\frac{B_{p+q}}{t_{p+q}}\right]}{\omega-\beta t_p-\gamma t_{p+q}+\frac{1}{2}(\omega_{e1}+\omega_{e2}+U_1-U_2-J_p+J_{p+q})}\right.$$

$$+\frac{\left(\langle a^+_{p+q\uparrow}b_{p+q\uparrow}\rangle-\langle a^+_{p\downarrow}b_{p\downarrow}\rangle\right)\left[\left(1-\frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2\beta t_p}\right)\frac{B_{p+q}}{\gamma t_{p+q}}-\left(1-\frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2\gamma t_{p+q}}\right)\frac{B_p}{\beta t_p}\right]}{\omega-\beta t_p-\gamma t_{p+q}+\frac{1}{2}(\omega_{e1}+\omega_{e2}+U_1-U_2-J_p+J_{p+q})}$$

$$+\frac{\left(\langle b^+_{p+q\uparrow}a_{p+q\uparrow}\rangle-\langle b^+_{p\downarrow}a_{p\downarrow}\rangle\right)\left[\left(1+\frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2\beta t_p}\right)\frac{B_{p+q}}{\gamma t_{p+q}}-\left(1+\frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2\gamma t_{p+q}}\right)\frac{B_p}{\beta t_p}\right]}{\omega-\beta t_p-\gamma t_{p+q}+\frac{1}{2}(\omega_{e1}+\omega_{e2}+U_1-U_2-J_p+J_{p+q})}$$

$$\left.+\frac{\left(\langle n^b_{p\downarrow}\rangle-\langle n^b_{p+q\uparrow}\rangle\right)\left[\left(1+\frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2\beta t_p}\right)\left(1-\frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2\gamma t_{p+q}}\right)-\beta\gamma\frac{B_p}{t_p}\frac{B_{p+q}}{t_{p+q}}\right]}{\omega-\beta t_p-\gamma t_{p+q}+\frac{1}{2}(\omega_{e1}+\omega_{e2}+U_1-U_2-J_p+J_{p+q})}\right\}. \tag{14}$$

В формуле (14) α и β принимают два значения: $\alpha=+1,-1$; $\beta=+1,-1$. $\chi^{+-}_{aa}(q,\omega)$ и $\chi^{+-}_{bb}(q,\omega)$ являются динамическими откликами электронных подсистем A и C соответственно; $\chi^{+-}_{ab}(q,\omega)$, $\chi^{+-}_{ba}(q,\omega)$ описывают перенос намагниченности от одной электронной подсистемы к другой.

Вычисление корреляционных функций в числителе поперечной динамической восприимчивости (14) производится в приближении статических флуктуаций аналогичным образом. В результате получим ($n=1$, $S=1.2$; см., например, [1,2,4])

$$\langle n^a_{p\downarrow}\rangle=\frac{1}{2}\left[\left(1-\frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right)f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\downarrow}+\varepsilon_{2\downarrow}}{2}+t_p\right)+\left(1+\frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right)f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\downarrow}+\varepsilon_{2\downarrow}}{2}-t_p\right)\right],$$

$$\langle n^a_{p+q\uparrow}\rangle=\frac{1}{2}\left[\left(1-\frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right)f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\uparrow}+\varepsilon_{2\uparrow}}{2}+t_{p+q}\right)+\left(1+\frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right)f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\uparrow}+\varepsilon_{2\uparrow}}{2}-t_{p+q}\right)\right], \tag{15}$$

$$\langle n^b_{p\downarrow}\rangle=\frac{1}{2}\left[\left(1+\frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right)f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\downarrow}+\varepsilon_{2\downarrow}}{2}+t_p\right)+\left(1-\frac{\varepsilon_{2\downarrow}-\varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p}\right)f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\downarrow}+\varepsilon_{2\downarrow}}{2}-t_p\right)\right],$$

$$\langle n^b_{p+q\uparrow}\rangle=\frac{1}{2}\left[\left(1+\frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right)f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\uparrow}+\varepsilon_{2\uparrow}}{2}+t_{p+q}\right)+\left(1-\frac{\varepsilon_{2\uparrow}-\varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}}\right)f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\uparrow}+\varepsilon_{2\uparrow}}{2}-t_{p+q}\right)\right], \tag{16}$$

