

ТРЕХФЕРМИОННЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Иванцов И.Д.

Научный руководитель д-р физ.-мат. наук Овчинников С.Г.

Сибирский Федеральный Университет

Как известно, модель Хаббарда является одной из базовых моделей квантовой теории конденсированных состояний. Ее главное достоинство в том, что она позволяет качественно описывать общие свойства систем с сильными электронными корреляциями (СЭК). В режиме СЭК кинетическая энергия, мерой которой является полуширина зоны проводимости свободных электронов W , мала по сравнению с внутриатомным параметром кулоновского взаимодействия U . В этом случае стандартный зонный подход неприменим, и вместо металла для электронной концентрации $n=1$ реализуется состояние диэлектрика Мотта-Хаббарда. Зонная структура диэлектрика Мотта-Хаббарда описывается заполненной нижней пустой незаполненной зонами Хаббардовских фермионов. В настоящей работе исследуется вопрос о возможных трехфермионных состояниях диэлектрика Мотта-Хаббарда.

Рассмотрим модель Хаббарда. Как известно гамильтониан этой модели имеет вид:

$$H = \sum_{f\sigma} \left((\varepsilon - \mu)n_{f\sigma} + \frac{U}{2}n_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}} \right) + \sum_{fg\sigma} t_{fg}a_{f\sigma}^+ \alpha_{g\sigma}$$

Где $a_{f\sigma}^+$ и $\alpha_{g\sigma}$ – операторы рождения/уничтожения электрона со спином σ на узле f/g соответственно, $n_{f\sigma}$ – оператор плотности электронов со спином σ , ε – энергия электрона на узле, μ – химический потенциал, U – параметр кулоновского взаимодействия на узле, t_{fg} – интеграл перескока.

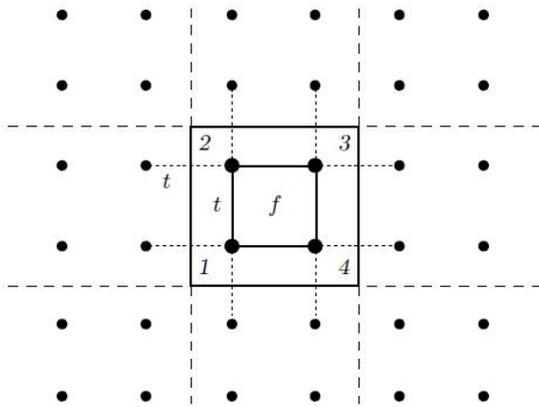


Рисунок 1. Разбиение решетки на кластеры 2x2

В данной работе для расчетов используется кластерная теория возмущений. Первоначальная двумерная квадратная решетка разбита на кластеры 2x2 (Рисунок 1). Построение X-операторов проводится на базисе собственных векторов и собственных значений отдельного кластера. В представлении X-операторов гамильтониан модели Хаббарда имеет вид:

$$H = \sum_f H_0(f) + \sum_{f \neq g} H_1(f, g)$$

$$H_0(f) = \sum_p \varepsilon_p X_f^{pp}$$

$$H_1(f, g) = \sum_{ij\sigma} t_{fg}^{ij} \left(\sum_{pq} A^*(p, q; i, \sigma) X_f^{pq} \right) \left(\sum_{mn} A(m, n; j, \sigma) X_g^{mn} \right)$$

Где t_{fg}^{ij} – интеграл перескока между узлами i и j в кластерах f и g соответственно, $A^*(p, q; i, \sigma)/A(m, n; j, \sigma)$ – матричные элементы оператора рождения/уничтожения электрона на узле i/j со спином σ . Здесь использовано представление операторов $a_{fi\sigma}^+$ и $\alpha_{gj\sigma}$ через операторы Хаббарда

$$a_{fi\sigma}^+ = \sum_{pq} A^*(p, q; i, \sigma) X_f^{pq} \quad \alpha_{gj\sigma} = \sum_{mn} A(m, n; j, \sigma) X_g^{mn}$$

Записав уравнение движения для функции Грина можно перейти к поиску решения:

$$E \ll X_f^{\alpha\beta} | X_g^{\delta\gamma} \gg = \langle \{ X_f^{\alpha\beta}, X_g^{\delta\gamma} \} \rangle + \ll [X_f^{\alpha\beta}, H] | X_g^{\delta\gamma} \gg$$

Далее для функции Грина будет использоваться обозначение $\ll X_f^{\alpha\beta} | X_g^{\delta\gamma} \gg = D^{\alpha\beta}(f, g)$, а так же для краткости индексы у матричных элементов будут опущены.

$$(E - \varepsilon_{\alpha\beta}) D^{\alpha\beta}(f, g) = \delta_{fg} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} F_{\alpha\beta} + \\ + \sum_{hmnij\sigma} t_{fh}^{ij} A \left(A^* D_{mn}^{\alpha\beta-}(f, h, g) + A^* D_{mn}^{\alpha+\beta}(f, h, g) \right)$$

