第37卷 第5期 物 理 学 报 Vol. 37, No. 5
1988 年 5 月 ACTA PHYSICA SINICA May, 1988

扩展 Hubbard 模型的局域方法近似

聂惠权 魏国柱 张开义
(东北工学院物理系)

1987 年 4 月24日收到

提 要

本文把局域方法用于扩展 Hubbard 模型. 在二阶近似下,计算了顺磁相的相关能、局域磁矩和由局域磁矩引起的极化. 结果表明,尽管W不同,极化却总是反铁磁极化. 当 $n=1$, U较大时,相关能随W增加而变大. 对给定的 n 和 U,局域磁矩和反铁磁极化随W增加而变小,然而当 $n=1$, U 较大时或 n 较小时,W对二者影响不明显.

一、引 言

对扩展 Hubbard 模型的研究是凝聚态物理中感兴趣的课题之一. 一些作者用不同方法,例如用函数积分方法[1,2],集团展开方法[3,4],微扰论方法[5]和 Monte-Carlo 方法[6]研究了这个模型的性质. 文献[7,8]用 Bogoliubov 变分方法分别计算了负U情况下的基态相图和有限温度相图. 文献[9]计算了正U情况下的基态相图. 文献[10,11]用高温展开方法研究了一维情况下的热力学性质. Oles 等人考虑到同一格点的电子相关,用局域方法[12,13]计算了 $n=1$ 时的基态相图[14]. 这些研究表明,在某些条件下,最近邻格点电子间的库仑作用W对系统的性质有一定影响.

我们已经用局域方法研究了 Hubbard 模型顺磁相的性质[15]. 本文把这一方法用于扩展 Hubbard 模型,当计及同一格点的电子相关、最近邻格点间的电荷相关和自旋相关后,考察W对系统顺磁相性质的影响.

二、局域方法计算

扩展 Hubbard 模型哈密顿量为

$$H=\sum_{ij\sigma} t_{ij}a_{i\sigma}^{+}a_{j\sigma}+U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}+\frac{W}{2}\sum_{ij\sigma\sigma'}{}' n_{i\sigma}n_{j\sigma'}, \tag{1}$$

其中 $a_{i\sigma}^{+}(a_{i\sigma})$ 为在格点 i,自旋为 σ 的电子产生(湮灭)算符, $n_{i\sigma}=a_{i\sigma}^{+}a_{i\sigma}$ 为电子密度算符, t_{ij} 为跳跃积分, U和W分别表示同一格点电子间和最近邻格点电子间的有效库仑作用. 第三项求和号中的"′"代表对最近邻格点求和.

在局域方法中,相关基态由 H-F 态构造为

$$|\phi_L\rangle=\prod_{ijm}(1-\eta_m O_{ij}^{(m)})|\phi_{\mathrm{HF}}\rangle, \tag{2}$$

脚标 i, j 取遍所有格点，η_m 为变分参数. $O_{ij}^{(m)}$ 的一般形式为

$$O_{ij}^{(m)}=\left.\begin{cases}O^{(1)}=n_{i\uparrow}n_{i\downarrow},\\ O^{(2)}=n_in_j\\ O^{(3)}=\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_j\end{cases}\right\}i\text{ 和 }j\text{ 为最近邻.} \tag{3}$$

$O^{(1)}$ 代表同一格点的电子相关，$O^{(2)}$ 和 $O^{(3)}$ 分别代表最近邻格点间的电荷相关和自旋相关.

平均每个格点的相关基态能量为

$$E_G=\frac{1}{N}\frac{\langle\phi_L|H|\phi_L\rangle}{\langle\phi_L|\phi_L\rangle}=E_{\mathrm{HF}}+E_c. \tag{4}$$

把(2)和(3)式代入，按 η_m 的幂次展开到二阶，得到相关能的表达式为

$$E_c=-\frac{2}{N}\sum_{ijm}\eta_m\langle O_{ij}^{(m)}\tilde{H}\rangle+\frac{1}{N}\sum_{\substack{ij,m\\ i'j',m'}}\eta_m\eta_{m'}\langle O_{ij}^{(m)}\tilde{H}O_{i'j'}^{(m')}\rangle$$

$$+\frac{1}{N}\sum_{\substack{ijm\\ i'j'm'}}{}'\eta_m\eta_{m'}\langle O_{ij}^{(m)}O_{i'j'}^{(m')}\tilde{H}\rangle, \tag{5}$$

其中 $\tilde{H}=H-\langle H\rangle$.

