

# Спектральные функции модели Хаббарда в случае половинного заполнения

© С.Г. Овчинников, Е.И. Шнейдер

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук,  
660036 Красноярск, Россия

E-mail: shneyder@iph.krasn.ru, sgo@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 24 ноября 2003 г.)

В предположении наличия дальнего антиферромагнитного порядка при низких температурах рассчитаны спектральные функции и плотность состояний в двумерной модели Хаббарда с половинным заполнением в приближении Хаббард-I. Результаты сопоставлены с данными численно точного метода — квантового метода Монте-Карло. Рассмотрено влияние перескоков на следующего за ближайшим соседом на формирование электронной структуры.

Авторы благодарят за поддержку программу Отделения физических наук РАН „Сильно коррелированные электроны“.

**1.** Модель Хаббарда, учитывающая движение электронов в твердом теле наряду с межэлектронным взаимодействием, является одной из базовых в теории систем с сильными электронными корреляциями (СЭК). Дело в том, что, несмотря на недостаточность модели для правильного количественного описания свойств конкретных веществ, она отражает важные эффекты, характерные для систем с СЭК [1]. Определенный интерес представляет исследование приближений в атомном пределе, так как известно, что такие системы проще описывать исходя из локального подхода, а не из теории зонного предела Хартри–Фока [2]. В пределе  $t \ll U$  приближение Хаббард-I дает простейшее описание системы в виде двух энергетических полос, разделенных щелью Мотта–Хаббарда [1]. С ростом отношения  $t/U$  данное приближение становится заведомо неверным, однако оно вполне применимо в режиме СЭК. В диаграммной технике для  $X$ -операторов Хаббарда [2,3] решение Хаббард-I является результатом приближения Хартри–Фока. Квантовый метод Монте-Карло (КММК) позволяет сопоставить электронную структуру модели Хаббарда, полученную в пределе  $t \ll U$  в приближении Хаббард-I, с результатами численно точных расчетов (например, [4,5]). Такое сравнение было проведено в работе [4]; оно показало, что спектральные функции  $A(\mathbf{k}, \omega)$  при высоких температурах достаточно хорошо описываются парамагнитным решением Хаббард-I, в то время как при низких температурах ни парамагнитное решение Хаббард-I, ни решение в виде волны спиновой плотности (ВСП) даже качественно не воспроизводят электронную структуру модели. Известно, что ВСП-решение применимо в режиме слабых электронных корреляций, когда  $U \ll W = zt$ , но неприменимо в системах с СЭК. В настоящей работе спектральные функции двумерной модели Хаббарда с половинным заполнением были рассчитаны в приближении Хаббард-I в предположении существования дальнего антиферромагнитного порядка при низких температурах.

Сопоставление результатов с данными, полученными с помощью КММК, показало, что функции находятся

в разумном согласии с численно точным расчетом, несмотря на все недостатки принятого приближения. Перечислим эти недостатки.

1) Согласно теореме Мермина–Вагнера, при конечных температурах в двумерной системе не существует дальнего антиферромагнитного порядка, так что необходимо предполагать некоторую анизотропию или межплоскостное взаимодействие. Тем не менее рассмотренное приближение допустимо, так как мы сравниваем наши результаты с данными КММК для конечных систем, когда вышеупомянутая теорема не работает.

2) Приближение Хаббард-I не дает самосогласованного описания антиферромагнитного состояния: существует только равное нулю решение для намагниченности подрешетки  $m$ . Поэтому в пределе  $t \ll U$  для системы с  $n_e = 1$  мы строим эффективный гамильтониан Гейзенберга с константой антиферромагнитного взаимодействия  $J = 4t^2/U$  и рассчитываем намагниченность самосогласованно в модели Гейзенберга. При  $T = 0$  величина  $m$  уменьшается от номинального значения вследствие нулевых квантовых флуктуаций, и мы получаем  $m = 0.3$  в предположении слабости межплоскостного взаимодействия по сравнению с внутривещным.

Следует отметить, что выход за рамки приближения среднего поля требует учета однопетлевых диаграмм для собственной энергии [2,3]. В магнитоупорядоченной фазе наибольший вклад определяется диаграммами, описываемыми спин-волновыми возбуждениями. Основной эффект спиновых возбуждений заключается в перенормировке чисел заполнения, которые мы, согласно [6], определяем следующим образом:

$$\begin{aligned} n_{f,\sigma} + n_{f,\bar{\sigma}} &= n_e, \\ n_{f,\sigma} - n_{f,\bar{\sigma}} &= 2m = (1 - 2n_{sf}). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $2n_{sf}$  — концентрация магнонов,  $n_{f,\sigma}$  — число электронов на узле с заданной проекцией спина. Таким образом, введение ненулевой намагниченности подрешеток отвечает учету первой существенной поправки к приближению среднего поля.

