Письма в ЖЭТФ, том 57, вып.5, стр.313 - 316 ©1993 г. 10 марта

# КУПЕРОВСКАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В МОДЕЛИ ХАББАРДА С ОТТАЛКИВАНИЕМ

*А.Л.Алистратов, Ю.А.Димашко, В.С.Подольский*

*Донецкий физико-технический институт Украинской АН*

*340114 Донецк, Украина*

Поступила в редакцию 27 октября 1992 г.

После переработки 11 февраля 1993 г.

Рассмотрена модель Хаббарда с локальным отталкиванием и половинным заполнением зоны на гиперкубической решетке. Показано, что каноническое преобразование к электронам и дыркам обнаруживает их локальное притяжение и куперовскую неустойчивость относительно связывания в нейтральные пары-экситоны. Таким образом, основное состояние модели оказывается диэлектрическим при любом конечном взаимодействии и представляет собой состояние типа модели БКШ, где роль куперовских пар играют экситоны.

Гамильтониан Хаббарда

$$H = -t \sum_{<\mathrm{nl}>} (c^+_{\mathrm{n}\uparrow} c_{\mathrm{l}\uparrow} + c^+_{\mathrm{n}\downarrow} c_{\mathrm{l}\downarrow}) + U \sum_{\mathrm{m}} c^+_{\mathrm{m}\uparrow} c_{\mathrm{m}\uparrow} c^+_{\mathrm{m}\downarrow} c_{\mathrm{m}\downarrow} \tag{1}$$

с локальным отталкиванием $U > 0$ и половинным заполнением зоны

$$\sum_{\mathrm{m}} (c^+_{\mathrm{m}\uparrow} c_{\mathrm{m}\uparrow} + c^+_{\mathrm{m}\downarrow} c_{\mathrm{m}\downarrow}) = N \tag{2}$$

был предложен [1] в качестве простейшей электронной модели перехода металл-диэлектрик ($N$ – полное число узлов). Согласно замыслу Хаббарда и широко распространенному мнению эта модель должна описывать как металлическое состояние при достаточно малом $U$, так и переход в диэлектрическую фазу при некоем $U_c$.

Теория перехода, предложенная Хаббардом [2], действительно привела к конечному $U_c$. Однако, как известно, она имела ряд серьезных недостатков [3]. Наиболее наглядный из них – это парамагнетизм диэлектрической фазы.

В настоящей работе показано, что модель (1), (2) сводится к глубоко изученной модели БКШ и, таким образом, может быть исследована методами теории сверхпроводимости. Такое исследование показывает, что переход металл-диэлектрик в модели Хаббарда при нулевой температуре отсутствует.

Рассмотрим модель (1), (2) на единичной решетке – кубической, квадратной или линейной, в зависимости от размерности. Введем в рассмотрение новые ферми-операторы каноническим преобразованием [4]

$$h_{\mathrm{m}} = e^{i\mathbf{q}\mathrm{m}} c^+_{\mathrm{m}\uparrow}, \qquad h^+_{\mathrm{m}} = e^{-i\mathbf{q}\mathrm{m}} c_{\mathrm{m}\uparrow},$$
$$e_{\mathrm{m}} = c_{\mathrm{m}\downarrow}, \qquad e^+_{\mathrm{m}} = c^+_{\mathrm{m}\downarrow}, \tag{3}$$

где компоненты волнового вектора $q_\alpha = \pi$. Легко убедиться, что $|\mathrm{vac}>$ – вакуум $e_{\mathrm{m}}$- и $h_{\mathrm{m}}$-фермионов

$$e_{\mathrm{m}}|\mathrm{vac}>= 0, \qquad h_{\mathrm{m}}|\mathrm{vac}>= 0 \tag{4}$$