$$\langle a^+_{p\downarrow}b_{p\downarrow}\rangle=\langle b^+_{p\downarrow}a_{p\downarrow}\rangle=\frac{B_p}{2t_p}\times\left[f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\downarrow}+\varepsilon_{2\downarrow}}{2}+t_p\right)-f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\downarrow}+\varepsilon_{2\downarrow}}{2}-t_p\right)\right],$$

$$\langle a^+_{p+q\uparrow}b_{p+q\uparrow}\rangle=\langle b^+_{p+q\uparrow}a_{p+q\uparrow}\rangle=\frac{B_{p+q}}{2t_{p+q}}\left[f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\uparrow}+\varepsilon_{2\uparrow}}{2}+t_{p+q}\right)-f^+\left(\frac{\varepsilon_{1\uparrow}+\varepsilon_{2\uparrow}}{2}-t_{p+q}\right)\right], \tag{17}$$

где $f^+(x)=1/(1+\exp(\beta x))$ — фермиевское распределение.

Отметим, что, например, из равенства (15) следует, что в случае больших значений кулоновского потенциала (по сравнению с энергией переноса) $S=1/2$. Подставляя (15)–(17) в формулу (14), приходим к окончательному выражению для поперечной динамической восприимчивости системы, характеризующейся гамильтонианом Хаббарда.

Представляет интерес исследование полюсов динамической восприимчивости („спектра коллективных возбуждений" модели Хаббарда), определяемой формулой (14). На рис. 1 приведен „спектр коллективных возбуждений". При указанных значениях параметров этот спектр представляет собой зону, состоящую из четырех подзон, причем две центральные подзоны пересекаются и образуют единую подзону, так что можно говорить о наличии трех подзон. Спектр на рис. 1 свидетельствует, по-видимому, о наличии антиферромагнитного упорядочения в двумерной модели Хаббарда.

Интересно также рассмотреть поведение статической магнитной восприимчивости как функции величины q. В работе [11] было проведено численное исследование статической магнитной восприимчивости $\chi(q,0)$ как функции q в случае точно наполовину заполненной зоны

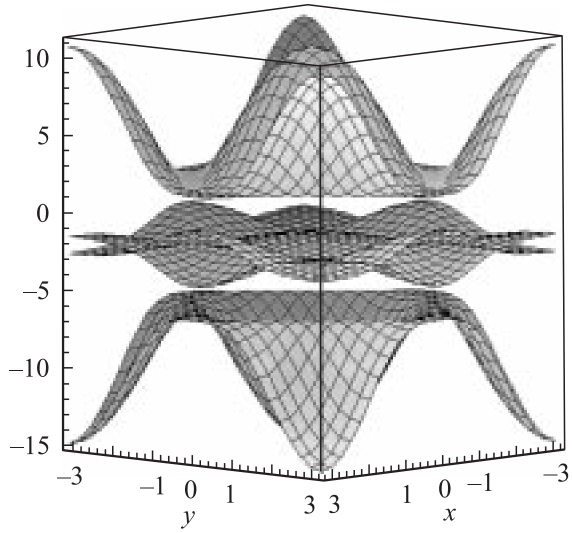

Рис. 1. Энергетический спектр (знаменатель поперечной восприимчивости) при значениях параметров $S = 1/2$, $q = (\pi, \pi)$, $U_1 = 6\,\text{eV}$, $U_2 = 2\,\text{eV}$, $B = 1.5\,\text{eV}$, $B' = -0.3B$, $n = 1$.

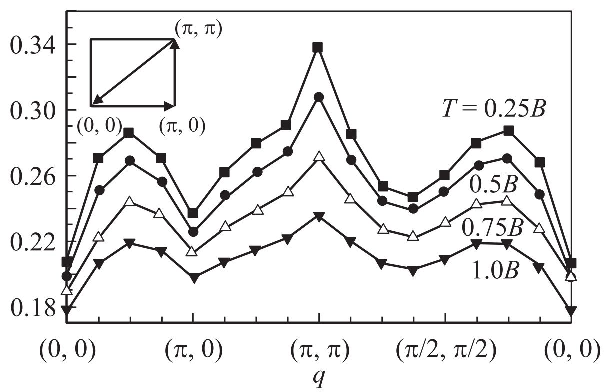

Рис. 2. Статическая магнитная восприимчивость $\chi(q, 0)$ как функция q при различных значениях температуры T. $S = 1/2$, $B = 1.5\,\text{eV}$, $U_1 = 6\,\text{eV}$, $U_2 = 2\,\text{eV}$, $B' = -0.3B$.