(5)式等号右端第三项，简称$\langle OO\tilde{H}\rangle$项. 在一些文献中，这一项被略去. 在 Hubbard 模型中，我们发现这一项对结果影响较大[15]，因此在本文计算中继续保留这一项.

(5)式中含有三个变分参数 $\eta_m(m=1,2,3)$，由能量极小条件可得到关于 η_m 的方程组，表成矩阵形式为

$$B\eta=A, \tag{6}$$

其中 η 和 A 为 3×1 矩阵，B 为 3×3 对称矩阵. A 和 B 的矩阵元分别为

$$A_m=\langle O^{(m)}\tilde{H}\rangle, \tag{7}$$

$$B_{mm'}=\langle O^{(m)}\tilde{H}O^{(m')}\rangle+\langle O^{(m)}O^{(m')}\tilde{H}\rangle, \tag{8}$$

A_m 和 $B_{mm'}$ 为一些算符乘积对 H-F 基态的期望值. 它们的计算可应用维克定理展开并只保留相连图形[16]. 对于扩展 Hubbard 模型，在简单立方晶格中，用 $R=0$, a 近似，这些图形由图 1 给出.

对于顺磁相，利用平方态密度和紧束缚能带[17]，经过冗长计算后可得到 A_m 和 $B_{mm'}$，其具体表达式在附录中给出.

对局域磁矩和由局域磁矩引起的极化，计算方法与文献[15]相同. 其表达式分别为

$$\langle s_i^2\rangle=\frac{3}{4}\left(n-\frac{n^2}{2}+4\eta^tA'-2\eta^tB'\eta\right) \tag{9}$$

$$P_L=\frac{1}{4}n^2\left(1-\frac{n}{2}\right)^2-2\eta^tA''+\eta^tB''\eta, \tag{10}$$

其中 η^t 为 η 的转置矩阵，η 已由(6)式给出. A' 和 A'' 为 3×1 矩阵，B' 和 B'' 为 3×3 对称矩阵. 它们的矩阵元分别为

$$A'_m=\langle O^{(m)}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}\rangle, \tag{11}$$

$$A''_m=\langle O^{(m)}(n_{1\uparrow}n_{2\downarrow}-n_{1\uparrow}n_{2\uparrow})\rangle \tag{12}$$

$$B'_{mm'}=\langle O^{(m)}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}O^{(m')}\rangle+\langle O^{(m)}O^{(m')}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}\rangle \tag{13}$$

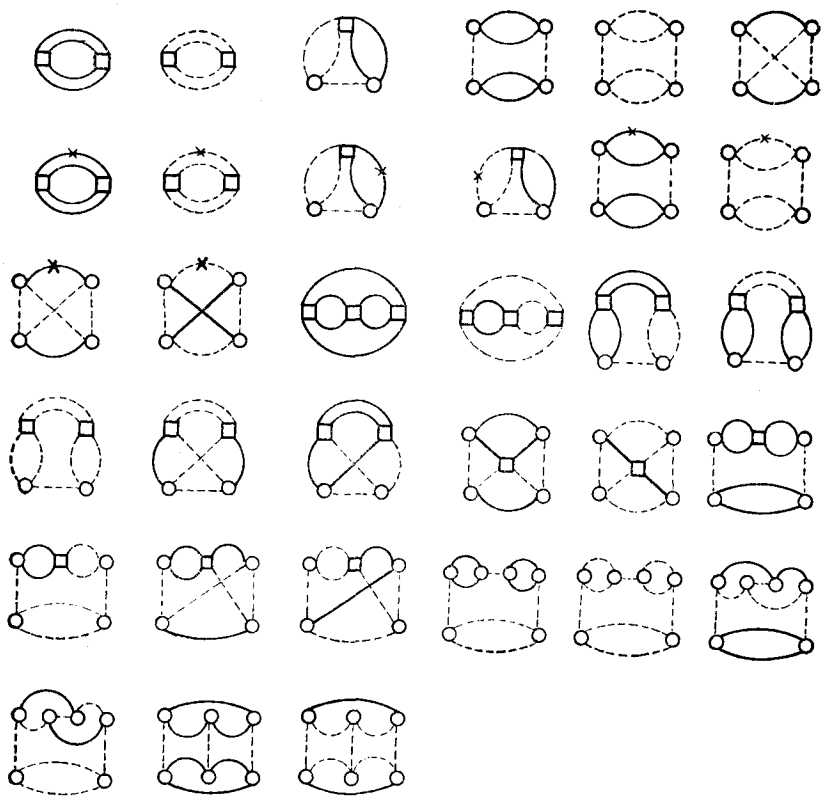


图 1 局域方法计算所需的图形 带 × 的图形来自H中的第 1 项; □ 代表 H 中的第 2 项或 $O^{(1)}$; o…o 代表H中的第 3 项或 $O^{(2)}$, $O^{(3)}$; 实线代表密度矩阵对角元; 虚线代表非对角元

