ПОСТРОЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ГАМИЛЬТОНИАНОВ В ТЕОРИИ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Сайко А.П.
Институт физики твердого тела и полупроводников НАН Беларуси
saiko@ifttp.bas-net.by

Введение

Модельные гамильтонианы, описывающие сильновзаимодействующие электроны могут быть в значительной мере упрощены путем сведения их к эффективным гамильтонианам с квантовыми спинами. Такое упрощение достигается ренормировкой исходного гамильтониана при переходе в подпространство с более низкими энергиями квантовых состояний. Например, гамильтониан Хаббарда [1], являющийся парадигматической моделью в теории сильно коррелированных электронных систем, может быть в явном виде преобразован к гамильтониану Гейзенберга. Устранение высокоэнергетических состояний оправдано, так как в обычных лабораторных условиях свойства системы, например электропроводность, намагниченность и т.д., определяются основным состоянием и низкоэнергетическими возбуждениями.

1. От модели Хаббарда к модели t-J на основе принципа усреднения Боголюбова-Крылова

Существует несколько путей преобразования Хаббардовского гамильтониана к спиновому в случае, когда потенциальная энергия (U) значительно превосходит кинетическую (t): 1) теория возмущений (с вырождением) 2-го порядка по $1/U$, 2) метод канонических преобразований. Нами предложен еще один способ, основанный на использовании метода усреднения Боголюбова-Крылова [2], применяемого для решения задач в области нелинейной механики. Метод Боголюбова позволяет эффективно устранять быстроосциллирующие члены в гамильтониане Хаббарда, записанном в представлении взаимодействия, т.е. получать приближенно диагональную форму оператора энергии, выражаемого в конечном счете через спиновые переменные. Данный подход имеет преимущества перед названными выше двумя: нет необходимости, во-первых, знать собственные функции и собственные состояния гамильтониана нулевого приближения (что требуется для применения теории возмущений с вырождением [3]), во-вторых, подбирать конкретный вид унитарного оператора в случае канонического преобразования [1]. Более того, предложенный нами подход позволяет рассмотреть ряд других задач по построению эффективных гамильтонианов в теории сильно коррелированных электронных систем.

Гамильтониан Хаббарда записывается в виде:

$$H = -t \sum_{<ij>,\sigma} (c^{+}_{i\sigma} c_{j\sigma} + э.с.) + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \qquad (1)$$

где $c^{+}_{i\sigma}$ - оператор рождения электрона со спином σ на узле i, U – кулоновская энергия отталкивания двух электронов на узле, t – энергия перехода электрона с узла на соседний узел.

Переходим к «представлению взаимодействия», когда за гамильтониан нулевого приближения выбирается диагональный член в (1), т.е.

$$H = H_0 + V, \qquad (2)$$

где $H_0 = U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$, $V = -t\sum_{<ij>,\sigma}(c^+_{i\sigma}c_{j\sigma} + э.с.)$ (причем $t/U << 1$);

тогда:

$$\widetilde{V}(t) = e^{iH_0 t}Ve^{-iH_0 t}. \qquad (3)$$

Находим сначала

$$\widetilde{c}^{\,+}_{j\sigma}(t) = e^{iH_0 t}c_{j\sigma}e^{-iH_0 t} = c_{j\sigma}(1-n_{j\bar{\sigma}}) + e^{-iUt}c_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}. \qquad (4)$$

Пользуясь (4), получаем:

$$\widetilde{V}(t) = -t\sum_{<ij>,\sigma}c^+_{i\sigma}c_{j\sigma} = -t\sum_{<ij>,\sigma}\Big\{\Big(c^+_{i\sigma}(1-n_{i\bar{\sigma}})c_{j\sigma}(1-n_{j\bar{\sigma}}) + \\ + c^+_{i\sigma}(1-n_{i\bar{\sigma}})c_{j\sigma}n_{i\bar{\sigma}}e^{-iU\tau} + c^+_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}c_{j\sigma}(1-n_{j\bar{\sigma}})e^{-iU\tau}\Big) + э.с.\Big\}. \qquad (5)$$

Далее для построения эффективного гамильтониана удобно воспользоваться методом Боголюбова-Крылова, с помощью которого из (5) устраняются быстроосциллирующие члены вплоть до второго порядка теории возмущений по малому параметру t/U. Эффективный гамильтониан H_{eff} по данному методу строится следующим образом [2]:

$$H_{eff} = \overline{\widetilde{V}(t)} - \frac{i}{2}\overline{\left[\int^{\tau} d\tau'\left(\widetilde{V}(\tau') + \overline{\widetilde{V}(\tau')}\right), \widetilde{V}(\tau)\right]}, \qquad (6)$$

где линия (——) обозначает усреднение по периоду быстрых осцилляций $2\pi/U$, т.е.