для решетки 8×8. Расчеты показали, что $\chi(q, 0)$ имеет резкий пик при значении вектора $q = (\pi, \pi)$. С уменьшением температуры высота пика увеличивается. На рис. 2 представлен график зависимости статической магнитной восприимчивости от вектора антиферромагнитной волны q для различных значений температуры T в пределах первой зоны Бриллюэна. В соответствии с результатами численного анализа восприимчивость имеет максимум в точке $q = (\pi, \pi)$. С уменьшением температуры высота пика увеличивается, а ширина пика становится меньше. Кроме того, в отличие от данных [11] исследуемая зависимость имеет немонотонный характер. Можно выделить точки локальных экстремумов (см. для сравнения рис. 3.2a при температуре $T = 0.33B$ в работе [11]).

В [23] показано, что в таких системах, как La_2CuO_4, допированных Li, при низких температурах статическая магнитная восприимчивость значительно отклоняется от закона Кюри–Вейсса. В частности, при низких температурах происходит увеличение восприимчивости с ростом температуры. Затем, пройдя через максимум, восприимчивость плавно спадает (см., например, рис. 3 в [23]). Такое поведение можно объяснить [23] в рамках представления спинового стекла. Покажем, что при определенных условиях аналогичное поведение возможно и в модели Хаббарда при низких температурах. На рис. 3 приведены зависимости статической восприимчивости от температуры (T/B) для различных значений величины интеграла переноса по диагонали квадрата при значении волнового вектора $q = (\pi/2, \pi/2)$. Из анализа рис. 3 следует, что учет интеграла переноса по диагонали квадрата B' приводит к резкому изменению поведения $\chi(q)$ при понижении температуры. При учете B' на графике зависимости $\chi(q)$ появляется максимум, причем чем больше по абсолютной величине B', тем большей температуре соответствует максимум восприимчивости. Если система находится в режиме сильных корреляций, учет интеграла переноса B' в случае $B' < 0$ $(B > 0)$ способствует делокализации электронов и как следствие приводит к уменьшению значения намагниченности по сравнению со случаем $B' = 0$. Если исходить из того, что в модели Хаббарда происходит конкуренция между процессами локализации и делокализации (коллективизации), то доля паулиевской восприимчивости при учете B' будет больше по сравнению со случаем, когда $B' = 0$. Таким образом, наличие пика в экспериментальной работе [23] можно объяснить не только с помощью представления спинового стекла, но и зависимостью статической восприимчивости от интеграла переноса по диагонали квадрата при определенном значении q в случае низких температур.

В [24] были представлены зависимости статической восприимчивости от температуры для различных значений кулоновского потенциала U. Для сравнения результатов, которые получаются на основании наших вычислений, с результатом работы [24] мы построили зависимость обратной восприимчивости от температуры (рис. 4) для разных значений кулоновских потенциалов.

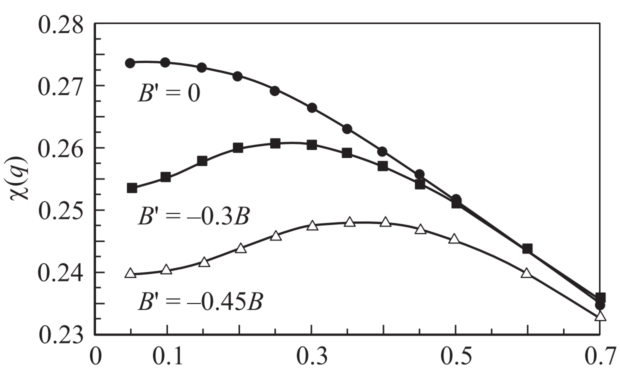

Рис. 3. Зависимость статической магнитной восприимчивости $\chi(q, 0)$ от температуры при $q = (\pi/2, \pi/2)$, $U_1 = 6\,\text{eV}$, $U_2 = 2\,\text{eV}$, $B = 1.5\,\text{eV}$, $S = 1/2$, $\varepsilon_1 = -3\,\text{eV}$, $\varepsilon_2 = -1\,\text{eV}$ для различных B'.