$$B''_{mm'} = \langle O^{(m)}(n_{1\uparrow}n_{2\downarrow} - n_{1\uparrow}n_{2\uparrow})O^{(m')}\rangle + \langle O^{(m)}O^{(m')}(n_{1\uparrow}n_{2\downarrow} - n_{1\uparrow}n_{2\uparrow})\rangle. \tag{14}$$

它们的具体表达式也在附录中给出.

三、数值计算结果与讨论

图 2 到图 7 为数值计算结果,其中能量已经用带宽D约化,即 $\tilde{E}_c = E_c/D$, $\tilde{E}_G = E_G/D$, $\tilde{U} = U/D$, $\tilde{W} = ZW/D$. 在这些图中,曲线 a, b, c 分别代表 $\tilde{W} = 0.0, 0.3, 0.6$ 时的结果.

图 2 为 $n = 1$ 时的 $\tilde{E}_c$-$\tilde{U}$ 曲线. 对于给定的 $\tilde{W}$ 值, $\tilde{E}_c$ 作为 $\tilde{U}$ 的函数,曲线 b 和 c 都有极大值. 在极大值左侧(图中虚线所示), $\tilde{E}_c$ 随 $\tilde{U}$ 单调增加,有形成局域对的趋势,系统可能成为电荷有序或超导态[18,19]. 而极大值的右侧(图中的实线部分)则为通常的顺磁相区域. 可以看出, $\tilde{U}$ 较大时,相关能 $\tilde{E}_c$ 随 $\tilde{W}$ 增加而变大.

图 3 为 $\tilde{U} = 0.6$ 时的相关基态能量 $\tilde{E}_G$-n 曲线. 对给定的 $\tilde{W}$, $\tilde{E}_G$ 有极小值,和极小值对应的电子填充数 n_{min} 随$\tilde{W}$增加而变小. 对给定的n, $\tilde{E}_G$ 随 $\tilde{W}$ 增加而变大.

图 4 为 $n = 1$ 时的 $\langle s_i^2\rangle$-$\tilde{U}$ 曲线. 我们知道局域磁矩的大小和双占据态有关,双占据态越多,局域磁矩越小. 由图 4 中可以看到,对给定的$\tilde{U}$,局域磁矩随 $\tilde{W}$ 增加而变小. 从

