

2. N.D.Mermin, *Physica*, **90 B**, 1 (1977).
3. F.Gaitan, *Phys. Lett. A* **178**, 419 (1993).
4. M.C.Cross, *J. Low Temp. Phys.*, **21**, 525 (1975); **26**, 165 (1977).
5. G.E.Volovik, *Pis'ma ZhETF*, **43**, 428 (1986) [*JETP Lett.* **43**, 551 (1986)].
6. M.Stone, and F.Gaitan, *Ann. Phys.* **178**, 89 (1987).
7. G.E.Volovik, "*Exotic properties of superfluid ^3He* ", World Scientific, Singapore - New Jersey - London - Hong Kong, 1992.
8. G.E.Volovik, *Pis'ma ZhETF* **57**, 233 (1993); [*JETP Lett.* **57**, 244 (1993)].
9. M.M.Salomaa and G.E.Volovik, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 533 (1987).
10. S.L.Adler, *Phys. Rev.* **177**, 2426 (1969); J.S.Bell and R.Jackiw, *Nuovo Cim. A* **60**, 47 (1969).
11. T.Vachaspati and G.B.Field, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 373 (1994); J.Carriga and T.Vachaspati, to be published.
12. P.W.Anderson and G.Toulouse, *Phys. Rev. Lett.*, **38**, 508 (1977); V.R.Chechetkin, *ZhETF* **71**, 1463 (1976); [*JETP* **44**, 766 (1976)].
13. N.D.Mermin and T.-L.Ho, *Phys. Rev. Lett.* **36**, 594 (1976).
14. C.Caroli, P.G.de Gennes, and J. Matricon, *Phys. Lett.* **9**, 307 (1964).
15. N.B.Kopnin, *Phys. Rev. B* **47**, 14354 (1993).
16. N.B.Kopnin, to be published in *Physica B* (1995).

Письма в ЖЭТФ, том 61, вып.11, стр.941 - 946

© 1995г. 10 июня

О ПРИМЕНИМОСТИ "SLAVE-BOSON"-МЕТОДА К РАСЧЕТУ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МНОГОЗОННЫХ СИСТЕМ С СИЛЬНЫМИ КУЛОНОВСКИМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

В.Ф.Елесин, Л.А.Опёнов, Е.Г.Холмовский, С.Н.Молотков, С.С.Назин**

*Московский государственный инженерно-физический институт
(технический университет)
115409 Москва, Россия*

**Институт физики твердого тела РАН
142432 Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 27 апреля 1995 г.

Расчеты электронной структуры сильнокоррелированных систем, выполненные "slave-boson"-методом, сопоставлены с точными численными решениями для конечных кластеров. Показано, что "slave-boson"-метод является очень хорошим приближением при исследовании не только однозонной, но и многозонных моделей Хаббарда, позволяя определить характеристики основного состояния с точностью $\sim 1\%$. Выявлены причины обнаруженного в [6] сильного расхождения "slave-boson"-метода с точным решением.

В последние годы значительное внимание уделяется исследованию сильнокоррелированных соединений, к которым относятся, в частности, высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП), системы с тяжелыми фермионами, магнитные полупроводники и пр. Ввиду исключительной сложности теоретического описания электронной структуры таких соединений (даже на основе упрощенных модельных гамильтонианов) в литературе обычно используются различные приближенные подходы, поскольку точные решения удается получить только численно и лишь для небольших кластеров [1, 2].

Одним из наиболее мощных приближенных методов является так называемый "slave-boson"-метод, предложенный в работе [3] для однозонной модели Хаббарда. Этот метод представляет собой, по сути, теорию среднего поля, адекватно учитывающую сильные корреляционные эффекты, которые обусловлены кулоновским отталкиванием электронов. Он широко использовался при изучении магнитоупорядоченных фаз, переходов металл-диэлектрик, эффекта Кондо и пр.

