

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

**Ближний порядок
в сильно коррелированных ферми-системах**

Ю.Б. Кудасов

В обзоре обсуждается роль ближнего порядка в сильно коррелированных металлических системах. Эксперименты по магнитному рассеянию нейтронов показывают, что ближний порядок является универсальным свойством таких систем. Рассматриваются различные теоретические методы анализа ближнего порядка. Микроскопические модели, основывающиеся на решениях для бесконечномерных решеток (метод вариационного Монте-Карло, разложение $1/D + 1/D^2$ для пробной волновой функции Гутцвиллера, динамическая теория среднего поля), не могут корректно описать ближний порядок в сильно коррелированных системах. Представлена вариационная теория ближнего порядка в ферми-системах, которая содержит кроме вариационного параметра Гутцвиллера набор новых параметров, описывающих ближние нелокальные корреляции.

PACS numbers: 71.10.Fd, 71.27. + a, 71.28. + d

Содержание

1. Введение (121).
 2. Экспериментальные исследования БП в сильно коррелированных металлических системах методом рассеяния нейтронов (122).
2.1. Магнитное рассеяние нейтронов. 2.2. Соединения переходных 3d-металлов: V_2O_3 и LiV_2O_4 . 2.3. Тяжелые фермионы: $CeCu_6$ и $Ce_{1-x}La_xRu_2Si_2$. 2.4. Высокотемпературные сверхпроводники. 2.5. Почти антиферромагнитный сплав $Cr_{1-x}V_x$. 2.6. Общие тенденции.
 3. Феноменологические теории БП и теории среднего поля (127).
3.1. Теории среднего поля и спин-флуктуационная теория. 3.2. Метод функционального интегрирования. 3.3. Метод Гутцвиллера, $1/D$ разложение и метод вариационного Монте-Карло.
 4. Вариационная теория БП (131).
4.1. Общие свойства пробной волновой функции. 4.2. Электронные корреляции в молекулах и кластерах. 4.3. Основное состояние сильно коррелированных электронных систем на решетке в модели Хаббарда. 4.4. Спектр элементарных возбуждений сильно коррелированной системы. 4.5. Основное состояние решетки Кондо – Хаббарда.
 5. Заключение (142).
- Список литературы (143).

1. Введение

Ближний порядок (БП) в расположении частиц изучается уже довольно давно как в классических системах, например, в теории жидкости, так и в квантовых, например в модели Изинга [1]. В последние десятилетия интерес к этой проблеме усилился в связи с интенсивными исследованиями сильно коррелированных ферми-систем в конденсированных средах. Сильные электронные корреляции приводят к различным физическим явлениям: к фазовым переходам металл – изолятор [2], состояниям с тяжелыми фермионами [3], высокотемпературной сверхпроводимости [4] и т.д. При всем разнообразии сильно коррелированных ферми-систем динамический БП является одним из универсальных свойств, изучение которого необходимо для понимания природы сильно коррелированного состояния. В последние двадцать лет был достигнут значительный прогресс в экспериментальных исследованиях ближних нелокальных корреляций электронов в конденсированных средах методом магнитного рассеяния нейтронов [5, 6], который дает возможность детального изучения структуры БП.

Цель данного обзора состоит в анализе роли БП в формировании сильно коррелированного состояния. Под ближним антиферромагнитным (АФМ) порядком мы будем подразумевать сильные АФМ корреляции, охватывающие одну или несколько элементарных ячеек, т.е. небольшое количество ближайших соседей. В металлических системах БП носит динамический характер в отличие от статического БП, например в спиновых стеклах. Состояние, в котором сильные АФМ корреляции охватывают значительно большие, но, тем не менее, все еще микроскопические расстояния, например, $\sim 10 - 100$ элементарных ячеек, будем называть фрустрированным антиферромагнетиком. В отличие от сильного БП,

Ю.Б. Кудасов. Российский федеральный ядерный центр —
Всероссийский научно-исследовательский
институт экспериментальной физики
607188 г. Саров, Нижегородская обл., просп. Мира 37,
Российская Федерация
Тел. (83130) 455-84
Факс (83130) 453-84
E-mail: kudasov@ntc.vniief.ru

Статья поступила 17 июля 2002 г.

во фрустрированном антиферромагнетике важную роль играет топология решетки и скейлинг, что порождает специфические методы исследования (см., например, [7]), которые мы в данной работе затрагивать не будем.

Основные аспекты сильно коррелированных ферми-систем можно изучать на примере модели Хаббарда (см. обзоры [4, 8–12]). Имеется несколько общих аналитических подходов к ее исследованию. Модель Хаббарда имеет точное решение [13] и развитые аналитические методы для одномерной (1D) цепочки [14, 17]. Тщательно исследован другой предел — бесконечномерная решетка ($D = \infty$), где практически точное решение для основного состояния $D = \infty$ дает вариационный метод Гутцвиллера [15]. В пределе $D = \infty$ нелокальные корреляции между фермионами могут быть заменены средним полем, и только внутриузельные корреляции остаются динамическими [16, 18]. На этом факте основана динамическая теория среднего поля [12]. Решения на решетках промежуточной размерности, например, на представляющих большой практический интерес 2D и 3D решетках, оказываются более сложными [19–22] в первую очередь из-за развития нелокальных корреляций.

Ближний порядок в твердых телах возникает также за счет взаимодействия электронов проводимости и локализованных электронных состояний [3]. Особый интерес здесь представляют периодические решетки локализованных электронов — концентрированные кондо-системы (кондо-решетки). В них обнаружены квазичастичные (когерентные) состояния — тяжелые фермионы, характеризующиеся огромной эффективной массой порядка 10^2 – 10^3 масс свободного электрона. Практически во всех системах с тяжелыми фермионами обнаружен БП.

В разделе 2 настоящего обзора на основе анализа экспериментальных данных выявлены общие особенности БП в различных сильно коррелированных системах. В разделе 3 кратко обсуждаются феноменологические теории и теории среднего поля сильных нелокальных корреляций. Раздел 4 посвящен подробному изложению вариационной теории БП в молекулах и кристаллических веществах. В заключении сформулированы основные выводы.

2. Экспериментальные исследования БП в сильно коррелированных металлических системах методом рассеяния нейтронов

2.1. Магнитное рассеяние нейтронов

Спиновые флуктуации в целом и БП в частности оказывают влияние на кинетические и термодинамические свойства веществ: проводимость, теплоемкость, статическую магнитную восприимчивость и др. [23]. Однако интегральные характеристики не позволяют выяснить однозначно структуру БП, т.е. определить корреляционную длину, спектр магнитных возбуждений и т.д.

Дипольное взаимодействие нейтронов с магнитными моментами в твердых телах приводит к их магнитному рассеянию. Энергия и волновой вектор тепловых и холодных нейтронов хорошо согласуются с характерными энергиями и длинами волн магнитных возбуждений в твердых телах, поэтому рассеяние нейтронов является одним из основных методов исследования магнитного порядка, в том числе и ближнего. Этот

метод дает возможность прямого зондирования спиновых флуктуаций и представляет собой мощный инструмент для изучения структуры БП в сильно коррелированных системах.

Сечение магнитного рассеяния нейтрона при передаче импульса $\hbar\mathbf{q} = \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ и энергии $\hbar\omega$ может быть выражено как [5]

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} \left(\frac{\gamma r_0}{2} \right)^2 [f(\mathbf{q})]^2 \exp[-2W(\mathbf{q})] \times \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - \tilde{q}_\alpha \tilde{q}_\beta) N S^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega), \quad (1)$$

где $f(\mathbf{q})$ — магнитный форм-фактор, $\exp[-2W(\mathbf{q})]$ — фактор Дебая–Валлера, $\tilde{q}_\alpha$ — единичный вектор в направлении $\mathbf{q}$, α и β — индексы, обозначающие декартовы координаты вектора, N — число магнитных ионов, $\gamma r_0/2 = 7,265 \times 10^{-2}$ б μ_B^{-2} в единицах, принятых в работе [5]. Динамический структурный фактор имеет вид [5]

$$S^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{g\mu_B}{2\pi\hbar N} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \int dt \exp\{i[\omega t - \mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')]\} \times \langle S_{\mathbf{R}}^\alpha(t) S_{\mathbf{R}'}^\beta(0) \rangle, \quad (2)$$

где g — фактор Ланде, $S_{\mathbf{R}}^\alpha(t)$ — проекция спина иона с радиус-вектором $\mathbf{R}$ в момент времени t , $\langle \dots \rangle$ — термическое усреднение. Множитель $\delta_{\alpha\beta} - \tilde{q}_\alpha \tilde{q}_\beta$ отражает тот факт, что нейтроны зондируют проекцию спина, перпендикулярную переданному импульсу. В случае, когда анизотропией можно пренебречь, его заменяют множителем 2. Из выражения (2) видно, что вся информация о спиновых корреляциях содержится в динамическом структурном факторе. Флуктуационно-диссипативная теорема связывает его с мнимой частью динамической спиновой магнитной восприимчивости [5]:

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi''(\mathbf{q}, \omega)}{\pi[1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T)]}. \quad (3)$$

Вещественную часть магнитной восприимчивости находят, применяя соотношение Крамерса – Кронига:

$$\chi'(\mathbf{q}, \omega) - \chi'(\mathbf{q}, \infty) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi''(\mathbf{q}, \omega')}{\omega' - \omega}. \quad (4)$$

Часто используется еще одна характеристика рассеяния нейтронов — интенсивность $I(\mathbf{q}, \omega) = 2(\gamma r_0/2)^2 [f(\mathbf{q})]^2 \times S(\mathbf{q}, \omega) \exp[-2W(\mathbf{q})]$. Здесь она приведена также в единицах, использованных в работе [5].

