Письма в ЖЭТФ, том 57, вып.9, стр 575 - 579 ©1993 г. 10 мая

ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ СИСТЕМЫ В МОДЕЛИ ХАББАРДА ПРИ $U = \infty$. ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ ДВУХ ДЫРОК

Е.В.Кузьмин

Красноярский государственный университет

660062 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 12 февраля 1993 г.

После переработки 6 апреля 1993 г.

Построено многоэлектронное синглетное состояние и найдено точное решение уравнения Шредингера с гамильтонианом Хаббарда при $U = \infty$ для двух дырок. Показано, что энергия синглетного состояния ниже энергии насыщенного ферромагнитного состояния.

Нагаока [1] рассмотрел предельный случай бесконечного кулоновского отталкивания в модели Хаббарда [2] и сформулировал утверждение, ныне возведенное в ранг теоремы: на альтернантных (A) решетках при наличии одной дырки основное состояние является насыщенным ферромагнетиком (F). В ряде работ [3-7] приведена аргументация, что F-состояние остается основным при макроскопическом числе дырок, то есть при электронных концентрациях $n > n_c$ (критическая концентрация n_c зависит от типа решетки). Андерсон с соавторами [8] вариационным методом показал, что F-состояние устойчиво относительно переворота одного спина в этом концентрационном интервале.

Из работ [9,10] следует, что при двух дырках F-состояние не является основным. В данной статье показано, что наиболее вероятной кандидатурой в основное состояние электронной системы, описываемой моделью Хаббарда при $U = \infty$, является синглетное состояние.

Гамильтониан Хаббарда, заданный на идеальной d-мерной решетке из N узлов с координационным числом z и периодическими граничными условиями, при бесконечной величине кулоновского отталкивания ($U = \infty$) имеет вид

$$H_\infty = \sum_{\mathrm{fm}\sigma} t(\mathrm{f}-\mathrm{m}) X_{\mathrm{f}}^{\sigma 0} X_{\mathrm{m}}^{0\sigma}, \qquad t(0) = 0, \quad t(\delta) = t(-\delta) \tag{1}$$

и описывает совокупность $N_e \leq N$ электронов, туннелирующих на пустые узлы решетки. Каждый узел либо пуст (0), либо занят электроном с проекцией спина σ. Алгебра X-операторов Хаббарда хорошо известна [2].

Проблема основного состояния состоит в построении N_e-электронных функций $|\psi_S>$, классифицируемых по величине полного спина системы S (ибо H_∞ коммутирует со всеми компонентами оператора $\mathbf{S}$), и отыскании наименьшего собственного значения $E = E(S)$ уравнения Шредингера

$$H_\infty |\psi_S> = E(S)|\psi_S> . \tag{2}$$

Отметим, что энергия полностью заполненной решетки ($N_e = N$) при любой спиновой конфигурации равна нулю и 2^N-кратно вырождена.

Известно точное решение уравнения (2) – это насыщенное F-состояние с $S = S_{max} = N_e/2$ (идеальный газ бесспиновых фермионов). В частности,

где

$$\epsilon(\mathrm{k}) = \sum_{\vec{\delta}} t(\vec{\delta}) \exp(i\mathrm{k}\vec{\delta}) \tag{4}$$

– одноэлектронный спектр, $\epsilon(\mathrm{Q}) = \epsilon_{max}$, $\epsilon(\mathrm{Q} - \Delta\mathrm{k})$ – ближайший к ϵ_{max} энергетический уровень, $\Delta k_i = 2\pi/N^{1/d}$.

В виде альтернативы F-состоянию рассмотрим *синглетное состояние* ($S = 0$, N_e – четное). Многоэлектронные синглетные функции с общим числом

$$L_0 = (N_e)!/\left(\frac{N_e}{2} + 1\right)!\left(\frac{N_e}{2}\right)!$$

можно построить методом диаграмм Румера [11]. Для дальнейшего существенно следующее.