Однако однозонной модели Хаббарда оказалось недостаточно для описания некоторых классов соединений. Это потребовало обобщения slave-boson-метода на многозонные модельные гамильтонианы различного вида, что было сделано, например, в работе [4] для двумерной модели Эмери (многозонной модели Хаббарда), развитой с целью расчета электронных характеристик медь-кислородных плоскостей в ВТСП [5].

В недавней статье [6] slave-boson-метод был использован для определения энергии основного состояния E_0 и среднего числа электронов на узле $n_{i\sigma}$ в одном из вариантов многозонной модели Хаббарда, описывающей магнитные полупроводники на основе халькогенидов переходных металлов с f -оболочками (например, EuX , где $X = \text{O}, \text{S}, \text{Te}, \text{Se}$). Сопоставив результаты расчета с точным решением, полученным численно для 4-узельного кластера, авторы [6] нашли "конкретное представление эффективного гамильтониана в slave-boson-методе и связей на фермионные и бозонные переменные, дающих наилучшее приближение для точного решения в многозонном случае".

Необходимо подчеркнуть, что соответствие с точным решением является единственным критерием при проверке надежности того или иного приближенного метода, поскольку "физическая разумность" результатов часто бывает обманчивой. Поэтому использованный в [6] подход представляется нам совершенно оправданным. Однако расхождение между "наилучшим приближением" работы [6] и точным решением столь велико (рис.1 и 2 в [6]), что фактически ставит под сомнение саму возможность применения slave-boson-метода к многозонным моделям. Этот вопрос требует ясности, поскольку использование slave-boson-метода для исследования фермиевских многозонных систем сейчас стало настолько популярным (см., например, работы [7] и ссылки в них), что сильное расхождение с точным решением (будь оно найдено хотя бы в одном конкретном случае) заставило бы пересмотреть многие полученные slave-boson методом результаты.

В настоящей работе slave-boson-метод использован, как и в [6], для расчета E_0 и $n_{i\sigma}$ в магнитном полупроводнике EuX . Эти же характеристики рассчитаны для медь-кислородной плоскости, основного структурного элемента ВТСП. Путем сопоставления результатов расчета с точными численными решениями, полученными для конечных кластеров, показано, что slave-boson-метод является очень хорошим приближением при исследовании не только однозонной, но и многозонных моделей Хаббарда и позволяет определять характеристики основного состояния с точностью $\sim 1\%$.

Для описания электронной структуры EuX будем использовать, как и в [6], двумерную многозонную модель с гамильтонианом

$$H = \epsilon_f \sum_{i,\sigma} f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + \epsilon_c \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^+ c_{j\sigma} + t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (f_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \text{э.с.}) + U \sum_i f_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} f_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow}, \quad (1)$$

где $f_{i\sigma}^+(f_{i\sigma})$ и $c_{j\sigma}^+(c_{j\sigma})$ – операторы рождения (уничтожения) электрона с проекцией спина σ на атомах Eu и X, соответственно (индекс i относится к узлам Eu, индекс j – к узлам X); t – интеграл перескока электронов между ближайшими узлами Eu и X; ϵ_f и ϵ_c – узельные энергии; U – энергия кулоновского отталкивания электронов на атомах Eu.

Перейдем к slave-boson-представлению. Введем вспомогательные бозоны, отвечающие различному заполнению узлов Eu электронами (пустой узел, один электрон со спином \uparrow или \downarrow , два электрона): e_i^+ , $s_{i\uparrow}^+$, $s_{i\downarrow}^+$, d_i^+ – операторы рождения соответствующих бозонов. Определим связи

$$e_i^+ e_i + s_{i\uparrow}^+ s_{i\uparrow} + s_{i\downarrow}^+ s_{i\downarrow} + d_i^+ d_i = 1, \quad (2)$$

$$f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} = s_{i\sigma}^+ s_{i\sigma} + d_i^+ d_i, \quad (3)$$