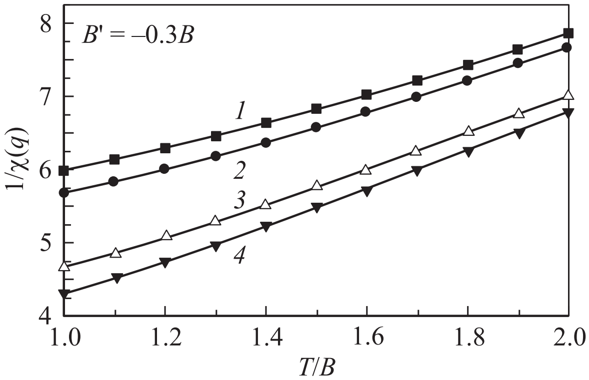

Рис. 4. Обратная восприимчивость как функция температуры при различных значениях кулоновских потенциалов и волнового вектора. *1* — $U_1 = 8$ eV, $U_2 = 4$ eV, $q = (0, 0)$; *2* — $U_1 = 6$ eV, $U_2 = 3$ eV, $q = (0, 0)$; *3* — $U_1 = 8$ eV, $U_2 = 4$ eV, $q = (\pi, \pi)$; *4* — $U_1 = 6$ eV, $U_2 = 3$ eV, $q = (\pi, \pi)$.

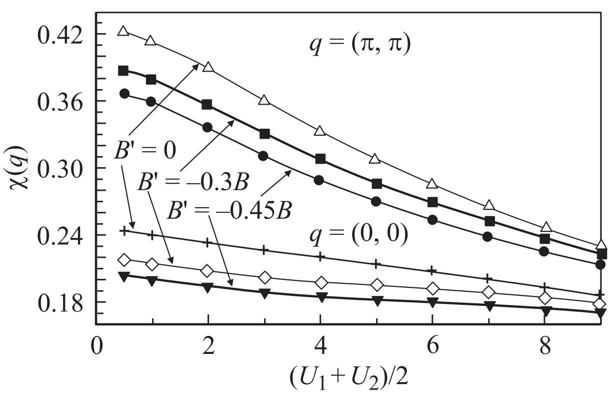

Рис. 5. Магнитная восприимчивость как функция кулоновского потенциала при различных значениях волнового вектора q и интеграла переноса B'. $T = 0.5B$.

Видно, что качественно результаты совпадают. Что касается количественных характеристик, то они также совпадают по порядку величины; с увеличением температуры восприимчивость убывает (обратная восприимчивость возрастает). Графики приближаются к прямым линиям. Полученный результат отвечает кюри-вейссовскому поведению ($\chi \sim 1/(T + \Theta)$ с $\Theta > 0$), так что (по крайней мере в пределах указанного интервала U) невозможен переход в ферромагнитное состояние. Анализ рис. 4 показывает, что величина обратной восприимчивости зависит от q (ср. с рис. 1).

Представляет интерес поведение статической магнитной восприимчивости в зависимости от величины кулоновского потенциала $(U_1 + U_2)/2$ для различных значений волнового вектора и интеграла переноса B' при постоянной температуре (рис. 5). Из анализа кривых на рис. 5 следует, что статическая восприимчивость зависит как от величины кулоновского потенциала, так и от интеграла переноса B' и величины q.

Как отмечалось выше, приближение статических флуктуаций позволило вычислить энергию основного состояния модели Хаббарда. Сравнение полученных результатов в частном случае одномерной модели Хаббарда с точным решением [6] показало, что в пределах слабых и сильных корреляций решение, найденное в приближении статических флуктуаций, совпало с точным решением [6]. В области промежуточных корреляций значения энергии основного состояния довольно близки [4]. Для того чтобы решить, насколько адекватно выражение (14) описывает поведение восприимчивости, необходимо провести сравнение с результатами точных вычислений. В [25] получено точное решение одномерной модели Хаббарда в магнитном поле. Работа [25] является логическим продолжением точного решения как [6], так и [26] — точного решения одномерной модели Хаббарда при температуре $T \neq 0$. На рис. 6 приведены графики зависимости обратной статической восприимчивости, полученной в случае точного решения, и обратной статической восприимчивости, найденной из (14) в приближении случайных фаз (с точностью до „нормировочной константы“) [7],

$$\chi_{\text{rpa}}(q) = \chi(q, 0)/\big(1 - 0.5U\chi(q, 0)\big).$$

Из анализа графиков приведенных зависимостей следует, что качественно поведение обратной статической восприимчивости, вычисленной точно и в приближении статических флуктуаций, одинаково. Отметим, что при расчетах мы полагали, что спин $S = 1/2$. Если воспользоваться зависимостью спина от величины кулоновского потенциала (рис. 4 в работе автора [2]), то совпадание хода кривых будет более точным.