Во-первых, возможно операторное обобщение этого метода путем введения операторов рождения синглетных пар:

$$B^+_{\mathrm{lm}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(X^{\uparrow 0}_{\mathrm{l}} X^{\downarrow 0}_{\mathrm{m}} - X^{\downarrow 0}_{\mathrm{l}} X^{\uparrow 0}_{\mathrm{m}}\right) = B^+_{\mathrm{ml}}, \tag{5}$$

где l, m – узлы решетки (позиции на нумерующей окружности). Тогда при некоторой фиксированной конфигурации из N_0 дырок на оставшейся совокупности из четного числа узлов j-ое румеровское состояние (диаграмма Румера без пересечений) записывается в виде j-го типа произведения;

$$|\theta^{(j)}_\mu> = B^+_{ab} B^+_{cd} \ldots B^+_{fn} |0> \tag{6}$$

из $(N - N_0)/2$ операторов рождения, действующих на вакуум $|0>$, где μ – символ дырочной конфигурации (перечисление позиций, занимаемых дырками). Число диаграмм Румера, то-есть произведений типа (6), равно L_0. Синглетная функция общего вида для μ-ой дырочной конфигурации есть линейная комбинация румеровских состояний

$$|\theta_\mu> = \sum_{j=1}^{L_0} c_j |\theta^{(j)}_\mu> . \tag{7}$$

Во-вторых, вводится понятие эволюционных состояний, возникающих в результате действия элементарного оператора туннелирования на румеровские состояния $|\theta^{(j)}_\mu>$. Рассмотрим случай, когда электроны (дырки) туннелируют на ближайшие соседние (б.с.) узлы. Требование эквивалентности туннелирования по всем направлениям (на б.с.) приводит к четко определенным ограничениям на выбор коэффициентов в (7) и к следующим состояниям:

для одной дырки в решетке из нечетного числа узлов

$$H_\infty |\theta_{\mathrm{f}}> = \sum_{\vec{\Delta}} t(\vec{\Delta}) |\theta_{\mathrm{f}+\vec{\Delta}}>, \tag{8}$$

где $\vec{\Delta}$ – векторы, направленные от узла f к его z б.с.;

для двух дырок в решетке из четного числа узлов

$$H_\infty |\theta_{\mathrm{fm}}> = \sum_{\vec{\Delta}} t(\vec{\Delta}) \left[|\theta_{\substack{\mathrm{f}+\vec{\Delta},\mathrm{m} \\ \mathrm{f}+\vec{\Delta}\neq\mathrm{m}}}> + |\theta_{\substack{\mathrm{f},\mathrm{m}+\vec{\Delta} \\ \mathrm{f}\neq\mathrm{m}+\vec{\Delta}}}> \right], \tag{9}$$

где ограничения в суммировании отражают эффект "исключенного объема". Здесь $|\theta_{\mathbf{f}}>$ и $|\theta_{\mathbf{fm}}>$ – функции (7) для одной и двух дырок, соответственно, инвариантные относительно операций симметрии для данной решетки. Обобщение (9) на большее число дырок очевидно.

Фурье-преобразование (8) позволяет сразу получить собственное значение уравнения Шредингера $E_1(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})$ и $[E_1(\mathbf{k})]_{min} = \epsilon(0)$, где индекс 1 обозначает энергию системы с одной дыркой. Для А-решеток $\epsilon(0) = -W$ и совпадает с энергией F-состояния с одной дыркой, то-есть

$$E_1(S=0) = E_1(S=S_{max}). \tag{10}$$

Этого факта теорема Нагаока не учитывает.

Синглетную волновую функцию системы с двумя дырками представим в виде

$$|\psi_0> = \sum_{\mathbf{fm}} C_{\mathbf{fm}} |\theta_{\mathbf{fm}}>, \tag{11}$$

где $|\theta_{\mathbf{fm}}> = |\theta_{\mathbf{mf}}>$ – нормированный синглетный вакуум для двух дырок, находящихся на узлах $\mathbf{f}$ и $\mathbf{m}$, $<\theta_{\mathbf{f'm'}}|\theta_{\mathbf{fm}}> = \delta_{\mathbf{f'f}}\delta_{\mathbf{m'm}}$. Дырки находятся на разных узлах, но ограничений $\mathbf{f} \neq \mathbf{m}$ можно не вводить, потребовав $|\theta_{\mathbf{ff}}> = 0$. Тогда в $|\psi_0>$-функции по-прежнему отсутствуют диагональные члены, однако формально имеются так называемые "нефизические" амплитуды $C_{\mathbf{ff}}$; очевидно, что $C_{\mathbf{fm}} = C_{\mathbf{mf}}$.