представляющие собой условие полноты и условие сохранения заряда [3]. Эти связи выделяют подпространство, в котором действует гамильтониан

$$H_{sb} = \sum_{i,\sigma} (\epsilon_f + \lambda_{i\sigma}) f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + \epsilon_c \sum_{j,\sigma} c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i d_i^+ d_i + t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (z_{i\sigma}^+ f_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \text{э.с.}) - \sum_i \lambda_{i\sigma} (s_{i\sigma}^+ s_{i\sigma} + d_i^+ d_i) + \sum_i \lambda_i^0 (e_i^+ e_i + s_{i\uparrow}^+ s_{i\uparrow} + s_{i\downarrow}^+ s_{i\downarrow} + d_i^+ d_i - 1), \quad (4)$$

где $\lambda_{i\sigma}$ и λ_i^0 – множители Лагранжа, которые введены с целью удовлетворить связям (2) и (3), а оператор $z_{i\sigma}$ имеет вид

$$z_{i\sigma} = (1 - d_i^+ d_i - s_{i\sigma}^+ s_{i\sigma})^{-1/2} (e_i^+ s_{i\sigma}^+ + s_{i-\sigma}^+ d_i) (1 - e_i^+ e_i - s_{i-\sigma}^+ s_{i-\sigma})^{-1/2}, \quad (5)$$

где левые и правые операторные множители выбраны из условия совпадения матричных элементов операторов H и H_{sb} при $U = 0$. Подчеркнем, что этот вид операторных множителей, предложенный в [3] для половинного заполнения хаббардовской зоны, справедлив и для многозонной модели при произвольном заполнении зоны с кулоновскими корреляциями (в рассматриваемых соединениях – зоны переходного металла Eu с f -оболочками), в чем нетрудно убедиться, рассмотрев предельный случай $U = 0$.

Для расчета E_0 и $n_{i\sigma} = \langle f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} \rangle$ мы использовали приближение седловой точки [3], согласно которому все бозонные поля заменяются их средними, определяемыми из условия абсолютного минимума величины $E_0 = \langle H_{sb} \rangle$ как функции переменных $\lambda_{i\uparrow}$, $\lambda_{i\downarrow}$ и d_i^2 . Поскольку заранее неизвестно, является ли основное состояние парамагнитным или антиферромагнитным, мы делили двумерную решетку на две подрешетки (A и B). В парамагнитной фазе $\lambda_{i\sigma}^A = \lambda_{i\sigma}^B = \lambda$, а в антиферромагнитной $\lambda_{i\sigma}^A = \lambda_{i-\sigma}^B = \lambda_\sigma$ (независимо от i – в силу трансляционной инвариантности). Поскольку d_i^2 также не зависит от i , то задача сводится к минимизации функционала $E_0(\lambda_\uparrow, \lambda_\downarrow, d^2)$. Из двух возможных типов состояний (парамагнитное или антиферромагнитное) основным, естественно, является то, для которого энергия E_0 минимальна. Величина $n_{i\sigma}$ при этом находится самосогласованно путем использования условия (3).

С целью проверки точности slave-boson-метода, мы, как и в [6], провели расчеты для 4-узельного кластера Eu_2X_2 с шестью электронами и сравнили результаты с решением, найденным путем численной диагонализации исходного гамильтониана (1). Относительная ошибка численных вычислений не

превышает 10^{-8} , то есть численное решение фактически является точным. Зависимости E_0 от U , рассчитанные нами для случая $\epsilon_f/t = 1$, $\epsilon_c/t = -1$, приведены на рис.1. На этом же рисунке изображены три кривые $E_0(U)$, рассчитанные по описанным в [6] алгоритмам (они совпадают с приведенными в работе [6], заметим лишь, что в [6] кривые 1 и 3 перепутаны местами).