$$\overline{\widetilde{A}(t)} = \frac{1}{2\pi/U}\int_0^{2\pi/U}A(\tau)d\tau.$$

Подставляя (5) в (6)и выполняя необходимые коммутирования и простые временные усреднения, получаем:

$$H_{eff} = -t\sum_{i,j,\sigma}(1-n_{i\bar{\sigma}})c^+_{i\sigma}c_{j\sigma}(1-n_{j\bar{\sigma}}) + J\sum_{ij}(\vec{S}_i\vec{S}_j - \frac{1}{4}n_i n_j), \qquad (7)$$

где $J = 2t^2/U$, $n_i = \sum_\sigma n_{i\sigma}$, $\vec{S}_i = \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}c^+_{i\sigma}\tau_{\sigma\sigma'}c_{i\sigma'}$, $\vec{\tau}$ - вектор, составленный из матриц Паули.

Выражение (7) есть ничто иное, как известный гамильтониан так называемой *t-J* модели, который широко используется при изучении сильно коррелированных электронных систем – высокотемпературных сверхпроводников, оксидных манганитов, квантовых точек и т.д.

2. Сведение гамильтониана Андерсона к гамильтониану модели Кондо с помощью усреднения Боголюбова-Крылова.

Описанный в п.1 алгоритм построения эффективных гамильтонианов для сильно взаимодействующих электронных систем применим и при преобразовании гамильтониана модели Андерсона к модели Кондо.

Переход модель Андерсона – модель Кондо обычно осуществляют с помощью преобразования Шриффера-Вольфа [4], т.е. канонического преобразования с антиэрмитовским оператором, форма которого подбирается.

Использование метода усреднения Боголюбова-Крылова [2] и в данном случае имеет несомненные преимущества.

Исходный гамильтониан Андерсона записывается в виде:

$$H = H_0 + V, \tag{8}$$

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon c^+_{d\sigma} c_{d\sigma} + U c^+_{d\uparrow} c_{d\uparrow} c^+_{d\downarrow} c_{d\downarrow}\ , \tag{9}$$

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} (V_{kd} c^+_{k\sigma} c_{d\sigma} + \text{э.с.}), \tag{10}$$

где $c^+_{k\sigma}$ и ε_k - оператор рождения и энергия электрона в зоне проводимости с импульсом k и спином σ, $c^+_{d\sigma}$ и ε - оператор рождения и энергия локализованного электрона примесного атома, U - кулоновская энергия взаимодействия между двумя электронами, оккупирующими примесный атом, V - описывает взаимодействие, смешивающее примесные состояния с зонными, а V_{kd} - константа такого взаимодействия.

Чтобы перейти к представлению взаимодействия $\widetilde{V}(t) = e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t}$, найдем сначала

$\widetilde{c}_{k\sigma}(t) = e^{iH_0 t} c_{k\sigma} e^{-iH_0 t}$ и $\widetilde{c}_{d\sigma}(t) = e^{iH_0 t} c_{d\sigma} e^{-iH_0 t}$:

$$\widetilde{c}_{k\sigma}(t) = c_{k\sigma} e^{-i\varepsilon_k t}, \tag{11}$$

$$\widetilde{c}_{d\sigma}(t) = c_{d\sigma} e^{-i\varepsilon t} + (e^{-iUt} - 1)(n_{d\uparrow} c_{d\downarrow} \delta_{\sigma\downarrow} e^{-i\varepsilon t} + n_{d\downarrow} c_{d\uparrow} \delta_{\sigma\uparrow} e^{-i\varepsilon t}); \tag{12}$$

тогда имеем:

$$\widetilde{V}(t) = \sum_{k,\sigma} \left\{ V_{kd} [e^{i(\varepsilon_k - \varepsilon)t} c^+_{k\sigma} c_{d\sigma} + (e^{i(\varepsilon_k - \varepsilon - U)t} - e^{i(\varepsilon_k - \varepsilon)t}) n_{d\bar{\sigma}} c^+_{k\sigma} c_{d\sigma}] + \text{э.с} \right\}. \tag{13}$$

Пусть все энергии отсчитываются от уровня Ферми, тогда в интересующей нас области температур энергии ε_k (или $\varepsilon_k \to \varepsilon_k - \mu$, где μ - энергия Ферми) малы, ε - отрицательно, причем $U, |\varepsilon| >> \varepsilon_k$.