В работе [6] была предложена методика разделения динамической магнитной восприимчивости на две составляющие, протекающие из локальных спиновых корреляций (электроны на одном ионе) и нелокальных корреляций (электроны на разных узлах решетки). В первом случае корреляционная функция $\langle S_1(R) S_2(R') \rangle$ является дельта-функцией в координатном пространстве, поэтому в импульсном представлении фурье-образ корреляционной функции не зависит от волнового вектора. Таким образом, процедура анализа экспериментальных результатов сводится к следующему. Сначала из интенсивности рассеяния нейтронов устраняется фоновая интенсивность, затем выделяются постоянная составляющая и $\mathbf{q}$ -зависящая часть интенсивности рассеяния. Соответственно возникают два слагаемых в

динамической магнитной восприимчивости. В простейшем случае их можно описать как [5, 24]

$$\chi''_{SS}(\omega) = \chi_{SS} \frac{\omega \Gamma_{SS}}{\omega^2 + \Gamma_{SS}^2}, \quad (5)$$

$$\chi''_{IS}(\omega) = \frac{\chi_{IS}}{1 + (q/\kappa)^2} \frac{\omega \Gamma_{IS}(\mathbf{q}, \omega)}{\omega^2 + \Gamma_{IS}^2(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (6)$$

где SS(IS) — индексы локального (site–site) и нелокального (intersite) вкладов в динамическую восприимчивость, κ — обратная корреляционная длина. Формулы (5) и (6) отражают гипотезу о том, что распад корреляций во времени и координатном пространстве происходит по экспоненциальному закону. Поэтому они являются достаточно общими — выражения для динамической спиновой восприимчивости в приближении случайных фаз и спин-флуктуационной теории (СФТ) принимают вид (5) и (6) [23].

2.2. Соединения переходных 3d-металлов:

V_2O_3 и LiV_2O_4

Полуторная окись ванадия (V_2O_3), родственные твердые растворы с полуторными окисями хрома и титана, а также композиции с избытком и недостатком кислорода являются одним из базовых семейств, на которых длительное время исследуются кулоновские корреляции и мотт-халлардовские фазовые переходы [2]. Эти соединения обладают сложной фазовой диаграммой. Области парамагнитного (ПМ) изолятора, АФМ изолятора и ПМ металла разделены фазовыми переходами первого рода [2, 25, 26].

На примере металлической фазы V_2O_3 впервые было показано, что сильные корреляции приводят к сужению квазичастичной зоны [27]. Отсюда возникают основные атрибуты сильно коррелированного металлического состояния: сильное возрастание линейного члена электронной теплоемкости (γT) и статической магнитной восприимчивости [27]. В последнее десятилетие многие аспекты сильно коррелированного состояния в полуторной окиси ванадия были в значительной степени пересмотрены. Недавно было выяснено, что вблизи $T = 0$ К в металлической фазе существует состояние с несоизмеримой волной спиновой плотности (ВСП) [28]. Было также показано, что два 3d электрона иона V^{3+} находятся в основном на двукратно вырожденных орбиталях e_g в состоянии $S = 1$ (вместо предполагавшегося ранее состояния $S = 1/2$) [29]. Таким образом, электронная подсистема V_2O_3 может быть описана в рамках двукратно вырожденной модели Хаббарда.

В работах [5, 30] было выполнено тщательное исследование основного состояния и спиновых корреляций в металлической ПМ фазе и в фазах ПМ и АФМ изоляторов монокристаллического V_2O_3 . На рисунке 1 показана интенсивность рассеяния нейтронов в металлической ПМ фазе V_2O_3 при температуре чуть выше перехода АФМ–ПМ ($T = 200$ К). Видны два широких пика в направлениях $(1\ 0\ 0)$ и $(1\ 0\ 2,1)$ (в базе гексагональной ячейки, содержащей 6 формульных единиц V_2O_3), которые связаны с близкими корреляциями электронов. Эти направления совпадают с направлениями ВСП в $V_{2-y}O_3$ при $T = 0$ К. Пики $(1\ 0\ 0)$ и $(1\ 0\ 2,1)$ исчезают при переходе в АФМ фазу при $T < 170$ К, как видно на рис. 1. Введение избыточного кислорода в полуторную окись ванадия позволяет стабилизировать металлическую фазу вплоть

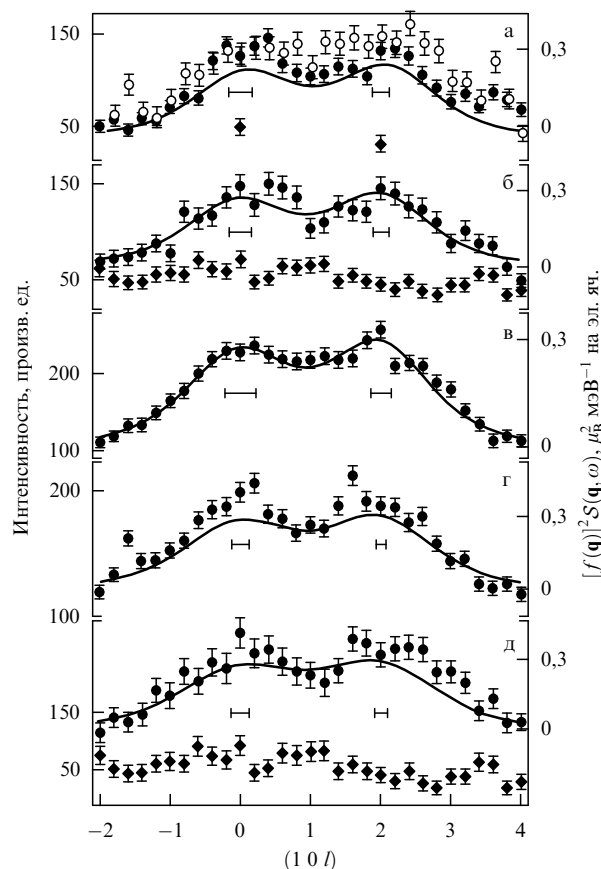


Рис. 1. Интенсивность рассеяния нейтронов вдоль направления $(1\ 0\ l)$ при различных значениях переданной энергии: (а) $\hbar\omega = 6$ мэВ, (б) $\hbar\omega = 9$ мэВ, (в) $\hbar\omega = 12$ мэВ, (г) $\hbar\omega = 18$ мэВ и (д) $\hbar\omega = 25$ мэВ. Темные кружки — V_2O_3 в ПМ фазе при $T = 200$ К, темные ромбы — V_2O_3 в АФМ фазе при $T = 160$ К, светлые кружки — $V_{1.973}Cr_{0.027}O_3$ в ПМ фазе при $T = 200$ К (из работы [5]).

до 0 К, поэтому на нестехиометрических составах можно исследовать температурную зависимость высоты пика и его полуширины. Результаты этих измерений при температурах выше ВСП-упорядочения представлены на рис. 2. В работе [5] они обсуждались в рамках гипотезы о скейлинге в СФТ при приближении к ВСП-фазе. Здесь хотелось бы обратить внимание на следующее обстоятельство. Если мы оценим характерную длину корреляций κ^{-1} из рис. 2, то получим значения от 6 до 2 Å. Вряд ли возможно серьезно говорить о скейлинге для корреляционной длины на расстояниях порядка и меньших межатомного. Для корректного описания здесь необходима микроскопическая теория БП.

Для анализа влияния стехиометрии на БП было выполнено сравнение интенсивностей рассеяния нейтронов в V_2O_3 и $V_{2-y}O_3$ (при $y = 0,027$). Второй состав довольно сильно нестехиометричен, потому что уже при $y \approx 0,015$ полностью подавляется АФМ фаза. Тем не менее интенсивности рассеяния на магнитных флуктуациях в обоих составах практически совпадали, т.е. БП оказался слабо чувствительным к стехиометрии и легированию полуторной окисью хрома. Другой особенностью, выявленной в работе [5], была универсальность зависимости профиля пика динамической магнитной восприимчивости от энергии в нормированных единицах. Причем абсолютные значения энергии, при которых

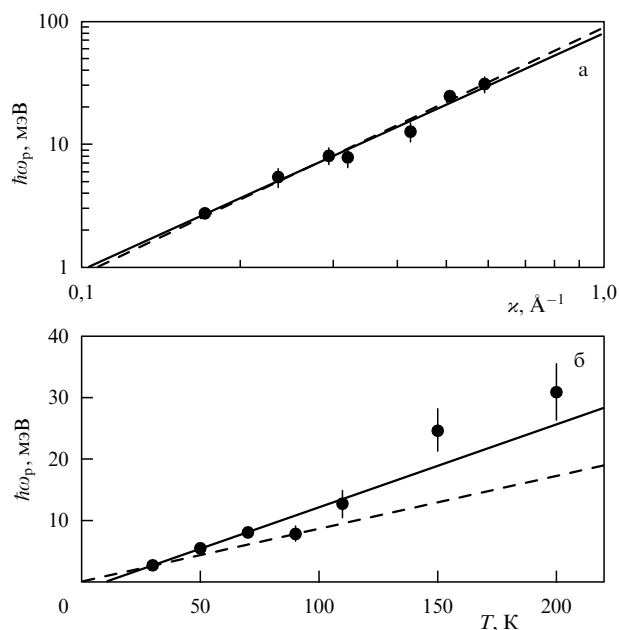


Рис. 2. Зависимость энергии пика мнимой части динамической спиновой восприимчивости $V_{1,973}O_3$ в ПМ фазе от обратной корреляционной длины ξ и температуры [5]. (а) Сплошная линия — наилучшее приближение для зависимости энергии пика $\hbar\omega_p \propto \xi^z$, где $z = 1,9$, штриховая линия — то же для $z = 2$. (б) Сплошная линия — наилучшее приближение для линейной зависимости энергии пика от температуры, которая примерно соответствует тепловой энергии $k_B T$ (штриховая линия).