Таким образом, приведенная в работах [1,2,4] методика решения модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций позволяет вычислить наряду с функциями Грина и энергией основного состояния и

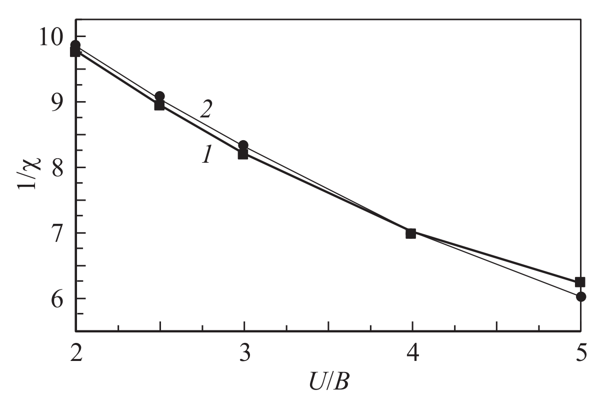

Рис. 6. Зависимость обратной восприимчивости одномерной модели Хаббарда от величины кулоновского потенциала при значениях параметров $S = 1/2$, $\omega_e/B = 0.01$, $T = 0.02B$, $q = (\pi, \pi)$. *1* — точное решение, полученное в [25], *2* — решение в приближении случайных фаз, следующее из формулы (14).

магнитную восприимчивость, а также исследовать характер зависимости восприимчивости от различных параметров системы. Сравнение полученных результатов в частном случале одномерной модели Хаббарда с точным решением одномерной модели Хаббарда в магнитном поле показало, что приближение статических флуктуаций вполне адекватно описывает свойства модели Хаббарда. Предварительные результаты работы были представлены на зимней школе физиков-теоретиков „Коуровка“ [27].

Автор выражает благодарность Р.О. Зайцеву, В.В. Валькову за внимание к работе и обсуждение ее результатов, Р.Р. Нигматуллину за внимание к работе и полезные советы.

Список литературы

[1] Г.И. Миронов. ФТТ **39**, *9*, 1594 (1997).
[2] Г.И. Миронов. ФТТ **41**, *6*, 951 (1999).
[3] J. Habbard. Proc. Roy. Soc. A **276**, *1365*, 238 (1963).
[4] Г.И. Миронов. ФТТ **44**, *2*, 209 (2002).
[5] V.J. Emery. Phys. Rev. Lett. **58**, *26*, 2794 (1987).
[6] E.H. Lieb, F.Y. Wu. Phys. Rev. Lett. **20**, *25*, 1445 (1968).
[7] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках. М. (1988). 287 с.
[8] Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М. (1987). 264 с.
[9] Ю.А. Изюмов. УФН **165**, *4*, 403 (1995).
[10] Ю.А. Изюмов. УФН **167**, *5*, 465 (1997).
[11] N. Bulut. Adv. Phys. **51**, 6 (2002); Cond-mat/0207186.
[12] E.W. Carlson, V.J. Emery, S.A. Kivelson, D. Orgad. Cond-mat/0206217 (2002).
[13] E.C. Stoner. Proc. Roy. Soc. A **165**, 372 (1963).
[14] Р.О. Зайцев. ФТТ **19**, 3204 (1977).
[15] Р.О. Зайцев. ЖЭТФ **78**, 2362 (1978).
[16] A.A. Abrikosov. Physics **2**, *1*, 5 (1965).
[17] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. М. (1975). 528 с.
[18] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М. (1962). 443 с.
[19] S.E. Barnes, J. Zitkova-Wilcox. Phys. Rev. B **7**, *7*, 5 (1973).
[20] J. Kondo. Progr. Theor. Phys. **32**, *1*, 38 (1964).
[21] А.А. Косов, Г.И. Миронов. ФТТ **24**, *2*, 583 (1982).
[22] Г.И. Миронов, Н.Г. Фазлеев. ФНТ **14**, *9*, 950 (1988).
[23] R. Arita et al. Preprint cond-mat/0002441 (2001).
[24] T. Sasagawa et al. Preprint cond-mat/0208014 (2003).
[25] C. Yang, A.N. Kocharian, Y.L. Chiang. J. Phys.: Cond. Matter **12**, 7433 (2000).
[26] M. Takahashi. Progr. Theor. Phys. **47**, 1 (1972).
[27] Г.И. Миронов, Р.Р. Нигматуллин. Тез. докл. XXX Междунар. зимней школы физиков-теоретиков „Коуровка-2004“. Екатеринбург (2004). С. 190.