есть однократно заполненное состояние:

$$|\mathrm{vac}>=\prod_{\mathbf{m}} c^+_{\mathbf{m}\uparrow}|0> . \tag{5}$$

Операторы $e^+_{\mathbf{m}}$, $h^+_{\mathbf{m}}$ рождают, соответственно, либо лишний электрон, либо дырку:

$$e^+_{\mathbf{m}}|\mathrm{vac}>= c^+_{\mathbf{m}\downarrow}\prod_{\mathbf{n}} c^+_{\mathbf{n}\uparrow}|0>,$$

$$h^+_{\mathbf{m}}|\mathrm{vac}>= e^{i\mathbf{qm}}c_{\mathbf{m}\uparrow}\prod_{\mathbf{n}} c^+_{\mathbf{n}\uparrow}|0> . \tag{6}$$

В терминах операторов $h_{\mathbf{m}}$, $e_{\mathbf{m}}$ гамильтониан (1) и условие (2) приобретают вид

$$H=-t\sum_{<\mathbf{nl}>}(h^+_{\mathbf{n}}h_{\mathbf{l}}+e^+_{\mathbf{n}}e_{\mathbf{l}})-U\sum_{\mathbf{m}}h^+_{\mathbf{m}}h_{\mathbf{m}}e^+_{\mathbf{m}}e_{\mathbf{m}}+\frac{U}{2}\sum_{\mathbf{m}}(h^+_{\mathbf{m}}h_{\mathbf{m}}+e^+_{\mathbf{m}}e_{\mathbf{m}}) \tag{7}$$

$$\sum_{\mathbf{m}}(h^+_{\mathbf{m}}h_{\mathbf{m}}-e^+_{\mathbf{m}}e_{\mathbf{m}})=0. \tag{8}$$

После перехода к импульсному представлению (7) принимает форму гамильтониана БКШ [5]:

$$H=\sum_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}}(h^+_{\mathbf{k}}h_{\mathbf{k}}+e^+_{\mathbf{k}}e_{\mathbf{k}})-\frac{U}{N}\sum_{\mathbf{pgk}}h^+_{\mathbf{p+k}}h_{\mathbf{p}}e^+_{\mathbf{g-k}}e_{\mathbf{g}}, \tag{9}$$

описывающего систему притягивающихся фермионов с затравочным спектром

$$\epsilon_{\mathbf{k}}=\frac{U}{2}-t_{\mathbf{k}},\qquad t_{\mathbf{k}}=2t\sum_{\alpha}\cos k_\alpha . \tag{10}$$

Нас интересует прежде всего область малых $U$, где могло бы ожидаться металлическое поведение. Именно эта область $U/t\ll 1$, как известно [5,6], исключительно хорошо описывается лежащей в основе теории сверхпроводимости вариационной волновой функцией БКШ:

$$|\psi>=\prod_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}+v_{\mathbf{k}}e^+_{\mathbf{k}}h^+_{-\mathbf{k}})|\mathrm{vac}> . \tag{11}$$

Заметим также, что условие (8) – фактически условие половинного заполнения – в состоянии (11) выполняется автоматически.

Расчет в рамках теории БКШ немедленно дает спектр возбуждений

$$E_{\mathbf{k}}=(4t^2_{\mathbf{k}}+\Delta^2)^{1/2}, \tag{12}$$

где щель $\Delta$ может быть найдена из уравнения

$$\sum_{\mathbf{k}}(4t^2_{\mathbf{k}}+\Delta^2)^{-1/2}=\frac{N}{U}. \tag{13}$$

Решение этого уравнения, в зависимости от размерности $D$, приводит к величине щели:

$$\Delta \approx \begin{cases} 16t \exp -2\pi t/U & (1D), \\ 64t \exp -2\pi\sqrt{t/U} & (2D), \\ 24t \exp -7,06t/U & (3D) \end{cases} \tag{14}$$

и к антиферромагнитному упорядочению

$$< S^z_{\mathbf{m}} >= 0, \qquad < S^+_{\mathbf{m}} >=< c^+_{\mathbf{m}\uparrow} c_{\mathbf{m}\downarrow} >= (\Delta/2U)e^{-i\mathbf{q}\mathbf{m}}. \tag{15}$$

Амплитуда локальной спиновой плотности $\Delta/2U$ стремится к нулю в пределе $U \to 0$.