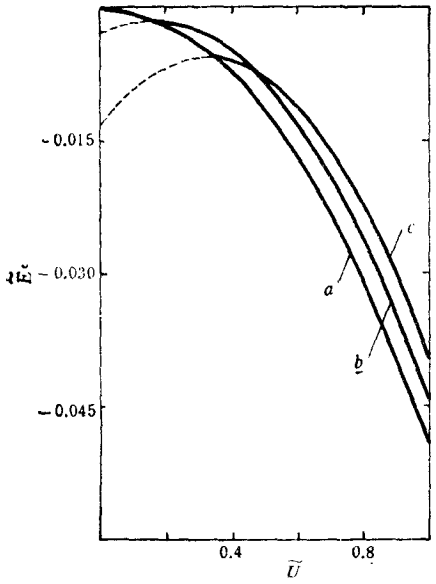


图 2

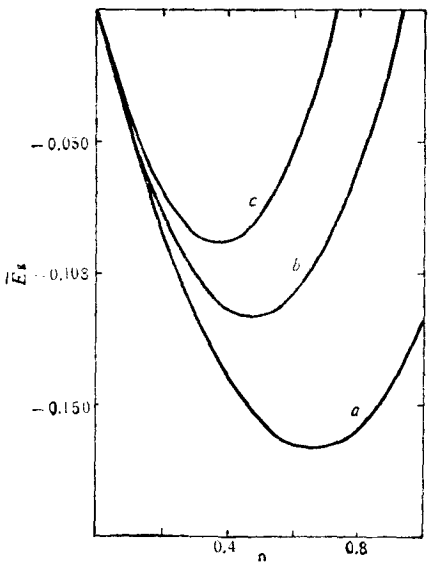


图 3

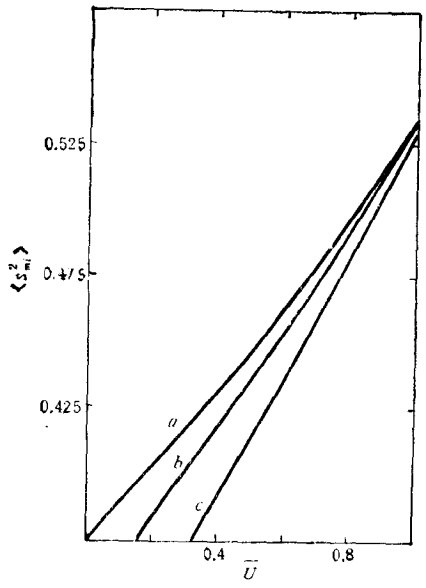


图 4

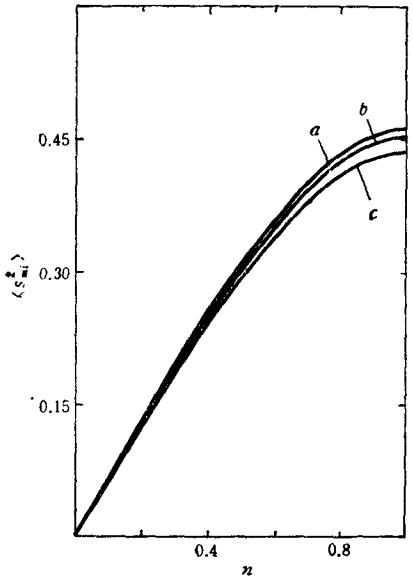


图 5

物理上看这是显然的，$\tilde{W}$ 增加，有助于双占据态的形成，从而使局域磁矩变小．然而当 $\tilde{U}$ 很大时，$\tilde{W}$ 的这种影响变得不显著．从图中容易看到这一点，随 $\tilde{U}$ 增加，三条曲线的差别也随之变小．

图 5 为 $\tilde{U}=0.6$ 时的 $\langle s_i^2\rangle$-n 曲线．可以看到当 n 较小时，三条曲线几乎无法区分．事实上，在 n 较小时，不仅双占据态出现的几率小，而且在一对最近邻格点同时出现电子的几率也小，因而 $\tilde{W}$ 的影响可以略去．随 n 增加，$\tilde{W}$ 对局域磁矩的影响逐渐变得显著．对

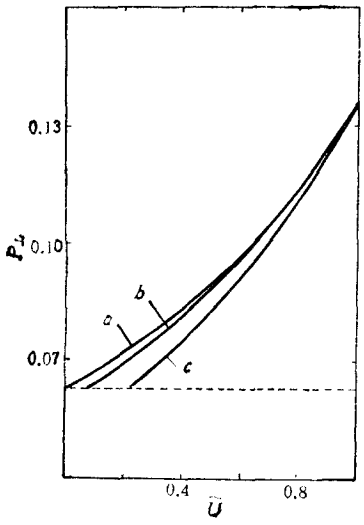


图 6

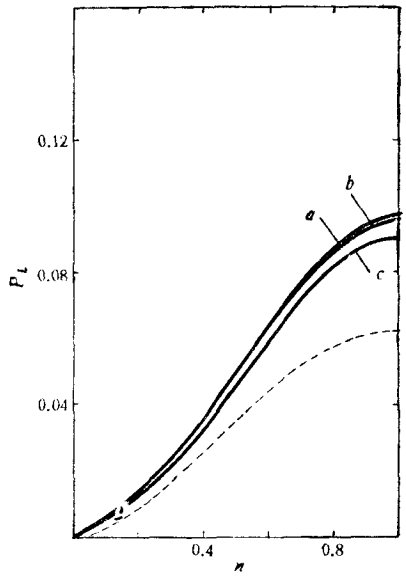


图 7

给定的 n，局域磁矩随 $\tilde{W}$ 增加而变小.