Где $D_{mn}^{\alpha\beta-}(f, h, g) = \ll X_f^{\alpha\beta-} X_h^{mn} | X_g^{\delta\gamma} \gg$, $\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha$, $F_{\alpha\beta} = \langle X_f^{\alpha\alpha} \rangle + \langle X_f^{\beta\beta} \rangle$. В случае рассмотрения трехэлектронных переходов (число электронов в состоянии α и β равно 1 и 4 соответственно) можно заметить, что функция Грина трехэлектронного перехода разбивается на функции Грина двух- и одноэлектронных переходов на кластерах f и h соответственно. После Фурье-преобразования уравнение можно записать в терминах обратного пространства:

$$(E - \varepsilon_{\alpha\beta}) D^{\alpha\beta}(k) = \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} F_{\alpha\beta} + \\ + \frac{1}{N} \sum_l \sum_{mnijs} T^{ij}(k-l) A \left(A^* D_{mn}^{\alpha\beta-}(l, k-l) + A^* D_{mn}^{\alpha+\beta}(l, k-l) \right) \quad (1)$$

Для решения этого уравнения следует решить аналогичное уравнение для функций $D_{mn}^{\alpha\beta-}$ и $D_{mn}^{\alpha+\beta}$, которые будут выражаться через самих себя и через исходные функции Грина, что приведет к замыканию системы уравнений. Удобнее переписать полученное уравнение в матричном виде:

$$\hat{E} \bar{D} = \hat{F} + \hat{M} \bar{D}$$

Где $\hat{E} = (E - \varepsilon_{\alpha\beta}) \delta_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'}$, $\bar{D} = D^{\alpha\beta}(k)$, $\hat{F} = \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} F_{\alpha\beta}$, \hat{M} – решение уравнения (1). По своей структуре такое уравнение является уравнением Дайсона. Решением же будет:

$$\bar{D} = (\hat{E} - \hat{M})^{-1} \hat{F}$$

Из полученного равенства видно, что полюса функции Грина определяются уравнением

$$\det(\hat{E} - \hat{M}) = 0 \quad (2)$$

Уравнение (2) определяет закон дисперсии трехэлектронных взаимодействий. Анализ закона дисперсии позволяет установить, что, как и ожидалось, существует две Хаббардовские зоны: верхняя (УНВ) и нижняя (ЛНВ). Существование двух зон указывает на диэлектрический характер материала. При $n=1$ верхняя зона остается пустой, в то время как нижняя является заполненной. Расстояние же между этими зонами порядка $\Delta = U$.

Кроме того, анализируя закон дисперсии можно установить, что, в отличие от одноэлектронных переходов, для трехэлектронных переходов существует не отдельные кривые дисперсии, а семейства близко лежащих кривых.

Интересные результаты можно получить при анализе плотностей состояний при различных параметрах кулоновского взаимодействия.

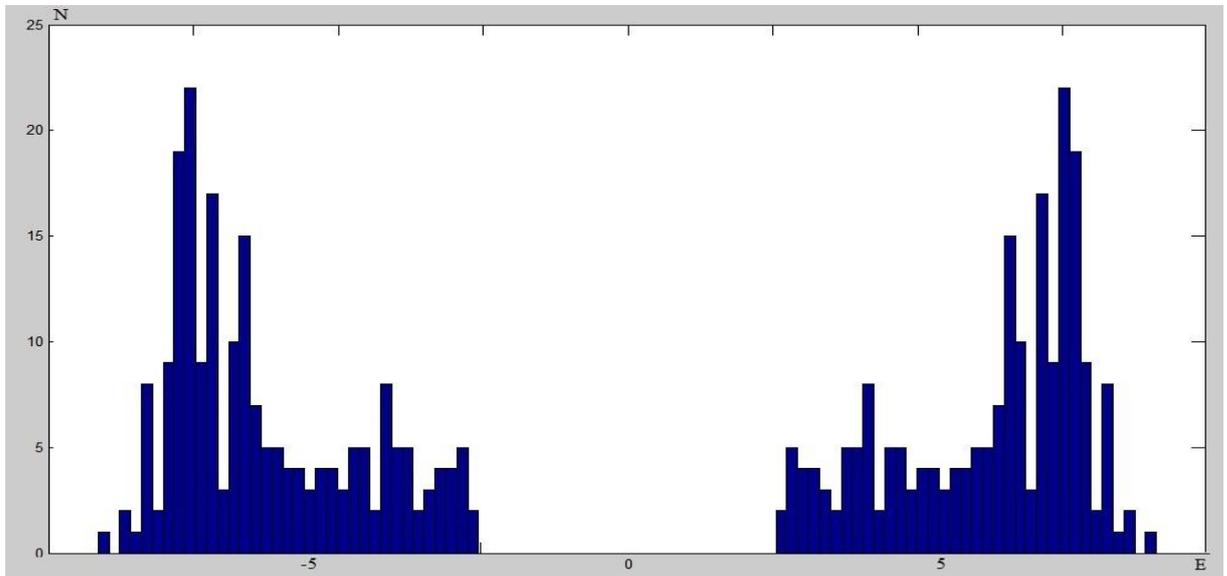


Рисунок 2а. $U=8t$.

