Письма в ЖЭТФ, том 51, вып. 6, стр. 320--324 *25 марта 1990 г.*

УСТОЙЧИВОСТЬ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ УПОРЯДОЧЕННЫХ ДИМЕРОВ t–J-МОДЕЛИ

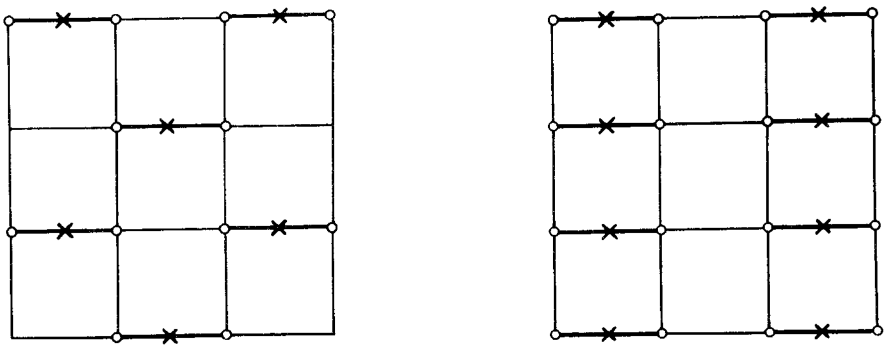
А.В.Маркелов

В работе найдена область устойчивости димеризованного или спин-пайерлсовского основного состояния модели Хаббарда на двумерной решетке. Спектр спиновых возбуждений в этой области имеет щель.

Начиная с работы Андерсона [1] объектами исследования стали различные варианты основного состояния модели Хаббарда на двумерной решетке, отличные от ферромагнитного и антиферромагнитного. Были предложены фазы, в которых существуют сильные корреляции спина на соседних узлах, но средний спин на каждом узле равняется нулю [2], причем как оказалось, минимальную энергию имеет димеризованная или спин-пайерлсовская фаза. Для описания такого сильно коррелированного состояния мы развиваем схему теории возмущений магнитного типа, в котором корреляция между соседними узлами в димере учитывается уже в нулевом порядке теории возмущений. Исходим из гамильтониана обменной модели Хаббарда на простой двумерной квадратной решетке, определенной на пространстве одночастичного заполнения узлов, включающей туннелирование между соседними узлами t и два конкурирующих антиферромагнитных обмена – ближайший J_1 и диагональный J_2.

$$H = -t \sum_{ij} (1 - n_{i-\sigma}) C^+_{i\sigma} C_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) + \mu \sum_i C^+_{i\sigma} C_{i\sigma} + \sum_{ij} J_{ij} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j) \quad (1)$$

Здесь $C_{i\sigma}$ – оператор рождения электрона на узле i. $\mathbf{S}_i$ – спин, μ – химический потенциал.



а б

Рис. 1

Разобьем гамильтониан на две части. К первой невозмущенной части отнесем члены в (1), действующие на связях, показанных на рис. 1 жирными линиями. В этом нулевом приближении волновая функция будет произведением двухузельных волновых функций, а основным состоянием каждой пары узлов или вакуумом будет синглет $|\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\rangle$. Полный набор состояний будет задаваться бозевскими операторами рождения a^+_i, b^+_i, c^+_i, действующими на пространстве димеризованных функций и переводящими вакуум в одно из триплетных состояний и фермиевскими операторами $\alpha^+_{\uparrow i}$ и $\alpha^+_{\downarrow i}$ рождения дырки из синглетного вакуума.

$$\langle \uparrow\uparrow | a^+ | \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \rangle = \langle \downarrow\downarrow | b^+ | \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \rangle = \langle \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) | c^+ | \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \rangle = 1$$

$$\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow 0 + 0\uparrow) | \alpha^+_\uparrow | \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \rangle = \langle \frac{1}{\sqrt{2}} (\downarrow 0 + 0\downarrow) | \alpha^+_\downarrow | \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \rangle = 1 \quad (2)$$

Для членов (1), действующих на остальных связях, мы вводим малый параметр $\lambda(\lambda J_1$, λJ_2, $\lambda t)$ и производим разложение по нему по теории возмущений. Результаты, соответствующие гамильтониану (1), получаются при величине $\lambda = 1$. Непосредственной проверкой убеждаемся, что спиновые операторы выражаются через введенные бозевские операторы [3]

$$M_z = a^+ a - b^+ b, \qquad M^+ = \sqrt{2}(a^+ c - c^+ b), \qquad M^- = \sqrt{2}(c^+ a - b^+ c)$$

$$L_z = -(c^+ U + Uc), \qquad L^+ = \sqrt{2}(a^+ U + Ub), \qquad L^- = \sqrt{2}(b^+ U + Ua), \quad (3)$$

где $\mathbf{M}_i = \mathbf{S}_{2i} + \mathbf{S}_{2i-1}$, $\mathbf{L}_i = \mathbf{S}_{2i} - \mathbf{S}_{2i-1}$ – сумма и разность спинов двух соседей, $U = (1 - a^+ a - b^+ b - c^+ c)^{1/2}$. С помощью подстановки (3) убеждаемся, что коммутационные соотношения, $[M_i M_j] = i\epsilon_{ijk} M_k$, $[L_i L_j] = \epsilon_{ijk} M_k$, $[M_i L_j] = i\epsilon_{ijk} L_k$ выполняются. Матричные элементы перехода между физическими и нефизическими состояниями равны нулю и таким образом (3) является аналогом преобразования Холстейна–Примакова для случая систем с нулевым спином в основном состоянии.