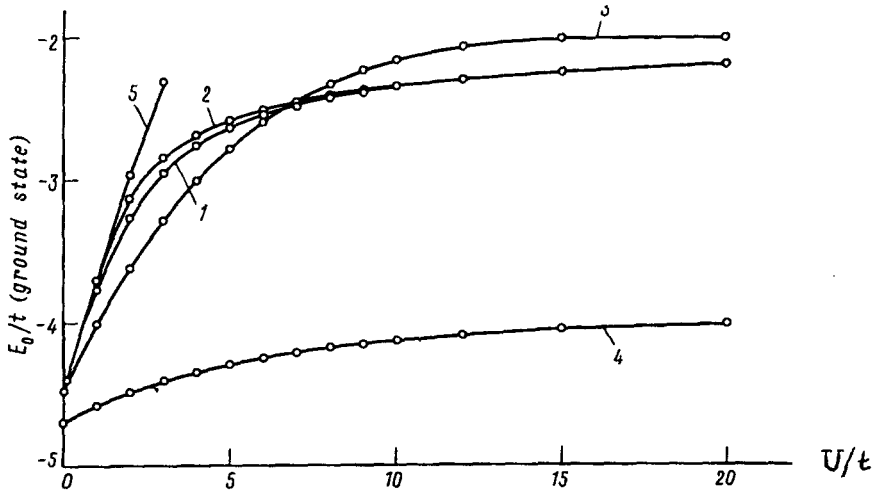


Рис.1. Зависимости энергии основного состояния E_0 двумерного кластера $E_{u_2}X_2$ от энергии кулоновского отталкивания U на узлах E_u : 1 – точное численное решение; 2 – решение, полученное нами slave-boson-методом; 3-5 – результаты работы [6] для различного типа связей в slave-boson-методе

Из рис.1 следует, что погрешность slave-boson-метода не превышает 3%, а в наиболее интересном с физической точки зрения диапазоне $U/t > 10$ (когда энергия отталкивания больше ширины зоны) значительно меньше 1%. С этим утверждением резко контрастируют кривые 3-5 из работы [6]. Отметим, что наша кривая 2 при всех U расположена выше точного решения 1 (это естественно, так как любой вариационный метод дает оценку E_0 сверху), тогда как кривая 3 (являющаяся "наилучшим приближением" работы [6]) пересекает кривую 1 при $U/t \approx 7$.

Причина сильного расхождения данных работы [6] с точным решением заключается прежде всего в игнорировании возможности реализации антиферромагнитного состояния. Между тем, как показали наши расчеты, основное состояние является парамагнитным лишь при $U/t \leq 1,5$. Вопрос о типе основного состояния важен, поскольку от его решения зависит вывод о наличии или отсутствии в системе тех или иных эффектов. Так, например, если в парамагнитном состоянии рассматриваемого кластера имеет место переход Бринкмана-Райса (при этом E_0 и $n_{i\sigma}$ перестают зависеть от U , начиная с некоторой критической величины U), то в антиферромагнитном состоянии (которое и является основным!) этот переход отсутствует. Кроме того, вариация по параметрам $\lambda_{i\sigma}$ в [6] не проводилась, поэтому даже в парамагнитной области был получен неверный результат.

На рис.2 представлена зависимость $n_{i\sigma}$ от U . Соответствие slave-boson-метода (кривая 2) с точным решением (кривая 1) опять же оказывается очень хорошим, чего нельзя сказать о кривых 3 и 4 из работы [6], рассчитанных