достигался максимум, и абсолютные значения максимумов динамической восприимчивости различались очень сильно. Сильные ближние корреляции наблюдались также в фазе ПМ изолятора $((V_{1,972}Sr_{0,028})_2O_3$ при $T = 205$ К). В целом они были сходны с теми, которые наблюдались в металлической ПМ фазе. На рисунке 3 показана энергетическая зависимость мнимой части маг-

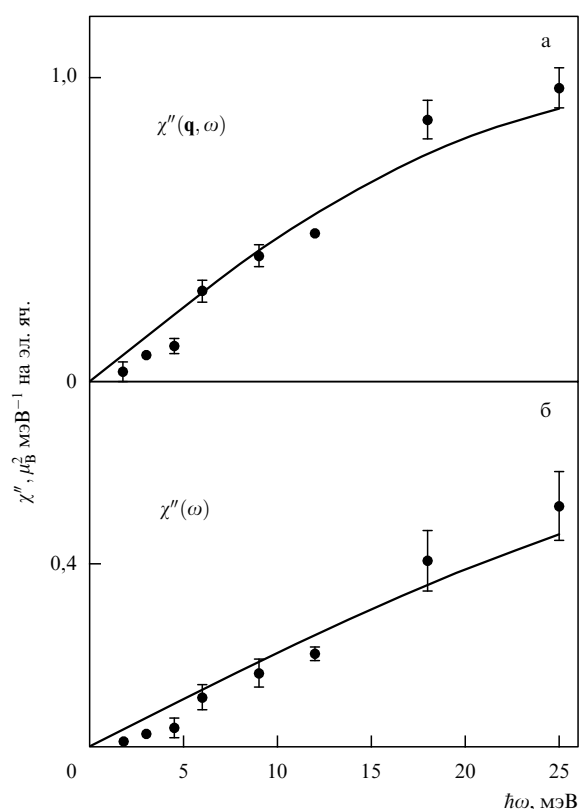


Рис. 3. Мнимая часть динамической спиновой восприимчивости V_2O_3 при $T = 200$ К: $\mathbf{q} = (1\ 0\ 2,1)$ (а) и не зависящая от $\mathbf{q}$ (локальная) составляющая (б) [5].

нитной восприимчивости χ'' в металлической ПМ фазе для волнового вектора $\mathbf{q} = (1\ 0\ 2,1)$ и χ'' , усредненной по $\mathbf{q}$ (см. формулу (5)). Такое разделение позволяет оценить параметры локальных и нелокальных корреляций (табл. 1).

Таблица 1. Магнитные возбуждения и БП в сильно коррелированных соединениях (γ — постоянная Зоммерфельда, $\mathbf{q}$ и ω_0 — волновой вектор и энергия возбуждения, ξ — корреляционная длина, $\Gamma_{SS(IS)}$ — скорость релаксации внутри- (меж-) узельных магнитных возбуждений)

Состав	γ , мДж моль $^{-1}$ К $^{-2}$	$\mathbf{q}$	ξ , Å	ω_0 , мэВ	Γ_{SS} , мэВ	Γ_{IS} , мэВ
V_2O_3	40 [2]	(1 0 0)	≈ 2 ($T = 200$ К) [5]*	≈ 35 ($T = 200$ К) [5]*	> 35 ($T = 200$ К) [5]*	≈ 15 мэВ ($T = 200$ К) [5]*
LiV_2O_4	430 [32]	$0,64\ \text{\AA}^{-1}$	6 ($T = 1,4$ К) [36]	1 ($T = 1,4$ К) [36]		$1,42$ ($T = 1,4$ К) [36]
$CeCu_6$	≈ 1500 [37]	(0 0 1) (0,85 0 0)	$\xi_a = 9 \pm 1$ $\xi_c = 3,5 \pm 0,5$ ($T = 0$ К) [6]	$0,3$ ($T = 0$ К) [6]	$0,4$ ($T = 0$ К) [6]	$0,2$ ($T = 0$ К) [6]
$CeRu_2Si_2$	350 [24]	(0,31 0,31 0)	$12,5$ (3а)** ($T = 1,5$ К) [24]	$1,2$ ($T = 1,5$ К) [24]	2 ($T = 1,5$ К) [24]	$0,75$ ($T = 1,5$ К) [24]
$Ce_{1-x}La_xRu_2Si_2$	600 [24]	(0,31 0,31 0)	19 (4,5а)** ($T = 1,5$ К) [24]	$0,2$ ($T = 1,5$ К) [24]	$1,4$ ($T = 1,5$ К) [24]	$0,2$ ($T = 1,5$ К) [24]

* Оценено автором.

** В скобках приведено значение в единицах параметра решетки.

Среди соединений переходных 3d-металлов LiV_2O_4 обладает наибольшим значением константы Зоммерфельда $\gamma = 430 \text{ мДж моль}^{-1} \text{ К}^{-2}$ [31–33], которое ставит электронную систему LiV_2O_4 в один ряд с соединениями с тяжелыми фермионами. Со времени открытия сильно коррелированного состояния в этом веществе были проведены обширные теоретические и экспериментальные исследования [32]. Существует несколько точек зрения на его природу. Согласно первой из них, LiV_2O_4 представляет собой кондо-решетку без f-ионов. Полузаполненное синглетное состояние a_{1g} предполагается локализованным, а e_g -дублет образует зону проводимости [34]. Согласно другой точке зрения, основную роль играет структурная фрустрация магнитного упорядочения, которая предотвращает развитие дальнего АФМ порядка [32]. Можно пойти даже дальше и предположить, что сама фрустрация является источником сильно коррелированного состояния [35].

Исследование рассеяния нейтронов в поликристаллических образцах LiV_2O_4 были выполнены в работе [36]. При температурах ниже 30 К на зависимости динамической восприимчивости от q появляется пик при $q = 0,64 \text{ \AA}^{-1}$ (или $0,84 a^*$ в единицах параметра обратной решетки), который связан с развитием БП. Заметим, что по результатам измерения проводимости и магнитной восприимчивости эта температура соответствует появлению сильно коррелированного состояния. Полуширина и амплитуда пика сильно зависят от температуры. При этом зависимость полуширины пика оказывается практически линейной по температуре.

Недавно было выдвинуто предположение о том, что кристаллическая структура LiV_2O_4 в виде тетраэдров с общими вершинами ведет к нарушению зарядового упорядочения и к образованию специфических структур (кольца, цепочки спина 1 и $1/2$ конечной длины) [35]. В этом случае БП в LiV_2O_4 должен отличаться от обычных АФМ корреляций. В частности, ожидаемое пиковое значение динамической восприимчивости должно находиться при $q = \sqrt{2}a^*$, что не соответствует значению, наблюдаемому в эксперименте [36]. Таким образом, в LiV_2O_4 , по-видимому, наблюдается обычный ближний АФМ порядок.

2.3. Тяжелые фермионы: CeCu_6 и $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{Ru}_2\text{Si}_2$

Соединение CeCu_6 , с одной стороны, обладает одним из самых высоких значений константы Зоммерфельда ($\gamma \approx 1500 \text{ мДж моль}^{-1} \text{ К}^{-2}$ [37]) среди металлических систем, оставаясь немагнитным вплоть до очень низких температур (указания на АФМ порядок обнаружены лишь при $T \leq 2 \text{ мК}$ [38]), а с другой, оно является одним из наиболее тщательно изученных веществ с тяжелыми фермионами. К настоящему времени выполнены подробные исследования БП в CeCu_6 , его зависимости от температуры, легирования и магнитного поля [6, 39]. Рассеяние нейтронов исследовалось вдоль кристаллографических направлений $(1\ 0\ 0)$ и $(0\ 0\ 1)$. Было установлено, что магнитные корреляции в CeCu_6 сильно анизотропны. При $T \rightarrow 0 \text{ К}$ корреляционные длины составляют $\xi_a = (9 \pm 1) \text{ \AA}$ и $\xi_c = (3,5 \pm 0,5) \text{ \AA}$. Таким образом, вдоль направления **a** БП охватывает вторых ближайших соседей, а вдоль **c** — только первых ближайших соседей. Также был обнаружен существенно анизотропный пик на несоизмеримом волновом векторе, что говорит о конкуренции магнитных взаимодействий вдоль оси **a**. На рисунке 4а приведены зависимости анизотропной корреляционной длины от температуры. Хорошо видно развитие БП при низких температурах. Следует отметить, что его возникновение совпадает с появлением тяжелых фермионов (по данным термодинамических и магнитных измерений [40]). Были также оценены скорости релаксации спиновых возбуждений: $\Gamma_{SS} = 0,4 \text{ мэВ}$, $\Gamma_{IS} = 0,2 \text{ мэВ}$ при $T \rightarrow 0 \text{ К}$. При повышении температуры скорости релаксации быстро растут: при $T = 3 \text{ К}$ они достигают $\Gamma_{SS} = \Gamma_{IS} = 0,6 \text{ мэВ}$ (рис. 4б). В целом сходное поведение демонстрируют и другие соединения с тяжелыми фермионами: UPt_3 [40, 41–43], CeRu_2Si_2 [6, 44], U_2Zn_{17} [45] и т.д.