2. Гамильтониан модели Хаббарда может быть записан в виде

$$\hat{H} - \mu \hat{N}_e = \sum_{f,\sigma} \left[ (\varepsilon - \mu) n_{f,\sigma} + \frac{1}{2} U n_{f,\sigma} n_{f,\bar{\sigma}} \right] + \sum_{f,g,\sigma} (t_{f,g} a_{f,\sigma}^+ a_{g,\sigma} + \text{h.c.}), \quad (2)$$

где  $a_{f,\sigma}^+$  ( $a_{f,\sigma}$ ) — оператор рождения (уничтожения) электрона на узле  $f$  со спином  $\sigma = \pm 1/2$ ;  $n_{f,\sigma} = a_{f,\sigma}^+ a_{f,\sigma}$ ;  $\varepsilon$  — одноэлектронная энергия в кристаллическом поле;  $\mu$  — химический потенциал;  $U$  — внутриатомный матричный элемент отталкивания;  $t_{f,g}$  — интеграл перескока между узлами  $f$  и  $g$  в приближении ближайших соседей.

Далее анализируется простейшее пространственно неоднородное решение приведенного гамильтониана для двумерной квадратной решетки с антиферромагнитным упорядочением спинов (антиферромагнитный порядок вблизи половинного заполнения обусловлен кинетическим суперобменом в системе). Вследствие наличия двух подрешеток функция Грина [7] выглядит следующим образом:

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N} \times \left( \sum_{f,f'} \exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{f} - \mathbf{f}')\} \langle \langle a_f | a_{f'}^+ \rangle \rangle \sum_{f,g} \exp\{i\mathbf{k}(g - \mathbf{f})\} \langle \langle a_g | a_f^+ \rangle \rangle \right) \times \left( \sum_{f,g} \exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{f} - \mathbf{g})\} \langle \langle a_f | a_g^+ \rangle \rangle \sum_{g,g'} \exp\{i\mathbf{k}(g - \mathbf{g}')\} \langle \langle a_g | a_{g'}^+ \rangle \rangle \right). \quad (3)$$

Аналитические выражения для функций Грина получены в известном приближении Хаббард-I, которому соответствует следующее расщепление средних [1]:

$$\langle \langle a_{f+h,\sigma} n_{f,\sigma} | a_{f',\sigma}^+ \rangle \rangle \rightarrow \langle n_{f,\bar{\sigma}} \rangle \langle \langle a_{f+h,\sigma} | a_{f',\sigma}^+ \rangle \rangle. \quad (4)$$

В атомном пределе более удобным является представление операторов Хаббард, с которыми обычные фермиевские операторы связаны линейной комбинацией

$$a_{f,\sigma}^+ = X_f^{\sigma,0} + 2\sigma X_f^{2,\bar{\sigma}}, \quad a_{f,\sigma} = X_f^{0,\sigma} + 2\sigma X_f^{\bar{\sigma},2}. \quad (5)$$

Поэтому выражение для функций Грина запишем в новом представлении ( $A, B$ -межподрешеточные индексы)

$$G_{AA}^u = \langle \langle X_A^{\bar{\sigma},2} | X_A^{2,\bar{\sigma}} \rangle \rangle = F_A^{\bar{\sigma},2} \left( (E - \varepsilon_1)^2 [v + F_B^{\bar{\sigma},2} t(\mathbf{k}) - F_A^{0,\sigma} t^2(\mathbf{k})(E - \varepsilon_1 - F_B^{0,\sigma} U)] \right) / \prod_{i=1}^4 (E - E_i),$$

$$G_{AB}^u = \langle \langle X_A^{\bar{\sigma},2} | X_B^{2,\bar{\sigma}} \rangle \rangle = F_B^{\bar{\sigma},2} \left( (E - \varepsilon_1)^2 [v + F_A^{\bar{\sigma},2} t(\mathbf{k}) - F_B^{0,\sigma} t^2(\mathbf{k})(E - \varepsilon_1 - F_A^{\bar{\sigma},2} U)] \right) / \prod_{i=1}^4 (E - E_i),$$