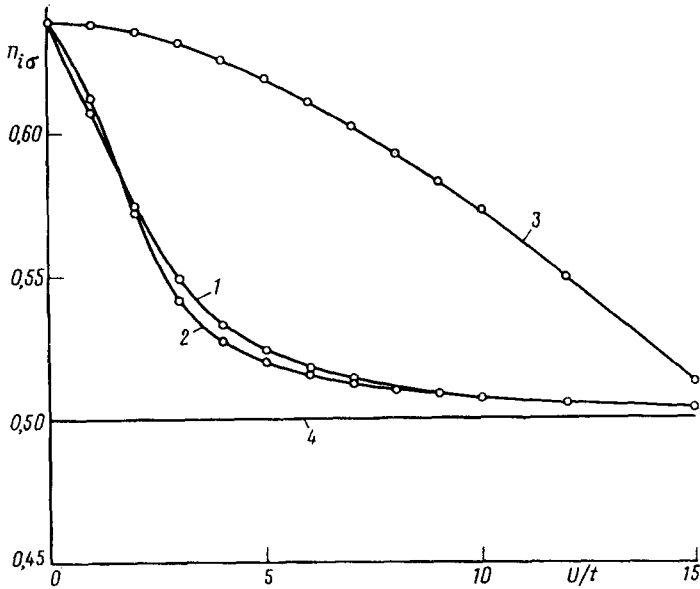


Рис.2. Зависимости среднего числа электронов (с фиксированной проекцией спина) $n_{i\sigma} = \langle f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} \rangle$ на узлах E_u от энергии кулоновского отталкивания U на узлах E_u в двумерном кластере Eu_2X_2 : 1 - точное численное решение; 2 - решение, полученное нами slave-boson-методом; 3 и 4 - кривые, рассчитанные в [6] через фермионные средние (3) и бозонные переменные (4)

нами по описанному в [6] алгоритму (и совпадающих с соответствующими кривыми в [6]). Подчеркнем, что зависимости $n_{i\sigma} = \langle f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} \rangle$ и $n_{i\sigma} = \langle s_{i\sigma}^+ s_{i\sigma} + d_i^+ d_i \rangle$ от U , определенные через фермионные средние и бозонные переменные, соответственно, совпали друг с другом (кривая 2). Это - закономерное следствие использованной нами процедуры самосогласования при минимизации функционала $E_0(\lambda_{\uparrow}, \lambda_{\downarrow}, d^2)$ (см. также [4]). В [6] величины $\langle f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} \rangle$ и $\langle s_{i\sigma}^+ s_{i\sigma} + d_i^+ d_i \rangle$ различаются (кривые 3 и 4 на рис.2), поскольку метод расчета не является самосогласованным.

В заключение приведем результаты, полученные нами для двумерной модели Эмери [5], описывающей плоскости CuO_2 в ВТСП. Соответствующий гамильтониан имеет вид (мы пренебрегаем кулоновским отталкиванием на узлах кислорода, а также между узлами меди и кислорода)

$$H = \epsilon \sum_{j,\sigma} p_{j\sigma}^+ p_{j\sigma} + t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (p_{j\sigma}^+ d_{i\sigma} + \text{э.с.}) + U_d \sum_i d_{i\uparrow}^+ d_{i\uparrow} d_{i\downarrow}^+ d_{i\downarrow}, \quad (6)$$

где $d_{i\sigma}^+$ ($d_{i\sigma}$) и $p_{j\sigma}^+$ ($p_{j\sigma}$) - операторы рождения (уничтожения) дырки на атомах меди и кислорода соответственно; t - интеграл перескока между ближайшими узлами меди и кислорода; ϵ - разница энергий дырки на узлах кислорода и меди; U - энергия кулоновского отталкивания дырок на атомах меди.

На рис.3 и 4 приведены зависимости $n_{i\sigma} = \langle d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} \rangle$ и E_0 от ϵ , рассчитанные для кластера Cu_4O_8 точно (с использованием численного алгоритма Ланцоша [2]) и slave-boson-методом [4] при $U_d/t = 8$ (полное число дырок в кластере мы полагали равным числу узлов меди, то есть четырем, что отвечает недопированному диэлектрическому состоянию плоскости CuO_2 в ВТСП). Видно, что погрешность slave-boson-метода не превышает 1% как при $\epsilon/t < 1$ (диэлектрическое состояние типа "charge-transfer"), так и при $\epsilon/t \gg 1$ (антиферромагнитное состояние мотт-хаббардовского типа). Подчеркнем, что прекрасное совпадение результатов slave-boson-метода с точными решениями