В работах [39, 40] были представлены результаты измерения рассеяния нейтронов на спиновых флуктуациях в сильных магнитных полях в CeCu_6 . Магнитное поле подавляет БП, причем ослабление БП и в этом случае согласуется с исчезновением тяжелых фермионов в магнитном поле, которое определялось по измерениям электронной теплоемкости [40]. Зависимости линейного члена в теплоемкости C/T и магнитной

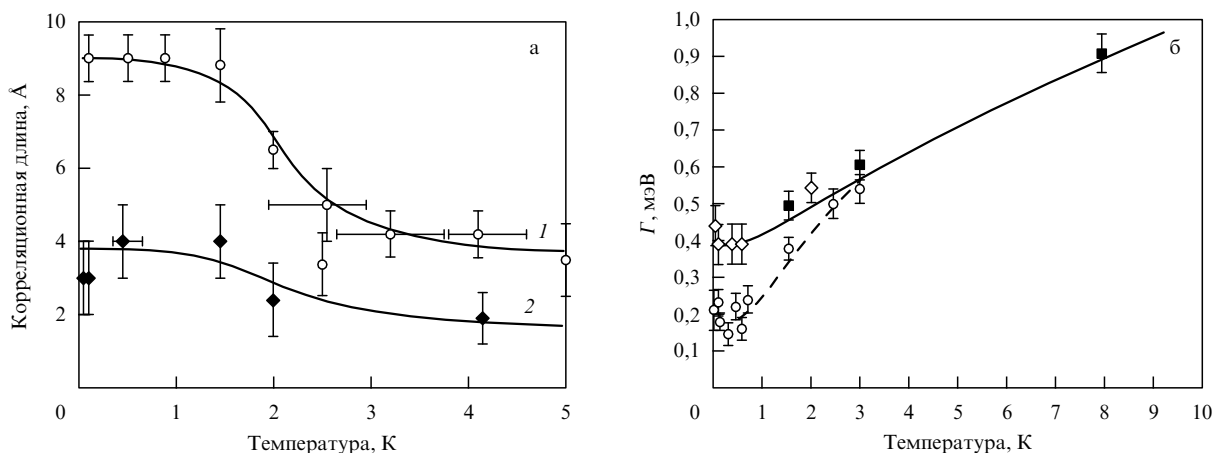


Рис. 4. Ближний порядок в CeCu_6 (по работе [6]). (а) Анизотропная корреляционная длина. Светлые кружки и линия 1 — корреляции вдоль оси **a**, темные ромбы и линия 2 — вдоль оси **c**. (б) Скорость распада внутриузельных Γ_{SS} (светлые ромбы, сплошная линия) и межузельных Γ_{IS} корреляций (светлые кружки, штриховая линия). Темные квадраты — результаты времяпролетных экспериментов [46].

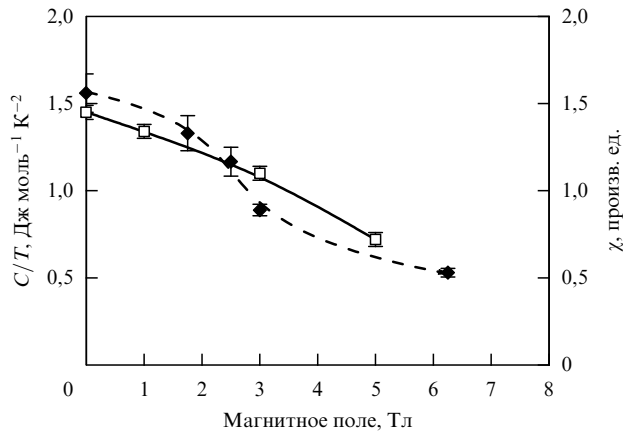


Рис. 5. Ближний порядок в CeCu_6 в магнитном поле: минимальная часть статической магнитной восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, 0)$ при $\mathbf{q} = (1,4\,0\,0)$ [39, 40] (темные ромбы) и теплоемкость C/T [40] (светлые квадраты).

восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, 0)$ от магнитного поля показаны на рис. 5.

В соединениях с тяжелыми фермионами происходит конкуренция двух процессов. С одной стороны, взаимодействие локализованных состояний с электронами проводимости ведет к образованию кондо-синглетов, в результате чего происходит "экранирование" примесей и переход в немагнитное состояние. С другой стороны, взаимодействие локализованных состояний через электроны проводимости — взаимодействие Рудермана–Киттеля–Касуи–Иосиды (РККИ) стремится перевести систему в магнитное упорядоченное состояние. Таким образом, многие системы с тяжелыми фермионами (CeCu_6 и CeRu_2Si_2 и т.д.), хотя и являются немагнитными, но находятся вблизи фазового перехода в АФМ состояние на диаграмме Дониаха [47]. В этом случае фазовый переход в упорядоченную АФМ фазу может быть стимулирован внешним давлением или введением примесей. Например, в соединении $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{Ru}_2\text{Si}_2$ критической концентрацией, при которой появляется дальний АФМ порядок, является $x = 0,075$. Для анализа критического поведения спиновых корреляций вблизи точки перехода в работах [24, 48] была исследована зависимость спектров рассеяния нейтронов в $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{Ru}_2\text{Si}_2$ от концентрации лантана. Оказалось, что даже для критического состава корреляционная длина составляет всего несколько (2–4) размеров элементарной ячейки. Аналогичные результаты по критическому поведению спиновых корреляций были получены при замещении в CeCu_6 атомов меди золотом [49].

2.4. Высокотемпературные сверхпроводники

Высокотемпературные сверхпроводники с двумерными плоскостями CuO_2 обладают сильными и довольно необычными ближними АФМ корреляциями, которые оказывают значительное влияние на свойства этих веществ [4, 8, 10]. Магнитные взаимодействия дырок (электронов) в плоскостях CuO_2 рассматриваются как один из возможных механизмов возникновения высокотемпературной сверхпроводимости [4, 10]. Кроме того, предполагается, что АФМ флуктуации являются причиной псевдощелевого поведения высокотемпературных сверхпроводников в нормальной фазе [50]. Этим объяс-

няются обширные исследования магнитных возбуждений и корреляций, выполненные на этих веществах. Детальное обсуждение данного вопроса можно найти, например в обзорах [4, 10, 50–52]. Результаты, полученные на различных веществах ($\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ и др.), имеют ярко выраженные общие закономерности. Допирование исходного АФМ изолятора дырками (электронами) приводит к разрушению АФМ порядка и переходу в металлическое состояние. Однако, когда число подвижных носителей заряда невелико (недодопированный режим), в металлической фазе существуют сильные АФМ корреляции с большой корреляционной длиной [51]. При переходе в металлическую фазу пик в интенсивности рассеяния на АФМ волновом векторе (π, π) исчезает или ослабляется. В то же время появляются пики на несоизмеримых волновых векторах $(\pi, \pi) + \delta(\pi, 0)$ и $(\pi, \pi) + \delta(0, \pi)$, где δ — параметр несоизмеримости [51], которые обусловлены ближним порядком. Интересно отметить, что зависимость δ от концентрации x легирующей примеси для соединений на основе La_2CuO_4 для различных легирующих примесей примерно повторяет зависимость критической температуры сверхпроводящего перехода от легирования [51]. По мере увеличения концентрации длина магнитных корреляций быстро падает, например, в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ примерно как $x^{-1/2}$ [52]. При оптимальном допировании, т.е. когда критическая температура сверхпроводящего перехода максимальна, корреляционная длина охватывает порядка 2–3 элементарных ячеек [51]. Следует также отметить, что в сверхпроводящем состоянии в спектре спиновых флуктуаций $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ и $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+x}$ возникает острый пик, который полностью исчезает в нормальном состоянии [53, 54]. Это явление указывает на тесную связь высокотемпературной сверхпроводимости в купратах со спиновыми флуктуациями и ближним АФМ порядком.

2.5. Почти антиферромагнитный сплав $\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x$

Из примеров, приведенных выше, видно, что сильно коррелированное состояние сопровождается появлением низкоэнергетических спиновых флуктуаций, трактуемых как следствие БП. Увеличение константы Зоммерфельда γ и статической (динамической) магнитной восприимчивости в сильно коррелированных соединениях объясняется сужением квазичастичной зоны, что должно сопровождаться уменьшением энергии спиновых возбуждений и скорости их релаксации. Эта зависимость действительно видна из данных, приведенных в табл. 1.

С другой стороны, можно поставить обратный вопрос: является ли возникновение низкоэнергетических спиновых возбуждений в электронной системе достаточным условием существования сильно коррелированного состояния? В общем случае ответ на этот вопрос будет отрицательным. В качестве примера рассмотрим обычный АФМ металл, в котором нет сильной перенормировки эффективной массы, например, хром. Введением примеси ванадия можно добиться подавления дальнего АФМ порядка. Критическим является состав $\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x$, где $x = 0,035$. При приближении к критическому значению x со стороны ПМ фазы в сплаве развиваются спиновые корреляции, но при этом сильно коррелированное состояние не возникает. Тем не менее в работе [55] были обнаружены низкоэнергетические спиновые

возбуждения в $\text{Cr}_{0,95}\text{V}_{0,05}$ в ПМ фазе. Перенормировка динамической магнитной восприимчивости, которая была оценена из сравнения экспериментальных результатов с зонными расчетами, достигала 28. Однако, в отличие от других сильно коррелированных систем сильно перенормированные низкоэнергетические возбуждения в $\text{Cr}_{0,95}\text{V}_{0,05}$ существуют только в узком диапазоне $\mathbf{q}$ вблизи шести точек зоны Бриллюэна: $(1 \pm \delta \ 0 \ 0)$, $(1 \pm \delta \ 0)$, $(1 \ 0 \pm \delta)$. Дальнейшие измерения при больших значениях переданной энергии показали, что в действительности спиновые возбуждения существуют в широком диапазоне энергии (как минимум, до 400 мэВ) вблизи направления $(1 \ 0 \ 0)$ [56]. Это привело авторов работы [56] к мысли о том, что критерием возникновения сильно коррелированного состояния может служить время релаксации Γ^{-1} , усредненное по зоне Бриллюэна, Γ_{av}^{-1} . Из простого представления о спиновых возбуждениях как о наборе осцилляторов следует, что [56]

$$\gamma = \frac{\pi k_B}{\hbar} \frac{1}{\Gamma_{\text{av}}} = \frac{\pi k_B}{\hbar} \left\langle \frac{1}{\Gamma_{\text{IS}}(\mathbf{q})} \right\rangle_{\text{BZ}}, \quad (7)$$

где $\langle \dots \rangle_{\text{BZ}}$ обозначает усреднение по зоне Бриллюэна. В случае $\text{Cr}_{0,95}\text{V}_{0,05}$ низкоэнергетические возбуждения охватывают очень малую часть зоны Бриллюэна и поэтому не могут существенно повлиять на константу Зоммерфельда. На рисунке 6 показана зависимость (7) и положение различных веществ с сильными корреляциями на плоскости $\gamma - \Gamma_{\text{av}}$.