$$G_{AA}^l = \langle \langle X_A^{0,\sigma} | X_A^{\sigma,0} \rangle \rangle = F_A^{0,\sigma} \left( (E - \varepsilon_1) [v^2 - F_A^{\bar{\sigma},2} F_B^{\bar{\sigma},2} t^2(\mathbf{k}) + F_B^{0,\sigma} t(\mathbf{k}) [v^2 - F_A^{\bar{\sigma},2} t(\mathbf{k}) v]] \right) / \prod_{i=1}^4 (E - E_i),$$

$$G_{AB}^l = \langle \langle X_B^{0,\sigma} | X_A^{\sigma,0} \rangle \rangle = F_B^{0,\sigma} \left( (E - \varepsilon_1) [v^2 - F_A^{\bar{\sigma},2} F_B^{\bar{\sigma},2} t^2(\mathbf{k}) + F_A^{0,\sigma} t(\mathbf{k}) [v^2 - F_B^{\bar{\sigma},2} t(\mathbf{k}) v]] \right) / \prod_{i=1}^4 (E - E_i), \quad (6)$$

где введены следующие обозначения:  $F_A^{0,\sigma} = \langle X_A^{0,0} + X_A^{\sigma,\sigma} \rangle$ ,  $F_A^{\bar{\sigma},2} = \langle X_A^{2,2} + X_A^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}} \rangle$  — факторы заполнения,  $\varepsilon_1 = (\varepsilon - \mu)$ ,  $v = (E - \varepsilon_1 - U)$ ; индексы  $l$  и  $u$  относятся к нижней и верхней хаббардовским зонам соответственно.

Мы ограничиваемся областью половинного заполнения, где выражение для химического потенциала известно [8] и справедливо при любых значениях параметров модели и температуры:  $\mu = \varepsilon + U/2$ . В этом случае уравнение, определяющее спектр квазичастиц двумерной антиферромагнитной решетки, имеет аналитическое решение

$$E_{\pm}^{l,u} = \pm \frac{1}{2} \left( t^2(\mathbf{k}) \pm \sqrt{t^4(\mathbf{k}) + 4U^2 t^2(\mathbf{k}) n_{f,\sigma} n_{f,\bar{\sigma}}} - 2\varepsilon_1(\varepsilon_1 + U) \right)^{1/2}. \quad (7)$$

Вследствие двукратного уменьшения зоны Бриллюэна в антиферромагнитной фазе каждая хаббардовская подзона парафазы расщепляется на две. Если бы полученные зоны являлись обычными одноэлектронными зонами с числом состояний на атом, равным единице, то полное число состояний было бы равно четырем. Однако данные зоны соответствуют квазичастицам, имеющим дробный спектральный вес, который явно рассчитывается в рамках КММК. В наших расчетах спектральный вес определяется фактором заполнения  $F_g^{m,n} = \langle X_g^{m,m} + X_g^{n,n} \rangle$ .

Интересно заметить, что квазичастичный спектр (7) может быть переписан с использованием хорошо известного решения для парамагнитной фазы. При этом оказывается, что дисперсия антиферромагнитного состояния имеет вид, аналогичный закону дисперсии для волны спиновой плотности:

$$E_{\pm}^{l,u} = \pm \sqrt{(\xi_{\pm}^{\pm})^2 + \Delta^2}, \quad (8)$$

где  $\Delta = Um$  — параметр щели,  $m = 1/2(n_{f,\sigma} - n_{f,\bar{\sigma}})$  — намагниченность подрешетки,  $\xi_{\mathbf{k}}^{\pm}$  — дисперсия верхней и нижней хаббардовских зон в парамагнитной фазе с перенормированной величиной параметра кулоновского отталкивания  $\tilde{U} = U\sqrt{1 - 4m^2}$ ,

$$\xi_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{1}{2} \left( t(\mathbf{k}) \pm \sqrt{t^2(\mathbf{k}) + \tilde{U}^2} \right). \quad (9)$$

Если намагниченность равна нулю, то полученные зоны в точности соответствуют верхней и нижней хаббардов-

ским зонам парафазы. В одноэлектронном ВСП-состоянии квазичастичная дисперсия описывается формулой вида (9), при этом  $\xi^\pm$  является дисперсией свободных электронов.