Уравнение Шредингера (2) с функцией (11) на основании (9) приводит к уравнениям для амплитуд:

$$EC_{\mathbf{f},\mathbf{f}+\mathbf{r}} = \sum_{\substack{\vec{\Delta} \\ (\vec{\Delta} \neq \mathbf{r})}} t(\vec{\Delta})[C_{\mathbf{f}+\vec{\Delta},\mathbf{f}+\mathbf{r}} + C_{\mathbf{f},\mathbf{f}+\mathbf{r}-\vec{\Delta}}], \tag{12}$$

где $E = E_2(0)$, $\mathbf{m} = \mathbf{f} + \mathbf{r}$, $t(\vec{\Delta}) = t(-\vec{\Delta}) = -|t|$. В уравнениях (12) существен эффект "исключительного объема", когда $\mathbf{r}$ совпадает с одним из векторов $\vec{\Delta}$. Амплитуды ищутся в виде

$$C_{\mathbf{f},\mathbf{f}+\mathbf{r}} = N^{-2} \sum_{\mathbf{Pk}} \exp[i(\mathbf{PR} + \mathbf{kr})] C_{\mathbf{P}}(\mathbf{k},E), \tag{13}$$

где $\mathbf{R} = (\mathbf{m}+\mathbf{f})/2 = \mathbf{f} + \mathbf{r}/2$, $\mathbf{P} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ – суммарный импульс дырок, $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/2$ – их относительный импульс (все импульсы принимают N значений в I-ой зоне Бриллюэна). Решением (12) являются функции (13) с фурье-амплитудами

$$C_{\mathbf{P}}(\mathbf{k},E) = \frac{\Omega_{\mathbf{P}}(\mathbf{k})}{E - \Omega_{\mathbf{P}}(\mathbf{k})}, \quad \Omega_{\mathbf{P}}(\mathbf{k}) = \epsilon\left(\frac{\mathbf{P}}{2} + \mathbf{k}\right) + \epsilon\left(\frac{\mathbf{P}}{2} - \mathbf{k}\right), \tag{14}$$

где $\epsilon(\mathbf{k})$ – одноэлектронный спектр (4) в приближении б.с.. Подстановка (13), (14) в (12) приводит к дисперсионному уравнению

$$N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} [E - \Omega_{\mathbf{P}}(\mathbf{k})]^{-1} = 0, \qquad E = E(0), \tag{15}$$

которое является *точным решением* задачи о спектре двух дырок на фоне синглетного состояния в модели Хаббарда при $U = \infty$. Из всех возможных

решений дисперсионного уравнения (15) наибольший интерес представляет $E_{min}(0)$ – нижняя граница спектра. Очевидно, что она находится в числе состояний, для которых $\mathbf{P} = 0$ и $\Omega_0(\mathbf{k}) = 2\epsilon(\mathbf{k})$ (импульс центра масс $\mathbf{P}$ выступает в роли параметра в уравнении (15)). Это решение необходимо сравнить с (3).

Для А-решеток $|\epsilon_{min}| = \epsilon_{max} = W = z|t|$, $\epsilon(\mathbf{k}) = W\omega_{\mathbf{k}}$, $\omega_0 = -1$, $\omega_{\mathbf{Q}} = 1$, спектр обладает свойствами $\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\omega_{\mathbf{k}}$, $\sum\limits_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} = 0$ (используются безразмерные значения импульсов), и легко доказывается следующее представление дисперсионного уравнения:

$$N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} [e^2 - 4\omega_{\mathbf{k}}^2]^{-1} = 0, \tag{16}$$

где (здесь и далее) энергия системы $e = E(0)/W$ обезразмерена на полуширину зоны.

