

# Hubbard-Hirsch 模型中的电子相关效应

魏 国 柱

(东北大学物理系, 沈阳 110006)

(1993年11月22日收到)

基于同一格点的电子相关, 把局域方法用于 Hubbard-Hirsch 模型铁磁相. 在二阶计算中使用  $R = 0, a$  近似, 仔细研究了电子相关效应对基态相图的影响. 由于计及了密度矩阵非对角元, 其影响与  $R = 0$  近似相比变弱.

PACC: 7128; 7530; 7530K

## 1 引 言

过渡族金属的铁磁理论一直是凝聚态物理中感兴趣的课题, 问题的复杂性在于 d 电子同时具有巡游和局域的特性. Heisenberg<sup>[1]</sup> 模型强调了 d 电子的局域性. 而 Stoner<sup>[2]</sup> 和 Slater<sup>[3]</sup> 基于 Bloch<sup>[4]</sup> 的工作则强调了 d 电子的巡游性. 1963 年 Hubbard<sup>[5]</sup> 研究了库仑作用引起的电子相关, 提出了 Hubbard 模型, 在这个模型中跳跃积分描述了电子的巡游性, 电子相关则描述了电子的局域性. 在平均场近似下可由单带 Hubbard 模型导出 Stoner 模型, 然而进一步研究表明单带 Hubbard 模型表现出反铁磁性而非铁磁性<sup>[6,7]</sup>.

1989 年 Hirsch<sup>[8]</sup> 指出用第一原理推导 Hubbard 模型时略去的某些矩阵元在金属铁磁性研究中起着重要作用, 当一个电子在成键态, 另一个电子在反成键态, 交换积分  $J$  的贡献是负的. 保留这一项后(称为 Hubbard-Hirsch 模型), 即使在平均场近似下采用常数态密度, 也可得到部分自旋极化, 这是对 Stoner 模型的重要改进.

在 Hirsch 的工作中, 由于略去了电子相关, 在形成铁磁相过程中同一格点相反自旋电子间的库仑能  $U$  的作用被过分夸大. 我们在文献[9]中, 曾用局域方法在  $R = 0$  近似下研究了计及电子相关后基态相图的变化. 本文将继续这一工作, 把计算推广到  $R = 0, a$  近似, 以便更加仔细地考察电子相关效应的影响.

## 2 理论计算

单带 Hubbard-Hirsch 哈密顿量是

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} + \frac{J}{2} \sum_{i\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma'}^{\dagger} c_{i\sigma'} c_{i\sigma}, \quad (1)$$

其中  $t_{ij}$  是跳跃积分,  $c_{i\sigma}^{\dagger} (c_{i\sigma})$  是在格点  $i$ , 自旋为  $\sigma$  的 d 电子产生(湮没)算符,  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$  是电子密度算符,  $U$  是原子内电子间的有效库仑能,  $J$  是最近邻格点电子间库仑作

用的非对角矩阵元。使用格林函数运动方程技术,取平方态密度,不难得到 H-F 基态能是<sup>[9]</sup>

$$E_{\text{H-F}} = -\frac{I_1}{2} + ua_1 + \frac{j}{2} (2a_1 - n^2 + I_1^2), \quad (2)$$

其中

$$I_1 = n - n^2 + 2a_1, \quad (3)$$

$$a_1 = \frac{1}{4} (n^2 - m^2), \quad (4)$$

$$u = \frac{U}{D}, \quad (5)$$

$$j = \frac{ZJ}{D}, \quad (6)$$

$n$  和  $m$  分别是电子密度和铁磁序参量,  $D$  是带宽,  $Z$  是配位数。在下面计算中我们限制在二维正方晶格情形,即取  $Z = 4$ 。

在局域方法中,相关基态由 H-F 态构成,它可表示为

$$|\psi_{\leftarrow}\rangle = \prod_{ijm} (1 - \eta_m O_{ij}^{(m)}) |\phi_{\text{H-F}}\rangle. \quad (7)$$

平均每格点相关基态能量为

$$E_G = \frac{1}{N} \frac{\langle \psi_{\leftarrow} | H | \psi_{\leftarrow} \rangle}{\langle \psi_{\leftarrow} | \psi_{\leftarrow} \rangle} = E_{\text{H-F}} + E_c, \quad (8)$$