Наличие неисчезающей щели в спектре (12) означает, что основное состояние модели Хаббарда при любом конечном $U$ является диэлектрическим. Такое поведение вполне согласуется с одномерным точным решением Либа и Ву [7]. По-существу, точное преобразование гамильтониана (1) к (9) означает, что основное состояние модели Хаббарда с половинным заполнением является диэлектрическим постольку, поскольку основное состояние модели БКШ является сверхпроводящим. Иными словами, мы хотим подчеркнуть, что принятая выше вариационная аппроксимация столь же надежна, сколь и модель БКШ теории сверхпроводимости.

Переход в диэлектрическое состояние следует интерпретировать как связывание электронов и дырок в нейтральные экситоны - аналог куперовских пар. Аналогично куперовской неустойчивости в теории сверхпроводимости, переход в диэлектрическую фазу в модели Хаббарда происходит при сколь угодно слабом взаимодействии.

Очевидно также, что половинное заполнение критически важно для образования диэлектрической фазы. При отклонении от половинного заполнения условия (2) и, следовательно, (8) нарушаются, то есть число электронов и дырок становится различным. Поэтому в основном состоянии, кроме нейтральных экситонов, появляются свободные заряженные носители и, таким образом, система становится металлической.

Пользуясь аналогией со сверхпроводимостью, можно также утверждать, что при температуре $T_c \sim \Delta$ щель обратится в нуль, и антиферромагнитный диэлектрик путем фазового перехода второго рода превратится в парамагнитный металл.

Заметим, что наш вывод об отсутствии перехода относится только к модели Хаббарда на решетках определенного, хотя и весьма широкого класса. Действительно, преобразование (3) к модели БКШ возможно лишь при следующем условии. Необходимо, чтобы существовал вектор $\mathbf{q}$, удовлетворяющий условию $\mathbf{q}\vec{\delta} = \pi$ для любой элементарной трансляции $\vec{\delta}$. Это условие выполняется на так называемых "двойных" (bipartite [8]) решетках. Последнее означает, что решетку можно условно разбить на две таким образом, чтобы все ближайшие соседи любого узла первой подрешетки принадлежали второй, и наоборот. Кубическая, квадратная и линейная решетки относятся именно к этому типу. Резюмируя, можно утверждать, что металлическая фаза и переход металл-диэлектрик при нулевой температуре в модели Хаббарда на "двойной" решетке отсутствуют. В этой связи следует отметить, что на треугольной решетке, которая "двойной" не является, фазовый переход был обнаружен [8].

Отвечая на возможную критику, мы хотели бы подчеркнуть следующее обстоятельство. Некоторое отличие теории БКШ от хаббардовской ситуации действительно существует. В теории БКШ притягиваются лишь электроны в дебаевской окрестности поверхности Ферми, а в гамильтониане (9) – во всей зоне Бриллюэна. Но это только усиливает тенденцию к спариванию и, таким образом, к диэлектризации.

---


1. J.Hubbard, J.Proc. Roy. Soc. A **279**, 238 (1963).
2. J.Hubbard, J. Proc. Roy. Soc. A **281**, 401 (1964).
3. C.Herring, In: Magnetism. Ed. G.T.Rado and H.Suhl, v.4, Acad. Press, New York 1966.
4. H.Shiba, Progr. Theor. Phys. **48**, 2171 (1972).
5. Ч.Киттель, Квантовая теория твердых тел, М.: Наука, 1978. (Ch.Kittel, Quantum Theory of Solids, Willey & Sons, New York, 1966).
6. Р.Фейнман, Статистическая механика, М.:Мир, 1975 (R.Feynman, Statistical Mechanics, W.A.Benjamin Inc., Massachusetts 1972).
7. E.Lieb and F.Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
8. S.K.Sarker, H.R.Krishnamurthy, C.Jayaprakash and W.Wenzel, Physica B **163**, 541 (1990).