Далее рассматриваются суммарная спектральная функция системы, определяемая как сумма мнимых частей функций Грина (6),

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Sp}(\text{Im} G(\mathbf{k}, \omega)) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left( G_{AA}^l(\mathbf{k}, \omega) + G_{BB}^l(\mathbf{k}, \omega) + G_{AA}''(\mathbf{k}, \omega) + G_{BB}''(\mathbf{k}, \omega) \right) \quad (10)$$

и одноэлектронная плотность состояний

$$N(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, \omega). \quad (11)$$

Принятое приближение не содержит информации о ширине спектральных линий (в выражение для спектральной плотности входят обычные дельта-функции). Для сопоставления результатов с данными, полученными численным КММК, аппроксимируем дельта-функции лоренцианом с наиболее подходящим параметром  $\delta$ . Такая перенормировка ширины и веса спектральных линий квазичастиц отвечает некоторой ненулевой мнимой части величины собственной энергии  $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ . Необходимо отметить, что между параметром  $\delta$  и температурой нет однозначного соответствия, однако при уменьшении температуры этот параметр также стремится к нулю. Несмотря на то что теорема Мермина–Вагнера запрещает существование антиферромагнитного порядка в двумерной системе при конечных температурах, обычно полагают, что система „эффективно упорядочена“, если спиновая корреляционная длина становится сравнимой с размерами системы.

Найденные спектральные функции и плотность состояний представлены на рис. 1–5, где также приведены данные численно точных расчетов в рамках КММК

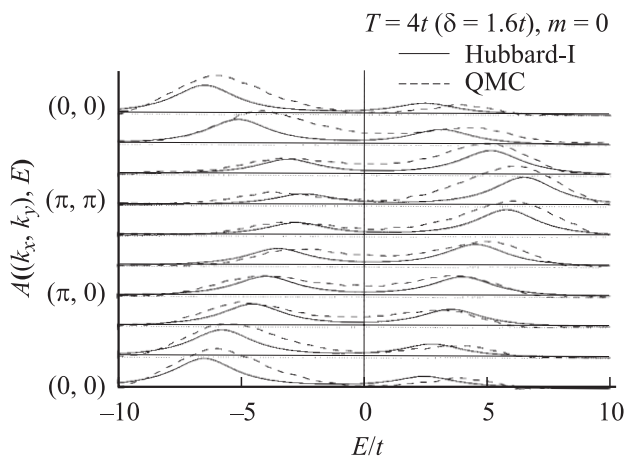


Рис. 1. Спектральные функции модели Хаббарда при высоких температурах  $T = 4t$  (Хаббард-I и КММК [4]).

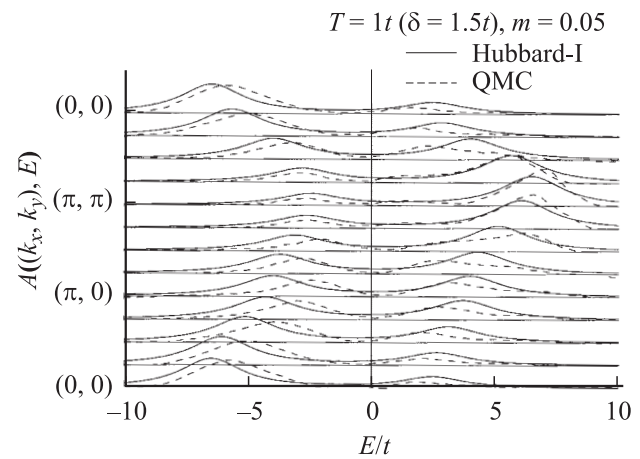


Рис. 2. Спектральные функции модели Хаббарда при высоких температурах  $T = 1t$  (Хаббард-I и КММК [4]).

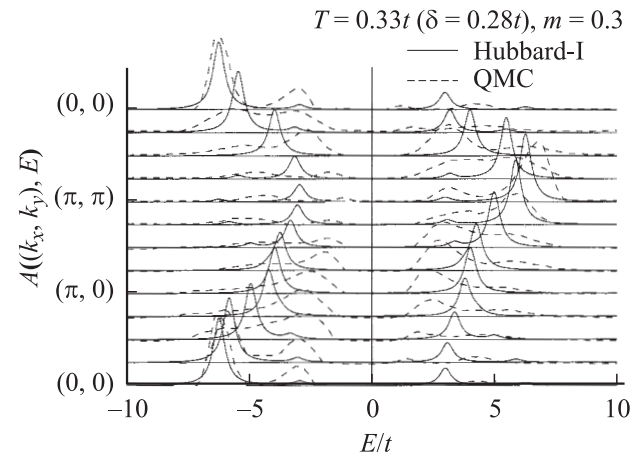


Рис. 3. Спектральные функции модели Хаббарда при средних температурах  $T = 0.33t$  (Хаббард-I и КММК [4]).