Узельный гамильтониан, выраженный через бозевские и фермиевские операторы в квадратичном по операторам приближении на удвоенной по оси x решетке, показанной крестиками на рис. 1, имеет следующий вид.

$$H = H_c + H_{ab} + H_\alpha$$

$$H_c = \sum_{ij} [J_1 c_i^+ c_i - \lambda \frac{J_{ij}}{4}(c_i^+ c_j + c_j^+ c_i + c_i c_j + c_i^+ c_j^+)] \tag{4}$$

$$H_{ab} = \sum_{ij} [J_1(a_i^+ a_i + b_i^+ b_i) - \lambda \frac{J_{ij}}{4} (a_i^+ b_i + b_i a_j^+ + b_i^+ a_j + a_i b_j^+ + a_i^+ a_j^+ + a_i a_j +$$

$$+ b_i^+ b_j^+ + b_i b_j)]$$

$$H_\alpha = - \frac{\lambda t}{4} \sum_{ij} [\alpha_{i\uparrow}^+ \alpha_{j\uparrow} (U_i U_j + c_j^+ c_i + 2a_j^+ a_i) + \alpha_{i\downarrow}^+ \alpha_{j\downarrow} (U_i U_j + c_j^+ c_i + 2b_j^+ b_i)],$$

Член H_α получен с помощью проекции первого члена в (1) на введенное нами пространство димеризованных функций. Нас интересует спектр бозевских возбуждений. Для его вычисления перейдем в k-представление и оставим в фермиевской части лишь члены диагональные по k. Интеграл по k даст полную плотность дырок $N = N_\uparrow + N_\downarrow$.

Важно отметить то обстоятельство, что в отличие от [4] присутствие дырок в (4) не сводится лишь к переопределению величины антиферромагнитного обмена в бозевской части гамильтониана. Бозевский гамильтониан зависит от способа разбиения основного состояния на димеры. Однако области устойчивости оказываются почти одинаковыми. Мы рассмотрим два случая (рис. 1*а*, *б*) и сравним результаты.

Случай *а* (рис. 1*а*).

$$H = \sum_\rho [J_1 + \lambda\{3R - (R + \frac{J_1}{2})\cos 2k_x - (R \pm J_1 \mp 2J_2)\cos k_x \cos k_y\}] x_{k\rho}^+ x_{k\rho} -$$

$$- \frac{\lambda}{2}\{\frac{J_1}{2}\cos 2k_x + (J_1 - 2J_2)\cos k_x \cos k_y\}(x_{k\rho}^+ x_{-k\rho}^+ + x_{k\rho} x_{-k\rho}). \tag{5a}$$

Здесь $R = Nt/2$, $\rho = 1, 2, 3$. Гамильтониан содержит три моды (две из них вырождены). Верхний знак берется для $x_{k1} = c_k$ и $x_{k2} = a_k + b_k$, нижний знак – для $x_{k3} = a_k - b_k$. Энергия спиновых бозевских возбуждений E_k равна

$$E_k^2 = [J_1 + \lambda\{3R - R\cos 2k_x - 2R\cos k_x \cos k_y\}] \times$$

$$\times [J_1 + \lambda\{3R - (R + J_1)\cos 2k_x - 2(R \pm J_1 \mp 2J_2)\cos k_x \cos k_y\}]. \tag{6a}$$

При $\lambda = 1$ мы приходим к физическому гамильтониану (1). Область устойчивости состояния ($E^2 > 0$ при всех k_x, k_y) для $\lambda = 1$ определяется неравенствами

$$\frac{1}{2}J_1 \leqslant J_2 \leqslant J_1, \qquad J_2 \leqslant \frac{1}{2}J_1 + R .$$

Область, соответствующая этим неравенствам, показана на рис. 2 вертикальной штриховкой.