其中  $E_c$  是相关能。把(1)和(7)式代入(8)式后按  $\eta_m$  的幂次展开到二阶,有

$$E_c = -\frac{2}{N} \sum_{ijm} \eta_m \langle O_{ij}^{(m)} H \rangle + \frac{1}{N} \sum_{i'j'm'} \eta_m \eta_{m'} \langle O_{ij}^{(m)} H O_{i'j'}^{(m')} \rangle + \frac{1}{N} \sum_{i'j'm'} \eta_m \eta_{m'} \langle O_{ij}^{(m)} O_{i'j'}^{(m')} H \rangle. \quad (9)$$

上式等号右端第三项求和时限制在  $\{i, j, m\} = \{i', j', m'\}$ , 这一项在 Hubbard 模型的局域方法计算中引起的修正是不可忽略的<sup>[10]</sup>。

当只考虑同一格点电子相关,局域算符简化为  $n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$ , 变分参数简化为  $\eta$ , 它由能量极小条件决定。

(9) 式中的矩阵元可用维克定理展开并只需保留相连图形。在  $R = 0$ ,  $a$  近似下, 这些图形如图 1 所示。在这些图形中,实线代表密度矩阵对角元,虚线代表密度矩阵非对角元,当取全由实线组成的图形,则对应  $R = 0$  近似。

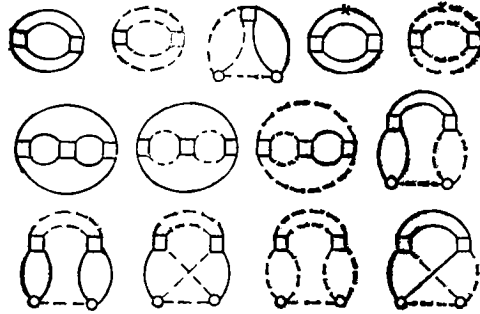


图 1 计算相关能所用到的图形  $\times$  表示  $c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}$ ;  $\square$  表示  $n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$ ;  $\circ \cdots \circ$  表示  $c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}c_{j\sigma}$

对 Hubbard-Hirsch 模型的铁磁相,经过冗长运算后得到

$$\eta = \frac{A}{B}, \quad (10)$$

其中

$$A = u + (4ua_1a_2 - ja_4), \quad (11)$$

$$B = 1 + ua_3 + \left[ \frac{4}{3} I_1 + 24ua_1a_2a_3 + 2j(a_2 - a_1 - 2a_1n + 10a_1a_2 + 2a_1^2 + n^2 + 2a_1a_2a_3^2) \right], \quad (12)$$

$$a_3 = 1 - 2n + 4a_1, \quad (13)$$

$$a_4 = \frac{1}{2} (n^2 + m^2), \quad (14)$$

$$a_5 = a_1 + a_2. \quad (15)$$

在(11)和(12)式等号右端括号中的项来自  $R = a$  近似。相关基态能量

$$E_G = E_{H-F} + a_1a_2(-2\eta A + \eta^2 B), \quad (16)$$

其中能量以带宽  $D$  为单位。不难看出,基态能量和序参量有关,由能量极小  $\partial E_G / \partial m = 0$  条件可得到序参量  $m$  满足的隐式方程为

$$j = \frac{1-u}{1+2I_1} + \frac{1}{1+2I_1} [-\eta(8a_1a_2A - a_5A) + 4\eta^2a_1a_2B], \quad (17)$$

其中

$$A' = \frac{\partial A}{\partial(m^2)}, \quad B' = \frac{\partial B}{\partial(m^2)}. \quad (18)$$

(17)式等号右端第一项是 Hirsch 的平均场近似结果<sup>[8]</sup>,当取  $R = 0$  近似时容易得到<sup>[9]</sup>

$$j = \frac{1-u}{1+2I_1} + \frac{u^2}{1+2I_1} \left[ \frac{a_5}{1+ua_3} - \frac{4ua_1a_2}{(1+ua_3)^2} \right]. \quad (19)$$