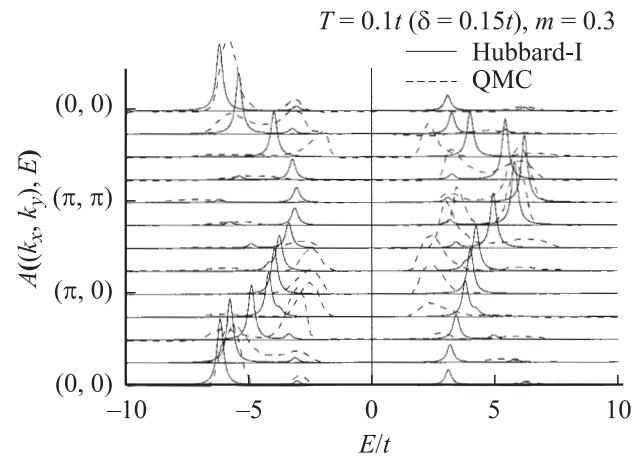


Рис. 4. Спектральные функции модели Хаббарда при низких температурах  $T = 0.1t$  (Хаббард-I и КММК [4]).

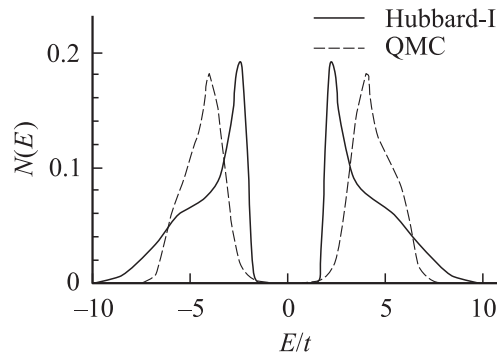


Рис. 5. Плотность состояний в модели Хаббарда с половинным заполнением (Хаббард-I и КММК [5]).

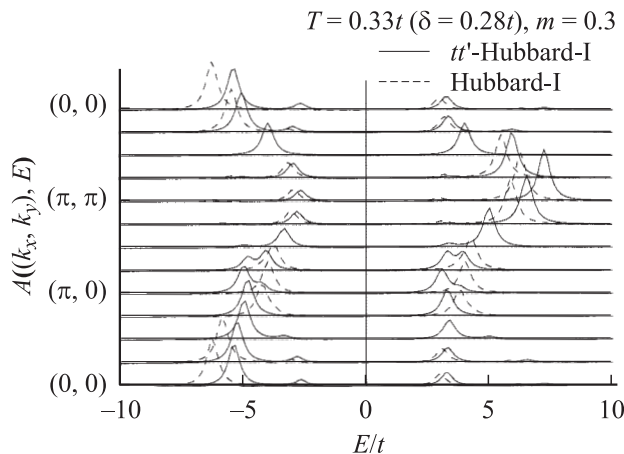


Рис. 6. Спектральные функции модели Хаббарда (Хаббард-I и  $tt'$ -Хаббард-I,  $t'/t = 0.3$ ).

(QMK) [4,5]. При этом использованы следующие значения параметров системы:  $U = 8t$ ,  $\varepsilon - \mu + U/2 = 0$  и  $t(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$ ; в области низких температур мы полагаем, что параметр намагниченности подрешетки  $m$  равен 0.3.

При высоких температурах (рис. 1, 2) приближение Хаббард-I достаточно хорошо воспроизводит положение и вес спектральных пиков, соответствующих верхней и нижней хаббардовским зонам. Это объясняется тем, что выше температуры Нееля роль эффектов спиновых корреляций (не учтенных в данном приближении) становится незначительной.

При температуре  $T = 1.00t$  расчет в рамках КММК [4] свидетельствует о наличии очень слабых сателлитов для незанятого состояния в точке  $k = (0, 0)$  и для заполненного состояния в точке  $k = (\pi, \pi)$ . Эти сателлиты соответствуют рассчитанным зонам  $E_+^u$  и  $E_-^l$  с весьма малым спектральным весом. Конечно, при таких температурах не существует дальнего антиферромагнитного упорядочения в системе, однако мы полагаем, что имеется ближний магнитный порядок, что приводит к появлению слабых сателлитов в функции  $E(\mathbf{k})$ .