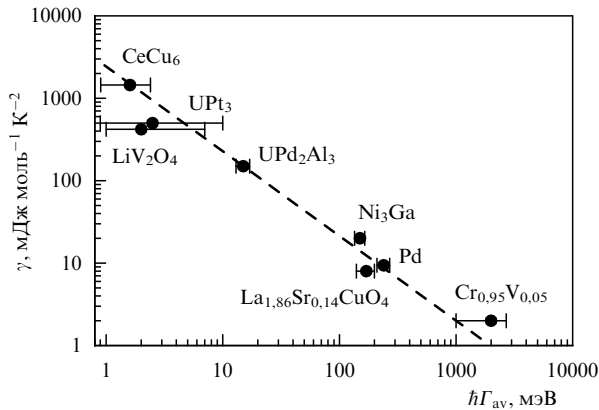


Рис. 6. Константа Зоммерфельда как функция усредненного обратного времени релаксации, Γ_{av} (по работе [56]; Γ_{av} для LiV_2O_4 оценено автором по данным работы [36]).

2.6. Общие тенденции

Параметры, характеризующие БП, для некоторых сильно коррелированных веществ сведены в табл. 1. Приведенные выше экспериментальные результаты позволяют сделать несколько общих выводов.

а) Энергия спиновых возбуждений, связанных с БП, и скорость их релаксации уменьшаются с увеличением эффективной массы подвижных носителей заряда. Это хорошо согласуется с представлениями о сужении квази-частичной зоны.

б) Сильные ближние корреляции нельзя трактовать как квазичастичные возбуждения, так как скорость их релаксации сравнима с энергией возбуждения и они

локализованы в координатном пространстве в пределах нескольких элементарных ячеек. Иначе говоря, энергия и импульс этих возбуждений не являются "хорошими" квантовыми числами.

в) Развитие сильно коррелированного состояния практически всегда сопровождается возникновением БП. Подавление сильно коррелированного состояния при повышении температуры, наложении внешнего магнитного поля, введении примесей и т.д. ведет к исчезновению БП, что указывает на тесную связь этих двух явлений. Последнее утверждение представляется наиболее важным, поскольку оно показывает, что для объяснения природы сильно коррелированного состояния необходимо выйти за рамки теоретических моделей $D = \infty$, где БП принципиально отсутствует.

г) Высокотемпературные сверхпроводники составляют особую группу. В них при умеренной перенормировке эффективной массы длина АФМ корреляций в металлической фазе аномально велика, даже несмотря на квазидвумерный характер магнитных взаимодействий.

3. Феноменологические теории БП и теории среднего поля

3.1. Теории среднего поля и спин-флуктуационная теория

Анализ спиновых флуктуаций в коррелированных системах удобно начать с рассмотрения модели Хаббарда. В случае одиночной невырожденной зоны ее можно сформулировать в виде следующего гамильтониана:

$$H = \sum_{ij,\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (8)$$

где $a_{i\sigma}^{\dagger}$ ($a_{i\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) фермиона спина $\sigma = \uparrow, \downarrow$ на i -м узле решетки, $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma}$. В приближении статического среднего поля спектр элементарных магнитных возбуждений ($a_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}$) определяется выражением $\varepsilon_{\mathbf{k},\mathbf{q}} = 2\Delta + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$, где слагаемое 2Δ связано с обменным расщеплением зоны. Динамическая (спиновая) восприимчивость, соответствующая этому спектру, имеет вид [23, 57]

$$\chi_{\Delta 0}^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \Delta) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \Delta)}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + 2\Delta - \omega}, \quad (9)$$

где $f(\varepsilon)$ — функция распределения Ферми.

Следующим шагом является включение флуктуаций среднего поля по времени. Такое приближение называют динамическим приближением среднего поля, или приближением случайных фаз (ПСФ). Оно приводит к важному результату — усилению динамической восприимчивости за счет спиновых флуктуаций [23, 57]:

$$\chi_{\text{RPA}}^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_{\Delta 0}^{+-}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - I \chi_{\Delta 0}^{+-}(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (10)$$

где $I = U/L$, L — число узлов решетки.

Недостатком ПСФ является отсутствие обратного влияния сильно перенормированного спектра спиновых возбуждений на термодинамический потенциал. Этот недостаток проявляется особенно сильно при ненулевых

температурах. Для его устранения была разработана теория самосогласованной перенормировки спиновых флуктуаций [23]. Для самосогласованного описания можно исходить из формально точного соотношения для свободной энергии системы взаимодействующих фермионов. Для гамильтониана достаточно общего вида $H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} + H_1(I)$, где I — параметр взаимодействия, свободную энергию можно записать как [23]

$$F(M, T) = F_{\text{HF}}(M, T) + \Delta F(M, T), \quad (11)$$

$$\Delta F(M, T) = -T \sum_m \sum_{\mathbf{q}} \int_0^I d\lambda [\chi_{M\lambda}^{+-}(\mathbf{q}, i\omega_m) - \chi_{M0}^{+-}(\mathbf{q}, i\omega_m)],$$

где M и T — соответственно магнитный момент системы и температура, $\omega_m = 2\pi mT$ — мацубаровские частоты, m — целое число, $\chi_{M\lambda}^{+-}$ — динамическая восприимчивость при фиксированном M и при значении $I = \lambda$.

Выражение (11) позволяет выйти за рамки приближения случайных фаз. Различные подходы используются для анализа (11) в случаях слабого ферромагнетизма (длинноволновое приближение), почти ферромагнитного металла и т.д. [23]. Теория самосогласованной спиновой перенормировки позволяет согласованно описать многие характеристики среды, на которые влияют спиновые флуктуации: теплоемкость, тепловое расширение, электропроводность, динамическую восприимчивость и др., исходя из небольшого набора параметров. Общий вид динамической восприимчивости остается тем же, что и для ПСФ (10). В рамках теории самосогласованной спиновой перенормировки были получены полезные формулы для анализа результатов неупругого рассеяния нейтронов на спиновых флуктуациях [48]:

$$\Gamma_{\text{IS}} = 2\pi T_0 y, \quad (12)$$

$$\frac{\xi}{a} = 0,27 y^{-1/2}, \quad (13)$$

где T_0 — характеристическая энергия спиновых возбуждений, y — обратная магнитная статическая спиновая восприимчивость на волновом векторе АФМ упорядочения, a — размер элементарной ячейки. Заметим, что, например, вклад магнитных флуктуаций в теплоемкость описывается при низких температурах тем же набором параметров [48]:

$$\frac{C_m}{T} \propto \frac{1 - (1/2) \pi \sqrt{y}}{T_0}. \quad (14)$$

Из выражений (12) и (13) видны особенности, наблюдаемые в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов (см. раздел 2): обменное усиление динамической восприимчивости ведет к уменьшению энергии спиновых флуктуаций и увеличению корреляционной длины. Кроме того, видно, что вследствие зависимости (13) корреляционная длина остается не очень большой даже при сильной перенормировке динамической восприимчивости.

Результаты теории самосогласованной спиновой перенормировки были применены к анализу спиновых флуктуаций в соединениях с тяжелыми фермионами в работах [24, 48]. Было показано, что формула (13) дает хорошее согласие с экспериментом. Скорость распада спиновых нелокальных флуктуаций Γ_{IS} в рамках этой

теории оказалась завышенной примерно в 3 раза, что в работе [48] было связано с сильной анизотропией. В целом спин-флуктуационная теория дает хорошую основу для анализа экспериментальных данных. Кроме того, она показывает, что межузельные спиновые возбуждения вносят значительный вклад в низкотемпературные термодинамические характеристики вещества. Таким образом, микроскопическая теория сильно коррелированного состояния ферми-систем должна включать динамический БП.

Для описания БП в соединениях с тяжелыми фермионами (металлов и изоляторов) разработан ряд микроскопических методов [57–59]. Из микроскопических уравнений можно получить уравнения среднего поля, которые учитывают БП [60–62]. Для описания кондорешетки был использован следующий гамильтониан:

$$H = E_0 \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}^1 + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma}^c - J_K \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i^1 \mathbf{S}_j^1 - J_H \sum_i \mathbf{S}_i^1 \mathbf{S}_i^c, \quad (15)$$

где индексы 1 и с относятся соответственно к локализованным состояниям и к зоне проводимости. Оба обменных взаимодействия считаются антиферромагнитными: $J_K < 0$, $J_H < 0$.

Уравнения среднего поля парамагнитной фазы получаются путем введения двух параметров, которые отвечают формированию кондо-синглетов $\lambda = \langle 1/2(f_i^+ a_i + \text{h.c.}) \rangle$, где f_i^+ — оператор рождения локализованного электрона, и корреляциям между ближайшими локализованными соседями $\tau = \langle f_{i\sigma}^+ f_{j\sigma} \rangle'$, где штрих обозначает суммирование по ближайшим соседям. Тогда энергию системы можно представить как функцию этих параметров [61]:

$$E = 2 \sum_{\mathbf{k}} [\varepsilon_{\mathbf{k}}^+ f(\varepsilon_{\mathbf{k}}^+) + \varepsilon_{\mathbf{k}}^- f(\varepsilon_{\mathbf{k}}^-)] - z J_H \tau^2 - 2 J_K \lambda^2, \quad (16)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\pm}$ — две подзоны, появляющиеся в результате гибридизации электронов проводимости и локализованных состояний, z — число ближайших соседей. Основное состояние получается путем минимизации энергии по параметрам λ и τ . В этом варианте теории среднего поля возникают три различных состояния, которые определяются двумя критическими температурами, T_K и T_C . При высокой температуре система находится в парамагнитном состоянии $\lambda = 0$ и $\tau = 0$, при низкой температуре ($T < T_K$) и не очень большом значении J_H в системе $\tau \neq 0$ и формируются кондо-синглеты, $\lambda \neq 0$, и, наконец, при температуре выше T_K , но ниже T_C возникает состояние, в котором кондо-синглеты отсутствуют, $\lambda = 0$, но имеется БП между локализованными состояниями, $\tau \neq 0$. Полученные результаты качественно согласуются с численными расчетами методом квантового Монте-Карло [63]. Заметим, что в данной процедуре полностью отсутствует связь между перенормировкой квазичастичной зоны и ближним порядком [62].