(17)式的重要性在于由它可得到基态相图。

### 3 数值计算结果与讨论

方程(17)是很复杂的,其右端仍含有带  $j$  的项,为了得到相边界需对(10)和(17)式联立求解,这是一个自洽计算过程。图 2 和图 3 是数值计算结果,在这两个图中,曲线  $a, b, c$  分别对应  $u = 0.2, 0.4, 0.6$  的情形。为了便于比较,同时示出 H-F 近似和局域方法  $R = 0$  近似的结果,在图中分别用点线和虚线表示,实线则对应  $R = 0, a$  近似的结果。

图 2(a)和(b)分别对应  $m = 0$  和  $m = n$  时的  $j-n$  曲线。由于哈密顿量具有电子-空穴对称性,我们只取  $0 \leq n \leq 1$ 。图 2(a)中的曲线是顺磁相和弱铁磁相的相边界,曲线下方的区域是顺磁相。图 2(b)中的曲线是弱铁磁相和强铁磁相的相边界,曲线上方的区域是强铁磁相。如果把图 2(b)的曲线平移到图 2(a)中,则两条曲线的中间区域是弱铁磁相。从图 2 中可以看到,由局域方法近似给出的曲线总是在 H-F 近似的上方,这表明当考虑电子相关效应后,铁磁相的区域变小。对于给定的  $n, u$  越大,局域方法近似对 H-F