Случай *б* (рис. 1 *б*).

$$H = \sum_\rho [J_1 + \lambda\{3R - (R \pm \frac{J_1}{2})\cos 2k_x - (2R \pm J_1 \mp J_2)\cos k_y \pm J_2 \cos k_y \cos 2k_x\}] x_{k\rho}^+ x_{k\rho} -$$

$$- \frac{\lambda}{2}[\frac{J_1}{2}\cos 2k_x + (J_1 - J_2)\cos k_y - J_2\cos k_y \cos 2k_x](x^+_{k\rho} x^+_{-k\rho} + x_{k\rho} x_{-k\rho}) . \qquad (5б)$$

Гамильтониан также содержит три моды, причем две из них $x_{k_1} = c_k$, $x_{k2} = a_k + b_k$ вырождены (верхний знак), и моду $x_{k3} = a_k - b_k$ (нижний знак). Энергия E_k равна

$$E_k^2 = [J_1 + \lambda\{3R - R\cos 2k_x - 2R\cos k_y\}] \times$$
$$\times [J_1 + \lambda\{3R - (R + J_1)\cos 2k_x - 2(R \pm J_1 \mp J_2)\cos k_y \pm 2J_2 \cos k_y \cos 2k_x\}] . \qquad (6б)$$

Область устойчивости ($E_k^2 > 0$ при всех k_x, k_y) для $\lambda = 1$ дается неравенствами

$$\frac{1}{2}J_1 \leqslant J_2 \leqslant J_1, \quad J_2 \leqslant \frac{1}{2}J_1 + R, \quad R \geqslant \frac{1}{3}J_1 .$$

Эта область показана на рис. 2 горизонтальной штриховкой.

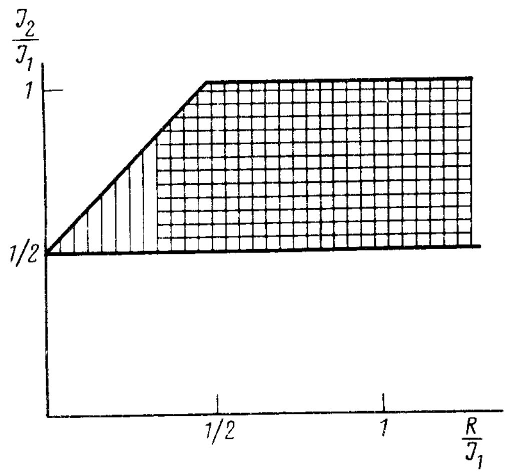


Рис. 2

Разложение по λ до первого порядка отвечает квадратичной форме по спиновым операторам и, по-видимому, соответствует результатам теории среднего поля. Внутри заштрихованных областей спектр спиновых возбуждений щелевой и поэтому учет следующих поправок по взаимодействию не должен нарушать устойчивость фаз. На границах области спектр бесщелевой, следует ожидать, что логарифмические поправки к амплитуде взаимодействия магнонов приведут к динамической генерации массы и смещению границы устойчивости [5]. Из наших результатов следует, что более предпочтительна фаза на рис. 1*а*.

В результате нулевых флуктуаций происходит переопределение основного состояния системы, а именно появляется спиновая корреляция на соседних димерах. Однако параметр порядка, соответствующий *VBS* фазе и равный $\langle S_{2i-1} S_{2i}\rangle - \langle S_{2i} S_{2i+1}\rangle$, остается ненулевым. Например, для соседних димеров, расположенных по оси x, имеем

$$\langle S_i S_{i-1}\rangle = \frac{1}{4\pi^2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \left(\frac{v_k^2 \cos 2k_x}{u_k^2 + v_k^2}\right)$$

где v_k и u_k – коэффициенты $u - v$ преобразования. Оценка этого выражения во втором порядке по λ дает для рис. 1*а* $\langle S_i S_{i-1}\rangle \sim -\frac{\lambda^2}{8}\left(\frac{2J_2 - J_1}{J_1}\right)^2$ и для рис. 1*б* $\langle S_i S_{i-1}\rangle \sim -\frac{\lambda^2}{8}\frac{J_1 - J_2}{J_1}$.

Выражаю благодарность А.Ф.Андрееву, А.В.Чубукову и Д.В.Хвещенко за плодотворные обсуждения работы.

Литература

1. *Anderson P.W.* Science, 1987, **235**, 1196.
2. *Baskaran G. et al.* Sol. St. Comm., 1987, **63**, 973; *Dombre T., Kotliar G.* Phys. Rev. B, 1989, 38, 855; *Read N., Sachdev S.* Phys. Rev. Lett., 1989, **62**, 1694; *Wen X.G. et al.* Phys. Rev. B, 1989, **39**, 11413; *Marston J.B., Affleck I.* Phys. Rev. B, 1989, **39**, 11538.
3. *Чубуков А.Ф.* Письма в ЖЭТФ, 1989, **49**, 108; *Papanicolaou N.* Nucl. Phys. B, 1988, **305**, 367.
4. *Inui M. et al.* Phys. Rev. B, 1988, **38**, 6631.
5. *Ioffe L.B., Larkin A.I.* Int. J. Mod. Phys. B, 1988, **2**, 203; *Chandra P. Doucot B.* Phys. Rev. B, 1988, **38**, 9335.

Институт физических проблем
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
8 февраля 1990 г.