3.2. Метод функционального интегрирования

В работе [64] был предложен метод анализа сильно коррелированных систем с использованием техники функционального интегрирования. Исходное пространство состояний гамильтониана (8) расширяется путем введения вспомогательных бозонов, которые описываются операторами рождения (уничтожения) e_i^+ (e_i),

$p_{\sigma i}^+(p_{i\sigma})$ и $d_i^+(d_i)$. Операторы e_i , $p_{i\sigma}$ и d_i действуют как операторы проектирования на пустое, однократно заполненное и двукратно заполненное состояния узла i , соответственно. В терминах вспомогательных бозонов гамильтониан (8) переписывается как [64]

$$\tilde{H} = \sum_{ij,\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} z_{i\sigma}^+ z_{i\sigma} + U \sum_i d_i^+ d_i, \quad (17)$$

где

$$z_{i\sigma} = (1 - d_i^+ d_i - p_{i\sigma}^+ p_{i\sigma})^{-1/2} (e_i^+ p_{i\sigma} + p_{i,-\sigma}^+ e_i) \times \\ \times (1 - e_i^+ e_i - p_{i,-\sigma}^+ p_{i,-\sigma})^{-1/2}.$$

Чтобы устранить нефизические состояния, необходимо дополнить модель (17) уравнениями связи:

$$a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} = p_{i\sigma}^+ p_{i\sigma} + d_i^+ d_i, \\ \sum_{\sigma} p_{i\sigma}^+ p_{i\sigma} + e_i^+ e_i + d_i^+ d_i = 1. \quad (18)$$

Эффективное действие, соответствующее гамильтониану (17), содержит множители Лагранжа (не зависящие от времени), которые обеспечивают выполнение условий (18). В приближении парамагнитной седловой точки можно вычислить свободную энергию системы (17). Было показано, что такое приближение соответствует приближению Гутцвиллера [15] (см. также раздел 3.3), т.е. корреляции между ближайшими соседями полностью отсутствуют. Для учета нелокальных корреляций в работе [65] в рассматриваемую схему были введены два бозе-поля $\tilde{m}$ и $\tilde{\xi}$. Флуктуирующие во времени локальная намагниченность и внутреннее магнитное поле определялись через эти поля как $m_i = \pm \tilde{m}$ и $\xi_i = \pm \tilde{\xi}$, где знак зависит от индекса i . Далее, используя парамагнитную седловую точку в качестве нулевого приближения, авторы [65] выполнили разложение в ряд по теории возмущений. Затем было вычислено новое решение типа седловой точки, но теперь уже по всем бозе-полям, включая $\tilde{m}$ и $\tilde{\xi}$. На рисунке 7 показаны результаты расчета фазовой диаграммы модели Хаббарда на квадратной решетке для трех фаз: парамагнитной [64], парамагнит-

ной с БП [65] и антиферромагнитной. Видно, что при больших значениях U/t в системе развивается ближний порядок; парамагнитная фаза с БП охватывает значительную часть фазовой диаграммы. Хотя при точно половинном заполнении это состояние маскируется дальним АФМ порядком, оно обладает более низкой энергией, чем парамагнитная фаза. Следует заметить, что отсутствие в парамагнитной фазе магнитных корреляций некорректно для конечномерных решеток. Даже при $U = 0$ между фермионами одного спина имеются нелокальные корреляции вследствие принципа Паули типа обменной дырки. При появлении кулоновского взаимодействия происходит их усиление. Поэтому фазовый переход первого рода парамагнитная фаза – парамагнитная фаза с БП, который был получен в работе [65], может быть следствием этого методического недостатка.

3.3. Метод Гутцвиллера, $1/D$ разложение и метод вариационного Монте-Карло

Пробная вариационная функция Гутцвиллера [15, 14, 66, 67] и ее модификации [59, 68] являются, по-видимому, наиболее популярным вариационным подходом к проблеме сильно коррелированного состояния. Пробную волновую функцию Гутцвиллера можно представить в виде [67]

$$|\psi\rangle = g_0^{\hat{X}} |\varphi_0\rangle, \quad (19)$$

где $\hat{X} = \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$, g_0 — вещественный параметр, лежащий в пределах $[0, 1]$ для $U > 0$, $|\varphi_0\rangle$ — исходная N -частичная волновая функция некоррелированных электронов, например для кристалла ее можно построить на блоховских функциях:

$$\prod_{\mathbf{k} < \mathbf{k}_F} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \prod_{\mathbf{k} < \mathbf{k}_F} a_{\mathbf{k}\downarrow}^+ |0\rangle, \quad (20)$$

где $\mathbf{k}$ — волновой вектор фермиона, $\mathbf{k}_{F\sigma}$ — волновой вектор Ферми для фермионов со спином σ . Предполагается, что число частиц системы большое, но конечное. Существуют другие эквивалентные представления пробной волновой функции (19). Например, оператор в правой части (19) может быть записан как

$$g_0^{\hat{X}} = \prod_i [1 - (1 - g_0) n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}] \quad (21)$$

или

$$g_0^{2\hat{X}} = \prod_i [1 - (g_0^2 - 1) n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}]. \quad (22)$$

Выражения (21) и (22) часто используются в диаграммных разложениях [17–19, 70].

Чтобы прояснить смысл пробной функции (19), разложим $|\varphi_0\rangle$ по конфигурациям [15]:

$$|\varphi_0\rangle = \sum_{\Gamma} A_{\Gamma} |\Gamma\rangle, \quad (23)$$

где $|\Gamma\rangle$ — вектор состояния в конфигурационном пространстве, т.е. это состояние вида $a_{i_1\sigma_1}^+ a_{i_2\sigma_2}^+ \dots a_{i_N\sigma_N}^+ |0\rangle$, где индексы i и σ обозначают номер узла решетки и спин для каждого электрона, совокупность индексов $\{i_1, i_2, \dots, i_N, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ определяет данную конфигурацию Γ , A_{Γ} — комплексная амплитуда конфигурации $|\Gamma\rangle$. Относительные фазы между различными configura-

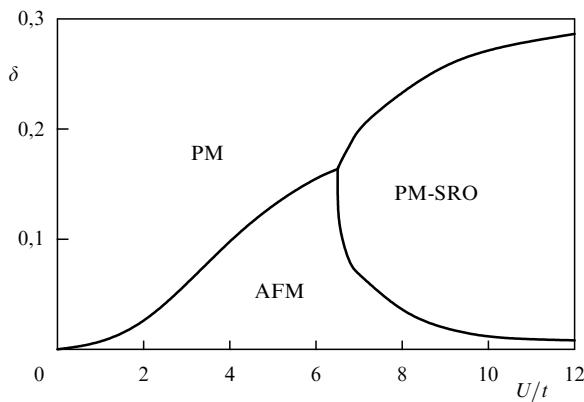


Рис. 7. Фазовая диаграмма модели Хаббарда на двумерной решетке (метод вспомогательных бозонов) [65]. AFM — антиферромагнитная фаза, PM — парамагнитная фаза без корреляций, PM-SRO — парамагнитная фаза с ближним порядком. Число электронов на узел решетки равно 1 – δ .

циями отражают различные симметрии системы (антисимметричность волновой функции по отношению к перестановкам, точечную симметрию, трансляционную симметрию кристалла и т.д.) [15]. Нетрудно заметить, что оператор g_0^X является инвариантным относительно перестановок, преобразований точечной группы и трансляций. Таким образом, пробная волновая функция (19) сохраняет все симметрии исходной волновой функции. При этом амплитуда каждой конфигурации уменьшается тем сильнее, чем больше число двукратно занятых узлов в данной конфигурации (D), благодаря множителю g_0^D .

Далее можно вычислить энергию гамильтониана Хаббарда (8) на пробной волновой функции (19):

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (24)$$

Здесь Гутцвиллером было использовано сильное предположение — так называемое приближение Гутцвиллера [15]. Суть его состоит в том, что состояния двух различных узлов предполагаются независимыми. Это сводит проблему определения энергии системы к чисто комбинаторной задаче. Параметр g_0 может быть выражен через $x = \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$ и исключен из (24). В результате мы получаем [67]

$$E = \sum_{\sigma} q_{\sigma} \bar{e}_{\sigma} + xU, \quad (25)$$

где

$$q_{\sigma} = \frac{\left\{ [(n_{\sigma} - x)(1 - n_{\sigma} - n_{-\sigma} + x)]^{1/2} + [x(n_{-\sigma} + x)]^{1/2} \right\}^2}{n_{\sigma}(1 - n_{\sigma})}, \quad (26)$$

$n_{\sigma} = \langle n_{i\sigma} \rangle$, $\bar{e}_{\sigma}^0 = \sum_{\mathbf{k} < \mathbf{k}_F} \epsilon_{\mathbf{k}\sigma}^0$ — средняя кинетическая энергия электронов со спином σ . Затем, чтобы найти энергию основного состояния системы, энергию E минимизируют по отношению к параметру x . С увеличением U параметр q_{σ} уменьшается. Можно показать [27], что такое поведение соответствует сужению квазичастичной зоны и увеличению эффективной массы квазичастиц $q_{\sigma} = m_{\text{eff}}^{-1}$.

Как было замечено выше, нелокальные динамические корреляции в пределе бесконечномерной решетки исчезают, поэтому в этом случае пробная волновая функция Гутцвиллера совместно с приближением Гутцвиллера дают очень хороший результат. В случае же конечномерной решетки приближение Гутцвиллера является слишком сильным предположением, полностью исключаящим нелокальные корреляции между частицами. Например, хорошо известно, что фазовый переход металл–изолятор, который возникает в ПМ фазе с половинным заполнением при критическом значении $U_C = 8|\bar{e}_0|$, где $\bar{e}_0 = \bar{e}_{\uparrow}^0 + \bar{e}_{\downarrow}^0$, существует только в пределе бесконечномерной решетки [9].