图 6 和图 7 分别为 $n=1$ 时的 P_L-$\tilde{U}$ 曲线和 $\tilde{U}=0.2$ 时的 P_L-n 曲线. 图中的虚线对应于 H-F 近似时的极化 P_{HF}. 如果 $P_L > P_{HF}$，则极化为反铁磁极化，反之为铁磁极化[17]. 从这两个图中可以看到，尽管 $\tilde{W}$ 不同，极化却总是反铁磁极化. 当 $n=1$，$\tilde{U}$ 较大时或 n 较小时，$\tilde{W}$ 对极化程度的影响较小，极化的这种变化规律与局域磁矩的变化规律相一致，这是不难理解的，因为极化是由局域磁矩引起的.

四、结 论

本文把局域方法用于扩展 Hubbard 模型，在保留〈OOH〉项的二阶展开下，计算了顺磁相的相关能、基态能量、局域磁矩和由局域磁矩引起的极化. 对于简单立方晶格，利用平方态密度和紧束缚能带，得到了相应解析表达式.

数值计算结果表明，尽管 $\tilde{W}$ 不同，极化却总是反铁磁极化. 当 $n=1$，$\tilde{U}$ 较大时，相关能随 $\tilde{W}$ 增加而变大. 对给定的 n 和 $\tilde{U}$，局域磁矩和反铁磁极化随 $\tilde{W}$ 增加而变小，然而当 $n=1$，$\tilde{U}$ 较大时或 n 较小时，$\tilde{W}$ 对二者影响不明显. 局域磁矩和反铁磁极化的存在[20]表明，当考虑到同一格点间的电子相关和最近邻格点间的电荷相关及自旋相关后，即使在顺磁相中也存在着磁的短程序，这一结论和文献[18]相一致.

承蒙北京大学物理系尹道乐教授审阅了原稿. 瑞典 Linköping 大学 K. A. Chao 教授对本工作给予了帮助. 谨致谢.

附　录

本文中矩阵元 A_m、A'_m、A''_m、$B_{mm'}$、$B'_{mm'}$ 和 $B''_{mm'}$ 的具体计算方法，可参阅文献 [16, 17]，下面仅给出最后表达式.

$$A_1 = Ua_1^2(1 + 6a_1^2) - 2ZWa_1^2,$$

$$A_2 = -12Ua_1^2 + 2ZWa_1^2(1 + 2a_1 + 2a_1^2),$$

$$A_3 = 9Ua_1^2 - \frac{3}{2}ZWa_1^2(1 - 2a_1),$$

$$B_{11} = Da_1^2(1 + 4a_1) + Ua_1^2(1 - 4a_1 + 30a_1^2 - 120a_1^3) - 4ZWa_1^2(1 - 2a_1 + 6a_1^2 + a_1^3),$$

$$B_{12} = B_{21} = -4Da_1^2(1 + 3a_1) - 24Ua_1^3(1 - 5a_1 + 6a_1^2 + a_1^3) + 8ZWa_1^2(1 + 10a_1 - 2a_1^2),$$

$$B_{13} = B_{31} = 3Da_1^2(1 + 3a_1) + 18Ua_1^3(1 - 5a_1 + 2a_1^2 - a_1^3) + 2ZWa_1^2(1 - 18a_1 + 12a_1^2),$$

$$B_{22} = 12Da_1^2(1 + 3a_1) - 24Ua_1^2(1 - 10a_1 + 4a_1^2) + 4ZWa_1^2(1 - 4a_1 - 4a_1^2 - 64a_1^3 - 16a_1^4),$$

$$B_{23} = B_{32} = -3Da_1^2(3 - 5a_1) + 18Ua_1^2(1 - 6a_1 + 8a_1^2) - ZWa_1^2(3 - 24a_1 - 6a_1^2 + 8a_1^3),$$

$$B_{33} = \frac{3}{4}Da_1^2(9 - a_1) - \frac{9}{2}Ua_1^2(3 - 14a_1 + 28a_1^2) + \frac{3}{4}ZWa_1^2(3 - 20a_1 - 8a_1^2 - 48a_1^3),$$