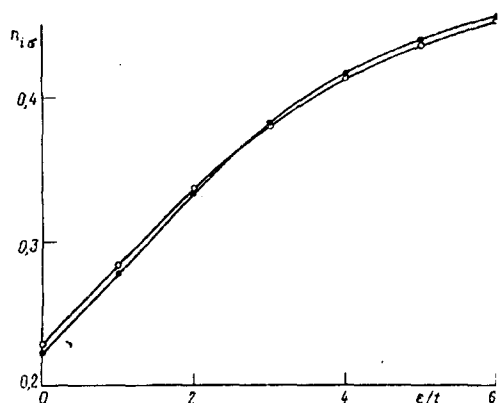


Рис.3. Зависимости среднего числа дырок (с фиксированной проекцией спина) на узле меди $n_{i\sigma} = \langle d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma} \rangle$ от разности узельных энергий кислорода и меди ϵ в кластере Cu_4O_8 с четырьмя дырками: \circ – точное численное решение; \bullet – решение, полученное slave-boson-методом

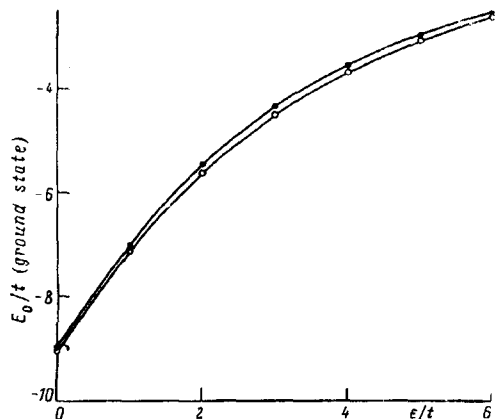


Рис.4. Зависимости энергии основного состояния E_0 двумерного кластера Cu_4O_8 с четырьмя дырками от разности узельных энергий кислорода и меди ϵ : \circ – точное численное решение; \bullet – решение, полученное slave-boson-методом

мы обнаружили и при других числах дырок в кластере, а также при расчете различных корреляторов, таких как $\langle n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \rangle$ и др.

Таким образом, наш основной вывод состоит в том, что slave-boson-метод является очень хорошим приближением при исследовании не только однозонной, но и многозонных моделей Хаббарда, позволяя определить характеристики основного состояния с точностью $\sim 1\%$. Необходимыми условиями корректного использования этого метода являются: 1) учет возможности реализации в системе как парамагнитного, так и антиферромагнитного состояний; 2) включение в гамильтониан вариационных параметров $\lambda_{i\sigma}$; 3) процедура самосогласования при минимизации функционала энергии.

Работа поддерживается Научным советом по проблеме ВТСП и выполнена в рамках проекта 94031 государственной программы "Высокотемпературная сверхпроводимость". Работа поддержана также грантами 94-02-05755 и 94-02-04-843 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом М67300 Международного научного фонда и Правительства России.

1. В.Ф.Елесин, В.А.Кашурников, Л.А.Опёнов, Письма в ЖЭТФ **60**, 174 (1994).
2. В.Ф.Елесин, В.А.Кашурников, Л.А.Опёнов, А.И.Подливаев, ЖЭТФ **99**, 237 (1991); ЖЭТФ **101**, 682 (1992); Physica C **195**, 171 (1992).
3. G.Kotliar and A.Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986).
4. W.Zhang, M.Avignon, and K.H.Bennemann, Phys. Rev. B **42**, 10192 (1990).
5. V.J.Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
6. С.Н.Молотков, С.С.Назин, И.А.Рыжкин, Письма в ЖЭТФ **59**, 812 (1994).
7. G.Baumgartel, J.Schmalian, and K.-H.Bennemann, Phys. Rev. B **48**, 3983 (1993); J.Schmalian, G.Baumgartel, and K.-H.Bennemann, Solid State Commun. **86**, 119 (1993).