При средних и низких температурах (рис. 3, 4) каждая хаббардовская зона парамагнитного состояния рас-

щепляется на две подзоны  $E_{1,2}^{l,u}$ . При этом одна из подзон имеет наибольший спектральный вес, другая выглядит как слабый сателлит. Нетривиальным результатом, полученным как в рамках КММК, так и в приближении Хаббард-I, является перераспределение спектрального веса между сильными и слабыми пиками. Тенденции перераспределения спектрального веса в наших и КММК-расчетах сохраняются, причем в некоторых областях зоны Бриллюэна (вблизи  $\mathbf{k} = 0, 0$  и  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ ) наблюдается разумное согласие в форме и расположении пиков  $A(\mathbf{k}, \omega)$ , в то время как в других областях  $k$ -пространства ( $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$  и  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ ) имеется существенное различие между данными КММК и Хаббард-I.

Одноэлектронная плотность состояний (рис. 5) при низких температурах имеет два пика, соответствующих занятой ( $l$ ) и незаполненной ( $u$ ) хаббардовским зонам. Слабые сателлиты в спектральной плотности приводят к образованию плечей у обоих пиков. Данные, полученные с помощью рассмотренного приближения и в рамках КММК [6], находятся в качественном согласии.

Мы также выяснили, как влияет на формирование электронной структуры учет следующего за ближайшим соседом. Гамильтониан  $tt'$ -модели включает перекоки внутри одной подрешетки, описываемые членом  $\sum_{f,f' \in A,\sigma} (t'_{f,f'} a_{f,\sigma}^+ a_{g,\sigma} + \text{h.c.})$ . В простейшем случае  $k$ -зависимость параметра  $t'$  описывается формулой  $t'(\mathbf{k}) = 4t' \cos k_x \cos k_y$ . Спектральные функции модели Хаббарда, соответствующие антиферромагнитному решению Хаббард-I, представлены на рис. 6 для отношения  $t'/t = 0.3$ . Сопоставление решений показывает, что наиболее существенным эффектом является возникновение дополнительных квазичастичных состояний в точках  $(\pi, 0)$  и  $(\pi, \pi/4)$  зоны Бриллюэна. В точке  $(\pi, 0)$  эти состояния выглядят как небольшие сателлиты вблизи основного пика. Положение дополнительных пиков определяется как спиновыми флуктуациями, так и параметром  $t'$ . В том случае, когда концентрация магнонов  $2n_{s,f}$  равна нулю и  $t' = 0$ , в электронной структуре имеются два бездисперсионных уровня, расположенные выше потолка валентной зоны и ниже дна зоны проводимости.

3. Таким образом, в настоящей работе показано, что при низких температурах спектральная функция, найденная с помощью модели Хаббарда в приближении Хаббард-I, так же как и полученная при численно точных расчетах в рамках КММК, состоит из четырех пиков, соответствующих антиферромагнитным хаббардовским подзонам. Рассмотренное приближение сохраняет основные тенденции перераспределения спектрального веса, однако в некоторых областях  $k$ -пространства наблюдается количественное несогласие. Плотность состояний в решении Хаббард-I соответствует данным расчета в рамках КММК. В формировании электронной структуры существенным эффектом, к которому приводит учет следующего за ближайшим соседом, является возникновение дополнительных квазичастичных состояний в определенных точках зоны Бриллюэна.

## Список литературы

- [1] J. Hubbard. Proc. R. Soc. (London) A **276**, 238 (1963).
- [2] Р.О. Зайцев. ЖЭТФ **68**, 1, 207 (1975).
- [3] Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. Наука, М. (1987). 264 с.
- [4] C. Grober, R. Eder, W. Hanke. Phys. Rev. B **62**, 7, 4336 (2000).
- [5] N. Bulut, D.J. Scalapino, S.R. White. Phys. Rev. Lett. **73**, 5, 748 (1994).
- [6] А.Н. Подмарков, И.С. Сандалов. ЖЭТФ **86**, 4, 146 (1984).
- [7] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1975). 528 с.
- [8] C. Castellani, C.Di. Castro, D. Feinberg, J. Ranniger. Phys. Rev. Lett. **43**, 26, 1957 (1979).