В одномерном случае (замкнутая цепочка) максимальный корень уравнения (16) находится в явном виде. Минимальные энергии синглетного ($S = 0$) и F-состояний ($S = S_{max}$) для двух дырок представимы в виде

$$e(0) = -2\sqrt{\lambda(N)}, \quad e(S_{max}) = -2\lambda(N), \quad \lambda(N) = \frac{1}{2}\left(1 + \cos\frac{2\pi}{N}\right). \tag{17}$$

Из (17) следует, что при сколь угодно больших, но конечных значениях N $e(S_{max}) - e(0) \approx (2\pi/N)^2/4 > 0$.

В таблице для А-решеток с $z = 2d$ минимальная энергия синглетного состояния $e(0)$, найденная из уравнения (16), сопоставлена с минимальной энергией F-состояния $e(S_{max})$, рассчитанной по формуле (3) в единицах W; показательны случаи с малым числом узлов.

d	N	$e(0)$	$e(S_{max})$
1	8	-1,848	-1,707
2	4 × 4	-1,892	-1,500
3	4 × 4 × 4	-1,970	-1,666

Эти численные примеры и анализ решений (16) при больших N позволяют сделать вывод: для электронной системы, описываемой гамильтонианом Хаббарда при $U = \infty$ с туннелированием на б.с., в решетках с четным числом узлов и двумя дырками энергия синглетного состояния ниже энергии насыщенного ферромагнитного состояния:

$$E_2(0) < E_2(S_{max}). \tag{18}$$

В заключение отмечу важный факт наличия электронно-дырочной симметрии следующего типа. Рассмотрение двухэлектронного синглетного состояния на пустой решетке $B^+_{\mathbf{fm}}|0> \equiv |\theta^{el}_{\mathbf{fm}}>$ приводит к уравнениям (9). Таким образом, дырочные состояния $|\theta_{\mathbf{fm}}>$ на фоне "синглетного вакуума" эквивалентны двухэлектронным синглетным состояниям $|\theta^{el}_{\mathbf{fm}}>$ и спектр синглетной пары описывается тем же дисперсионным уравнением (15). По-прежнему $e(0) < e(S = 1)$, то есть энергия синглетной пары ниже энергии триплетной пары. Более того, в решетках с четным числом узлов N_e-электронное синглетное состояние энергетически эквивалентно состоянию с $(N - N_e)$ дырками

на фоне "синглетного вакуума" (они описываются уравнениями одинаковой структуры).

"Синглетный вакуум" и "ферромагнитный вакуум", на фоне которых движутся дырки, являются пространственно однородными и по всей видимости нет других состояний, которые могли бы претендовать на роль основного состояния в этой модели. В силу полученного неравенства (18) именно синглетное *состояние является основным. Поскольку в газовом пределе* ($n = N_e/N \ll 1$) основное состояние заведомо не обладает дальним магнитным порядком, то из-за указанного типа электронно-дырочной симметрии отсутствует дальний магнитный порядок и в газовом пределе по концентрации дырок. Отсюда можно сделать прогноз: основным состоянием модели Хаббарда при $U = \infty$ является синглетное состояние при любом четном числе электронов.

---

1. Y.Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).
2. J.Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963); **277**, 237 (1964); **281**, 401 (1964).
3. А.В.Ведяев, О.А.Котельников и др. Фазовые переходы и электронная структура сплавов, М.: Изд-во МГУ, 1986.
4. E.G.Goryachev and E.V.Kuzmin. Phys. Lett. A. **131**, 481 (1988); **149**, 60 (1990).
5. Е.Г.Горячев, Е.В.Кузьмин, ТМФ **85**, 412 (1990).
6. G.Geipel and W.Nolting, Phys. Rev. B. **38**, 2608 (1988).
7. Е.Г.Горячев, Е.В.Кузьмин, Письма в ЖЭТФ **52**, 949 (1990).
8. B.Shastry, H.Krishnamurthy and P.Anderson, Phys. Rev. B. **41**, 2375 (1990).
9. B.Doucot and X.G.Wen, Phys. Rev. B. **40**, 2719 (1989).
10. Toth Balint, Lett. Math. Phys. **22**, 321 (1991).
11. Р.Мак-Вини, Б.Сатклиф. Квантовая механика молекул, М.: Мир, 1972.