Расчет энергии основного состояния пробной волновой функции Гутцвиллера на конечномерных решетках без использования приближения Гутцвиллера заметно усложняется. В работах [17–19] было предложено диаграммное разложение оператора (22) по степеням параметра ($g_0^2 - 1$). Линии на диаграммах соответствовали одночастичной матрице плотности невзаимодействующей системы $\langle \phi_0 | a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} | \phi_0 \rangle$, а вершины — параметру ($g_0^2 - 1$). Для одномерной цепочки, используя данное разложение, удастся получить точное решение [17, 69]. По причинам, обсуждавшимся выше, диаграммное

разложение радикально упрощается в пределе бесконечномерной решетки. Наиболее сложным остается случай двумерных и трехмерных систем. Можно несколько упростить ситуацию, если в качестве исходной волновой функции взять решение Хартри–Фока для заданного U [70]. Для этого вместо ($g_0^2 - 1$) вводится новый параметр x_i , зависящий от номера узла, а вместо оператора $\hat{X}$ — новый оператор $\hat{K} = \sum_i [n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - (n_{i\uparrow} n_{i\downarrow})_{\text{HF}}]$, где $(n_{i\uparrow} n_{i\downarrow})_{\text{HF}} = \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle + n_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle - \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle$ — "хартри-фокское" значение оператора $n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$. Далее применяется техника диаграммного разложения оператора $g_0^{2K} = \prod_i \{1 + x_i [n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - (n_{i\uparrow} n_{i\downarrow})_{\text{HF}}]\}$, называемая разложением по степеням $1/D$ [70]. Расчеты энергии основного состояния пробной волновой функции Гутцвиллера с учетом разложения до $1/D^2$ приводят к результатам, очень близким к приближению Гутцвиллера. Возникает фазовый переход металл–изолятор, нефизический для конечномерных решеток, при U_C , которое отличается от критического значения в приближении Гутцвиллера всего на 4% для трехмерной кубической решетки и на 8% для двумерной квадратной решетки [70].

При анализе результатов разложения $1/D + 1/D^2$ возникает два вопроса. Во-первых, неясно, насколько быстро сходится ряд и, следовательно, какова точность вычисления энергии основного состояния. Во-вторых, пробная волновая функция Гутцвиллера содержит вариационный параметр, отвечающий только внутризольным корреляциям, что является достаточным для бесконечномерной решетки. Однако, не очевидно, что она адекватно описывает сильно коррелированное состояние на двумерных и трехмерных решетках.

Ответ на первый вопрос дают результаты численного анализа основного состояния пробной волновой функции Гутцвиллера на конечномерных решетках методом вариационного Монте-Карло [20] без использования приближения Гутцвиллера. Вычисления выполнялись на конечных кластерах. Энергия основного состояния кристалла определялась из экстраполяции зависимости основной энергии кластера от его размеров к бесконечному кластеру. Результаты расчетов для ПМ и АФМ фаз при половинном заполнении зоны приведены на рис. 8 и 9. Из этих расчетов видно, что фазовый переход вблизи U_C отсутствует. Таким образом, по крайней мере при $U \geq U_C$ разложение $1/D + 1/D^2$ некорректно.

Чтобы разобраться со вторым вопросом, рассмотрим предел $U \gg \Delta$. Здесь Δ — ширина исходной зоны. Эффективной моделью в этом пределе является известная t - J -модель [71–74]:

$$H = -t \sum_{ij\sigma} (1 - n_{i-\sigma}) a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} (1 - n_{i-\sigma}) + J \sum_{ij} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right), \quad (27)$$

где $\mathbf{S}_i$ — оператор спина, $J = 2t^2/U$. Из пространства состояний t - J -модели исключены двукратно занятые состояния узлов решетки. Теперь рассмотрим пробную волновую функцию Гутцвиллера на конечномерной решетке в этом пределе. Хорошо известно [74], что в t - J -модели существуют нелокальные спиновые корреляции, т.е. $\langle S_{zi} S_{zj} \rangle' \neq 0$, где S_{zi} — проекция спина на ось z , а штрих обозначает усреднение по ближайшим соседям. Поскольку двукратно занятые состояния исключены, вариационный параметр в пробной функции зафиксиро-

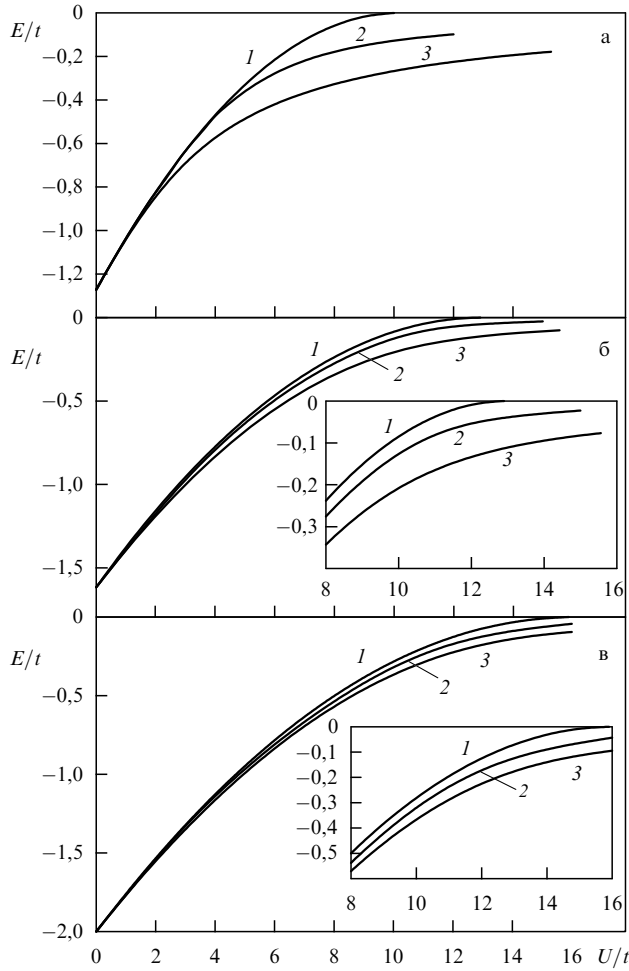


Рис. 8. Энергия основного состояния фермионов в ПМ фазе в случае (а) одномерной цепочки: 1 — решение Гутцвиллера [15], 2 — вариационная теория ближнего порядка [22] (минимизация выражения (55)), 3 — точное решение [13] (АФМ фаза); (б) плоской квадратной решетки и (в) простой кубической решетки: 1 — решение Гутцвиллера, 2 — метод вариационного Монте-Карло [20], 3 — вариационная теория БП [22] (минимизация выражения (55)). На вставках: увеличенные фрагменты графиков вблизи U_C .

ван ($g_0 = 0$). Таким образом, величина $\langle S_{zi} S_{zj} \rangle'$ для пробной функции Гутцвиллера в t - J -модели является постоянной. С другой стороны, в гамильтониан входят две константы t и J . Их соотношение должно определять амплитуду ближних корреляций. Отсюда видно, что сама по себе функция Гутцвиллера не может корректно описать ближние корреляции на конечномерной решетке (даже вне рамок приближения Гутцвиллера). То же самое можно сказать о динамической теории среднего поля (ДТСП). Таким образом, для вариационного исследования ближних корреляций необходимо введение дополнительных вариационных параметров, отвечающих ближним корреляциям.

4. Вариационная теория БП

4.1. Общие свойства пробной волновой функции

Перейдем к исследованию свойств пробной волновой функции, которая в явном виде содержит БП. В самом общем виде ее можно представить как [21, 22]

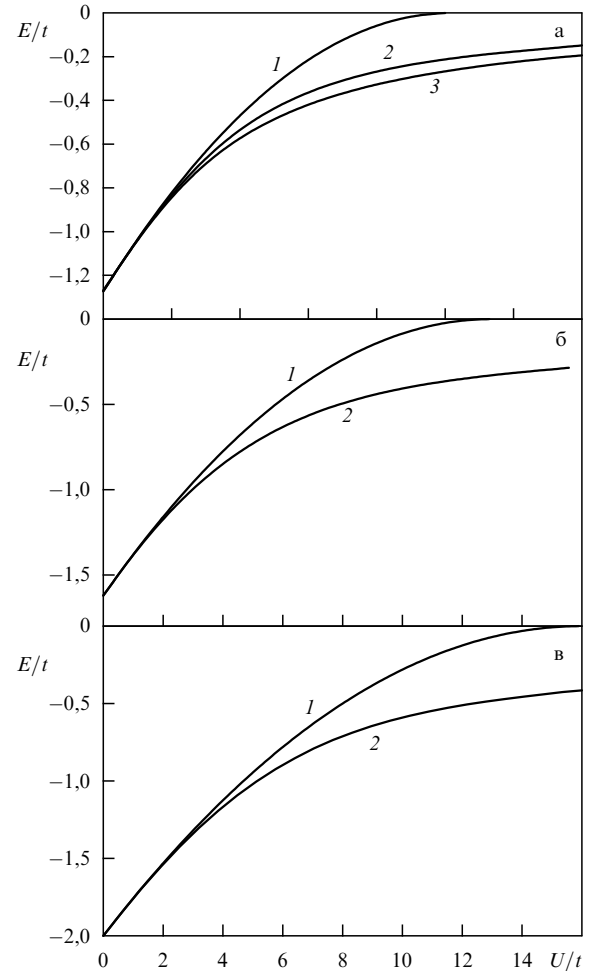


Рис. 9. Энергия основного состояния фермионов в АФМ фазе в случае (а) одномерной цепочки: 1 — решение Гутцвиллера [15], 2 — вариационная теория БП [22]), 3 — точное решение [13]; (б) плоской квадратной решетки и (в) простой кубической решетки: 1 — решение Гутцвиллера [15], 2 — вариационная теория БП [22].

$$|\psi\rangle = \tilde{F}|\varphi_0\rangle = \prod_{\lambda} g_{\lambda}^{\hat{P}_{\lambda}} |\varphi_0\rangle, \quad (28)$$

где в произведение кроме гутцвиллеровского сомножителя может входить набор проекционных операторов $\hat{P}_{\lambda}$ на все возможные конфигурации состояния узла решетки и пары узлов-ближайших соседей. Вещественные параметры g_i лежат в диапазоне $[0, \infty[$, что позволяет как уменьшать, так и увеличивать амплитуды различных конфигураций пары узлов.