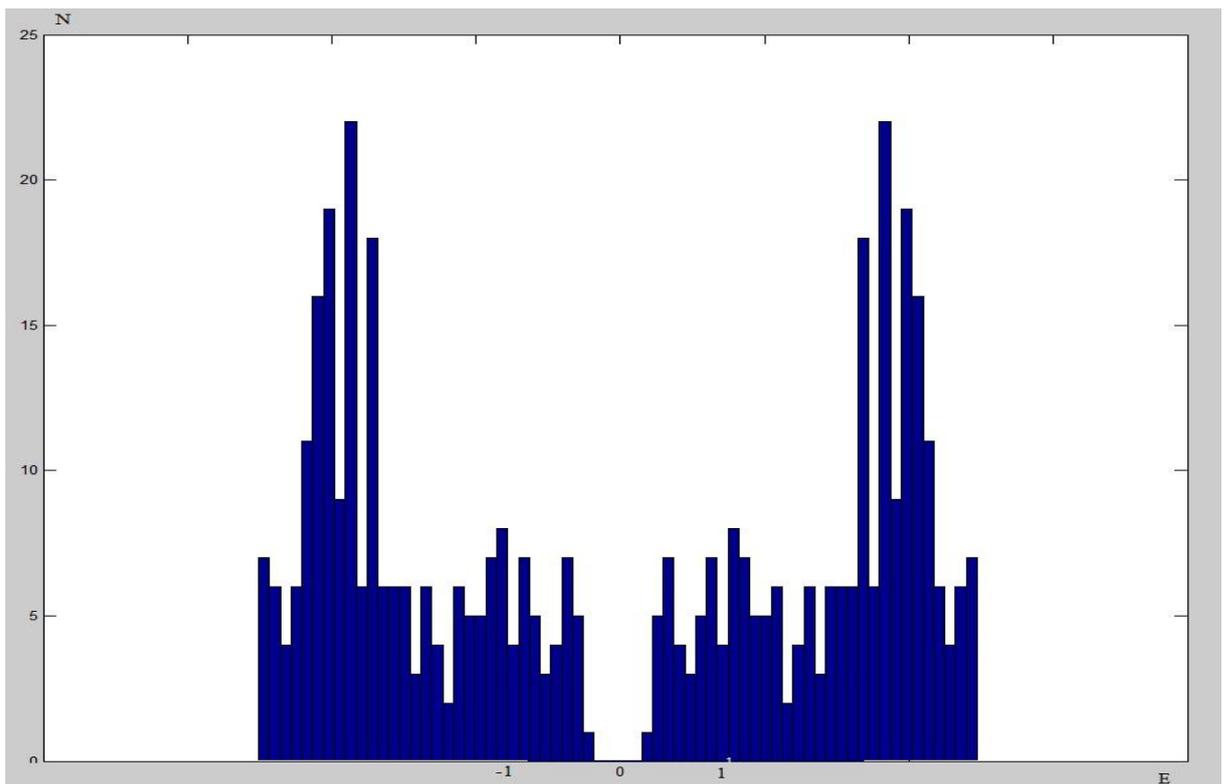


Рисунок 2б. $U=2t$

На рисунках 2а и 2б представлена зависимость плотности состояний от энергии при разных значениях параметра кулоновского взаимодействия U . На обоих рисунках присутствует щель между верхней и нижней Хаббардовской зоной. Расчеты показали, что для случая $T=0$ щель между зонами существует при сколь угодно маленьком параметре кулоновского взаимодействия U .

Подведя итог, можно резюмировать следующее:

- Для трехэлектронных взаимодействий, как и для одноэлектронных, характерным является наличие двух Хаббардовских зон. Причем при $T=0$ зоны не пересекаются при сколь угодно маленьком параметре кулоновского отталкивания U .

- Закон дисперсии представляет собой не отдельные кривые, как это было для одноэлектронного случая, а семейства близко лежащих кривых. Это объясняется тем, что, в отличие от одноэлектронного перехода, где параметрами закона дисперсии является лишь энергия начального и конечного состояния, закон дисперсии трехэлектронного перехода учитывает и все возможные энергии промежуточных состояний.

- Преимущество кластерной теории возмущений по сравнению с обычной в случае трехэлектронного взаимодействия является очевидным: кластерная теория возмущений позволяет перейти от трехцентровых функций Грина к одноцентровым, что значительно облегчает вычисления.

- Дальнейший интерес представляет изучение допированного случая, изучение состояний при $T>0$ а так же оба варианта вместе.