Усреднение по времени гамильтониана $\widetilde{V}(t)$ даст нуль в первом порядке по возмущению из-за быстрых осцилляций. Во втором порядке усреднение Боголюбова-Крылова приводит к следующему результату:

$$H_{eff} = -\frac{i}{2} \overline{\left[\int^t d\tau \left(\widetilde{V}(\tau) + \overline{\widetilde{V}(\tau)} \right), \widetilde{V}(t) \right]} = -\frac{1}{2} \sum_{k,k',\sigma} J_{k,k'} c^+_{k'\bar{\sigma}} c_{k\sigma} c^+_{d\sigma} c_{d\bar{\sigma}} e^{i(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k)t} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{k,k',\sigma} W^{(+)}_{k,k'} n_{\bar{\sigma}} c^+_{k'\sigma} c_{k\sigma} e^{i(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k)t} + \frac{1}{2} \sum_{k,k',\sigma} W^{(-)}_{k,k'} (1 - n_{\bar{\sigma}}) c^+_{k'\sigma} c_{k\sigma} e^{i(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k)t}\ , \tag{14}$$

где

$$J_{k,k'} = V_{k'd} V^*_{kd} \left(\frac{1}{\varepsilon_{k'} - \varepsilon - U} + \frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon - U} - \frac{1}{\varepsilon_{k'} - \varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon} \right),$$

$$W^{(+)}_{k,k'} = V_{k'd} V^*_{kd} \left(\frac{1}{\varepsilon_{k'} - \varepsilon - U} + \frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon - U} \right), \tag{15}$$

$$W^{(-)}_{k,k'} = V_{k'd} V^*_{kd} \left(\frac{1}{\varepsilon_{k'} - \varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon} \right),$$

$$n_\sigma = c^+_{d\sigma} c_{d\sigma}.$$

Совершая каноническое преобразование

$$H_{eff} \to e^{-i\sum\limits_{k,\sigma}\varepsilon_k c^+_{k\sigma}c_{k\sigma}t} H_{eff} e^{i\sum\limits_{k,\sigma}\varepsilon_k c^+_{k\sigma}c_{k\sigma}t}, \qquad (16)$$

получаем:

$$H'_{eff} = \sum_{k,\sigma}\varepsilon_k c^+_{k\sigma}c_{k\sigma} - \frac{1}{2}\sum_{k,k',\sigma} J_{k,k'} c^+_{k'\bar\sigma}c_{k\sigma}c^+_{d\sigma}c_{d\bar\sigma} +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{k,k',\sigma} W^{(+)}_{k,k'} n_{\bar\sigma} c^+_{k'\sigma}c_{k\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{k,k',\sigma} W^{(-)}_{k,k'}(1-n_{\bar\sigma})c^+_{k'\sigma}c_{k\sigma} \qquad (17).$$

При использовании преобразования Шриффера-Вольфа к гамильтониану (8) в выражении (17) для H'_{eff} появляются дополнительно члены вида [1]

$$H_\delta = -\frac{1}{2}\sum_{k,k'}(K_{k,k'}c^+_{k'\uparrow}c^+_{k'\downarrow}c_{d\uparrow}c_{d\downarrow} + э.с.), \qquad (18)$$

описывающие изменение населенности примесного уровня за счет захвата двух зонных электронов, или же перехода двух электронов с *d*-уровня в зону проводимости. Отметим, что члены вида H_δ (8) при усреднении по Боголюбову-Крылову зануляются и в преобразованном гамильтониане не появляются. Опуская в (17) члены, описывающие потенциальное рассеяние зонных электронов *d*-орбиталями, получаем гамильтониан модели Кондо:

$$H'_{eff} = \sum_{k,\sigma}\varepsilon_k c^+_{k\sigma}c_{k\sigma} - \frac{1}{2}\sum_{k,k',\sigma} J_{k,k'} c^+_{k'\bar\sigma}c_{k\sigma}c^+_{d\sigma}c_{d\bar\sigma}\,. \qquad (19)$$

Таким образом, мы показали, что использование метода усреднения Боголюбова-Крылова является мощным средством при построении эффективных гамильтонианов для сильно коррелированных электронных систем, к которым относятся высокотемпературные сверхпроводники, оксидные магнетики с колоссальным магнитосопротивлением, квантовые точки и другие низкоразмерные системы. Реализация данного метода продемонстрирована на преобразовании гамильтониана Хаббарда к гамильтониану *t-J* модели, гамильтониана Андерсона к гамильтониану модели Кондо. Алгоритм вычислений оказывается достаточно простым и естественным, при этом не требуется знания собственных функций и собственных значений гамильтониана нулевого приближения, а также устраняется необходимость эвристического подбора оператора канонического преобразования, как это делается в рамках других подходов. Данный метод обладает большой степенью общности и может быть применим к решению широкого круга задач физики сильно коррелированных электронных систем.

Список литературы:

[1] Ю.А. Изюмов. УФН **167**, 465 (1997).

[2] Н.Н.Боголюбов, Ю.А. Митропольский. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний.-М.: Наука, 1974. –503 с.

[3] C.L. Cleveland, R. Medina. Amer. J. Phys. **44**, 44 (1976).

[4] J.R. Sehrieffer, P.A. Wolff. Phys. Rev. **149**, 497 (1966).