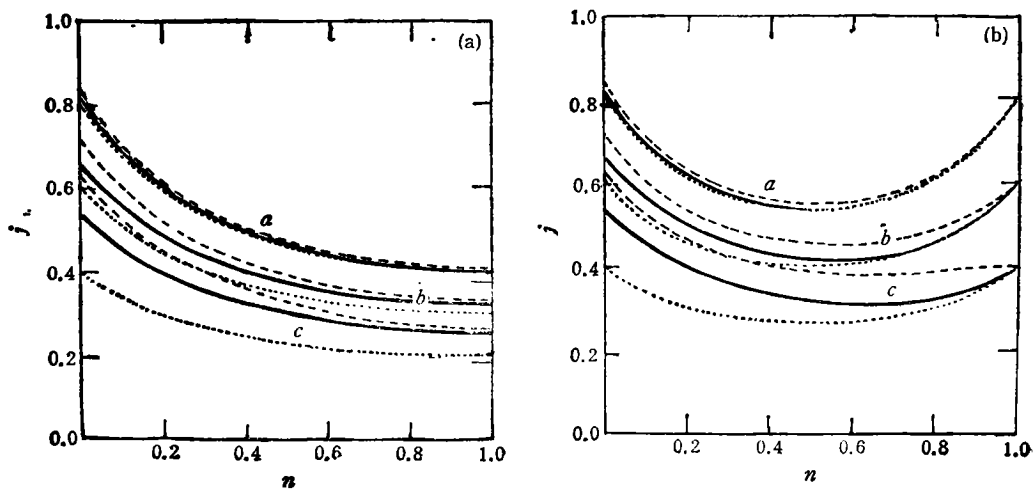


图2 基态相边界 (a) 表示没有自旋极化  $m=0$ ; (b) 表示完全自旋极化  $m=n$

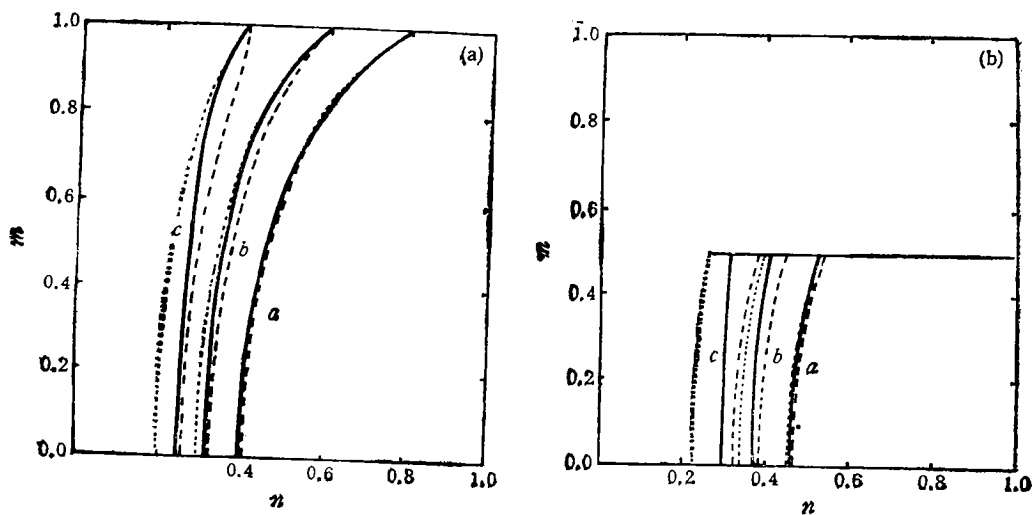


图3 铁磁序参数  $m$  随  $j$  变化曲线 (a) 表示半满带  $n=1.0$ ; (b) 表示四分之一满带  $n=0.5$

近似结果的修正越大。这从物理上易于理解,  $u$  越大, 电子相关效应越强。由图 2 还可看到  $R=0$ ,  $a$  近似给出的曲线在  $R=0$  近似给出的曲线下方, 这说明当考虑到密度矩阵非对角元的贡献后所得到的电子相关效应要弱些。

图 3(a) 和 (b) 分别对应  $n=1.0$  和  $n=0.5$  时的  $m-j$  曲线。曲线的弯曲部分对应于系统中存在着部分自旋极化。由局域方法给出的曲线在 H-F 近似给出的曲线的右方, 这说明考虑电子相关效应后, 开始出现部分自旋极化所需的  $j_c$  值要大些。对于给定的  $n$ ,  $u$  越大,  $j_c$  越小。比较图 3(a) 和 (b), 可以看到对于给定的  $u$ ,  $n$  越小,  $j_c$  越大。与图 2 情况一样, 由  $R=0$ ,  $a$  近似给出的曲线介于由  $R=0$  近似和 H-F 近似给出的曲线之间, 这再次表明在局域方法中计及密度矩阵非对角元贡献后给出的电子相关效应较弱。

## 4 结 论

基于同一格点的电子相关,我们把局域方法用于 Hubbard-Hirsch 模型铁磁相。在二阶计算中使用  $R = 0, a$  近似,进一步仔细研究了电子相关效应对基态相图的影响。由于在  $R = 0, a$  近似中计及了密度矩阵非对角元的贡献,和  $R = 0$  近似相比,给出的电子相关效应变弱,相应地基态相图的相边界介于由 H-F 近似和  $R = 0$  近似给出的相边界之间。对于给定的电子密度  $n$ ,同一格点相反自旋电子间的库仑能  $U$  越大,电子相关效应越强。考虑到电子相关效应后,铁磁区域变小,顺磁区域变大。

- [1] W. Heisenberg, *Z. Phys.*, **49**(1928), 619.
- [2] E. C. Stoner, *Proc. Roy. Soc. London Sec.*, **A165**(1938), 372.
- [3] J. C. Slater, *Phys. Rev.*, **49**(1936), 537.
- [4] F. Bloch, *Z. Phys.*, **57**(1929), 545.
- [5] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. London Sec.*, **A276** (1963), 238.
- [6] J. E. Hirsch, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 4403.
- [7] S. Rudin and D. C. Mattis, *Phys. Lett.*, **110A**(1985), 273.
- [8] J. E. Hirsch, *Phys. Rev.*, **B40** (1989), 2354.
- [9] G. Z. Wei and H. Q. Nie, *Phys. Rev.*, **B45** (1992-11), 8954.
- [10] 魏国柱、聂惠权、张开义, *物理学报*, **37**(1988), 87.

## ELECTRON CORRELATION EFFECT IN THE HUBBARD-HIRSCH MODEL

WEI GUO-ZHU

(Department of Physics, Northeastern University, Shenyang 110006)

(Received 22 November 1993)

### ABSTRACT

Based on the single-site electron correlation, the local approach has been used to investigate the ferromagnetic phase in the Hubbard-Hirsch model. Using the  $R = 0, a$  approximation in second-order calculation, the electron Correlation effect on the phase diagram has been studied Carefully. Comparing with those of the  $R=0$  approximation, the electron correlation effect becomes weaker due to taking into account the nondiagonal elements of density matrix.

**PACC:** 7128; 7530; 7530K