$$A'_1 = a_1^2(1 + 6a_1),\quad A'_2 = -12a_1^3,\quad A'_3 = 9a_1^2,$$

$$B'_{11} = a_1^2(1 - 4a_1 + 30a_1^2 - 120a_1^3),$$

$$B'_{12} = B'_{21} = -24a_1^3(1 - 5a_1 + 6a_1^2 + a_1^3),$$

$$B'_{13} = B'_{31} = 18a_1^3(1 - 5a_1 + 2a_1^2 - a_1^3),$$

$$B'_{22} = -24a_1^3(1 - 10a_1 + 4a_1^2),$$

$$B'_{23} = B'_{32} = 18a_1^3(1 - 6a_1 + 8a_1^2),$$

$$B'_{33} = -\frac{9}{2}a_1^3(3 - 14a_1 + 28a_1^2),$$

$$A''_1 = -2a_1^3,\quad A''_2 = 2a_1^2(1 - 2a_1),$$

$$A''_3 = -\frac{1}{2}a_1^2(3 - 2a_1 + 2a_1^2),\quad B''_{11} = 4a_1^4(4 - 2a_1 + a_1^2),$$

$$B''_{12} = B''_{21} = -8a_1^3(1 - 4a_1 + 4a_1^2),$$

$$B''_{13} = B''_{31} = 2a_1^3(7 - 8a_1 + 14a_1^2),$$

$$B''_{22} = 4a_1^2(1 - 4a_1 + 12a_1^2 - 8a_1^3),$$

$$B''_{23} = B''_{32} = -a_1^2(3 - 8a_1 + 40a_1^2 - 40a_1^3),$$

$$B''_{33} = \frac{1}{4}a_1^2(9 - 28a_1 + 170a_1^2 - 72a_1^3 + 16a_1^4),$$

其中 $a_1 = \frac{n}{2}\left(1 - \frac{n}{2}\right)$.

参　考　文　献

[1] B. Albani, G. Röpke and Pöpelt, *Phys. Stat. Sol.*, **58b** (1973), 691.

[2] G. Röpke, B. Albani and W. Schiller, *Phys. Stat. Sol*, **69b** (1975), 407.

[3] B. Lorenz, *Phys. Stat. Sol.*, **105b** (1981) 233.

[4] M. Bartkowiak and S. Robaszkiewicz, *Phys. Stat. Sol.*, **109b** (1982), K11.

[5] S. Robaszkiewicz, R. Micnas and K. A. Chao, *Phys. Rev.*, **B23** (1981), 1447.

[6] J. E. Hirsch, R. L. Sugar *et al.*, *Phys. Rev.*, **B26** (1982), 5033.

[7] S. Robaszkiewicz, R. Micnas and K. A. Chao, *Phys. Rev.* **B24** (1981), 4018.

[8] S. Robaszkiewicz, R. Micnas and K. A. Chao, *Phys. Rev*, **B26** (1982), 3915.

[9] Jian Zhong, Kai Yi Zhang *et al.*, *Phys. Stat. Sol.*, **133b** (1986), 143.

[10] 徐慧、张开义，物理学报，**34**(1985)，1422.

[11] 徐慧、张开义，物理学报，**34**(1985)，1435.

[12] G. Stollhoff and P. Fulde, *Z. Phys.*, **B26** (1977), 257.

[13] G. Stollhoff and P. Fulde, *Z. Phys.*, **B29** (1978), 231.

[14] A. M. Oles, R. Micnas *et al.*, *Phys. Lett.*, **102A** (1984), 323.
[15] 魏国柱、聂惠权、张开义，物理学报，**37**(1988),87.
[16] P. Horsch and P. Fulde, *Z. Phys.*, **B36** (1979), 23.
[17] A. M. Oles, *J. Phys.*, C, **15** (1982), 2745.
[18] A. M. Oles *et al.*, *Phys. Lett.*, **102A** (1984), 323.
[19] Guo-zhu Wei *et al.*, to be published.
[20] H. Capellmann and R. E. Prange, *Phys. Rev.*, **B23** (1981), 4709.

LOCAL APPROACH FOR THE EXTENDED HUBBARD MODEL

NIE HUI-QUAN WEI GUO-ZHU ZHANG KAI-YI
(Department of Physics, Northeast University of Technology, Shenyang)

ABSTRACT

In this paper, using the local approach, we calculated the correlation energy, the local moments and the polarisation around the local moments in paramagnetic phase up to second order in the extended Hubbard model. It is shown that the polarisation is always antiferromagnetic for different values of W. The correlation energy increases with W increasing for $n=1$ and large U. The local moments and the antiferromagnetic polarisation decrease with W increasing for fixed n and$U$. While the effect of W on both the local moments and the antiferromagnetic polarisation is not obvious for small n or for large U and $n=1$.