В качестве примера определим явный вид пробной волновой функции для ПМ фазы невырожденной полузаполненной зоны. Всего имеется 4 проекционных оператора, выделяющих определенное состояние узлов решетки:

$$\begin{aligned} \hat{X}_1 &= \sum_i (1 - n_{i\uparrow})(1 - n_{i\downarrow}), \\ \hat{X}_2 &= \sum_i n_{i\uparrow}(1 - n_{i\downarrow}), \\ \hat{X}_3 &= \sum_i (1 - n_{i\uparrow})n_{i\downarrow}, \\ \hat{X}_4 &= \sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \end{aligned} \quad (29)$$

и 10 проекционных операторов на состояния пар ближайших узлов следующего вида:

$$\begin{aligned}\hat{Y}_1 &= \sum_{\langle ij \rangle} (1 - n_{i\uparrow})(1 - n_{i\downarrow})(1 - n_{j\uparrow})(1 - n_{j\downarrow}), \\ \hat{Y}_2 &= \sum_{\langle ij \rangle} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}\end{aligned}\quad (30)$$

и т.д. (табл. 2).

Таблица 2. Конфигурации пары ближайших соседей в модели Хаббарда (ПМ фаза, половинное заполнение)

Оператор	Конфигурация		Кратность вырождения
	Узел i	Узел j	
$\hat{Y}_1$			1
$\hat{Y}_2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	1
$\hat{Y}_3$	$\uparrow\downarrow$		2
$\hat{Y}_4$	$\uparrow$		2
$\hat{Y}_5$	$\downarrow$		2
$\hat{Y}_6$	$\uparrow$	$\uparrow$	1
$\hat{Y}_7$	$\uparrow$	$\downarrow$	2
$\hat{Y}_8$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	2
$\hat{Y}_9$	$\uparrow\downarrow$	$\downarrow$	2
$\hat{Y}_{10}$	$\downarrow$	$\downarrow$	1

Далее ограничим наше рассмотрение решетками, у которых полное число пар ближайших соседей равно $zL/2$, где z — число ближайших соседей узла, L — полное число узлов решетки. Определим нормированные собственные значения операторов (29) и (30) как

$$x_\lambda |\Gamma\rangle = L^{-1} \hat{X}_\lambda |\Gamma\rangle, \quad y_\lambda |\Gamma\rangle = \left(\frac{zL}{2}\right)^{-1} \hat{Y}_\lambda |\Gamma\rangle. \quad (31)$$

Нетрудно заметить, что конфигурации $|\Gamma\rangle$ являются собственными векторами этих операторов. Тогда собственные значения оказываются связанными условиями нормировки [1, 21, 22]

$$\sum_\lambda x_\lambda = 1, \quad \sum_\lambda \beta_\lambda y_\lambda = 1, \quad (32)$$

где β_λ — кратность вырождения, и самосогласованности

$$\begin{aligned}y_1 + y_3 + y_4 + y_5 &= x_1, \\ y_2 + y_3 + y_8 + y_9 &= x_4, \\ y_4 + y_6 + y_7 + y_8 &= x_2, \\ y_5 + y_7 + y_9 + y_{10} &= x_3.\end{aligned}\quad (33)$$

Поскольку концентрации фермионов каждого спина считаются фиксированными, то, как и в приближении Гутцвиллера, имеется только один независимый параметр x_λ . Семь параметров y_λ являются независимыми. В случае половинного заполнения зоны в парамагнитной фазе при нулевом полном спине системы появляются дополнительные условия [21, 22]:

$$y_1 = y_2, \quad y_6 = y_{10}, \quad y_4 = y_5 = y_8 = y_9. \quad (34)$$

После введения дополнительных условий (34) число независимых y_λ уменьшилось до 3. Примем $x = x_1 = x_4$, y_3 , y_4 и y_7 в качестве независимых параметров. Далее,

приняв во внимание дополнительное вырождение, возникающее в результате условий (34), получаем окончательный вид пробной волновой функции ПМ фазы с половинным заполнением:

$$|\psi\rangle = g_0^{\hat{X}} g_3^{\beta_3 \hat{Y}_3} g_4^{4\beta_4 \hat{Y}_4} g_7^{\beta_7 \hat{Y}_7} |\varphi_0\rangle = \hat{F} |\varphi_0\rangle. \quad (35)$$

Теперь обсудим основные свойства пробной волновой функции (28). Пробная волновая функция Гутцвиллера (19), а также пробная волновая функция (35) являются частными случаями (28), поэтому все формальные свойства, перечисленные в следующем абзаце, для них также справедливы. Прежде всего, необходимо выбрать многочастичную исходную волновую функцию $|\varphi_0\rangle$. Она должна быть антисимметричной по отношению к перестановкам частиц и инвариантной по отношению к определенным преобразованиям симметрии. Для молекул это точечная группа симметрии, в случае кристаллической структуры к ней добавляется группа трансляций. Оператор $\hat{F}$ в правой части (19) является полиномом от $n_{i\sigma}$, поэтому пробная волновая функция остается антисимметричной по отношению к перестановкам частиц. Этот оператор должен быть инвариантным по отношению к тем же преобразованиям, что и исходная волновая функция (точные и трансляционные преобразования). Тогда все эти симметрии будут перенесены с исходной волновой функции на пробную волновую функцию. Некоторые конкретные примеры выбора пробной волновой функции будут рассмотрены в следующих разделах.

Рассмотрим некоторые формальные свойства операторов $\hat{F}(g_0, \dots, g_A)$. Заметим, что операторы $g_i^{P_i}$ коммутируют между собой. Набор операторов $\hat{F}(g_0, \dots, g_A)$ при условии $g_i \neq 0$ обладает следующими свойствами: $\hat{F}(g_0, \dots, g_A) \hat{F}(g'_0, \dots, g'_A) = \hat{F}(g''_0, \dots, g''_A)$, где $g''_i = g_i g'_i$. Кроме того, существуют единичный оператор ($g_i = 1$) и оператор, обратный любому из операторов: $\hat{F}^{-1}(g_0, \dots, g_A) = \hat{F}(1/g_0, \dots, 1/g_A)$. Таким образом, операторы $\hat{F}(g_0, \dots, g_A)$ образуют группу. При $g_i = 0$ оператор $\hat{F}(g_0, \dots, g_A)$ не входит в группу, так как он не имеет обратного оператора. Отметим еще одно важное свойство: оператор $\hat{F}(g_0, \dots, g_A)$ является неунитарным.

4.2. Электронные корреляции в молекулах и кластерах

Многочастичные корреляции возникают во всех многоэлектронных системах с сильным взаимодействием: атомах, молекулах, кристаллических твердых телах. В принципе, можно легко написать пробную волновую функцию вида (19) для любой системы. Основную трудность представляет вычисление энергии основного состояния. Есть принципиальное отличие теоретических методов решения проблемы корреляций, используемых в квантовой химии (атомы, небольшие молекулы и кластеры) и в физике твердого тела (кристаллические системы) [75]. В этом разделе мы остановимся на квантово-химическом подходе.

Прежде всего, оценим размерность гильбертова пространства состояний для малой молекулы. Например, для молекулы CH_4 минимальный набор базисных функций молекулы образован 1S, 2S и тремя 2P атомными орбиталями углерода и четырьмя 1S орбиталями водорода. Тогда полное число синглетных состояний молекулы с учетом ограничений, накладываемых симметрией

молекулы, составит 5292, триплетных состояний — 7560 и т.д. [68]. При использовании же расширенных наборов базисных функций это число резко возрастает. Например, набор типа (DZ + P), содержащий 35 базисных функций для той же молекулы, приводит к примерно 2×10^{11} синглетным состояниям. Таким образом, прямой численный расчет основного состояния с учетом всех состояний возможен только для малых молекул типа H_2O с использованием минимального базиса [68]. С другой стороны, очевидно, что различные векторы входят в основное состояние с различными весами, поэтому исходное пространство состояний можно сузить, удалив маловероятные конфигурации. Предположим, что для молекулы известно решение типа Хартри–Фока, т.е. основное состояние (его мы примем в качестве исходного состояния $|\varphi_0\rangle$) и соответствующий ему набор молекулярных орбиталей. Гамильтониан задачи удобно разделить на две составляющие [75]: $H = H_{HF} + H_r$, где первое слагаемое — диагональная часть в представлении хартри-фоковских молекулярных орбиталей, второе — остаточная часть гамильтониана. Учет корреляций приводит к вовлечению в основное состояние векторов вида $a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} |\varphi_0\rangle$, $a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma'}^+ a_{j\sigma'} a_{i\sigma} |\varphi_0\rangle$ и т.д., где $a_{i\sigma}^+$ — оператор рождения электрона на i -й молекулярной орбитали. Интуитивно понятно, что сильно возбужденные состояния малой молекулы с большим количеством электрон-дырочных пар имеют высокую энергию и должны иметь сравнительно малый вес, поэтому их можно было бы исключить из пространства состояний.

Существует много способов реализации данной идеи в атомах, молекулах и кластерах [68, 75–78]. Наиболее мощным, но сложным методом, по-видимому, является использование кумулянтного представления [68, 79]. Ниже мы будем следовать работе [75], где был представлен простой наглядный формализм разложения оператора $\hat{F}$ по степеням операторов $\hat{X}$ и $\hat{Y}$. Перепишем пробную волновую функцию (28) в виде

$$|\psi\rangle = \exp(\hat{G})|\varphi_0\rangle = \exp\left(-\sum_{ij} \eta_{ij\sigma\sigma'} n_{\sigma i} n_{j\sigma'}\right)|\varphi_0\rangle. \quad (36)$$

Видно, что параметры $\eta_{ij\sigma\sigma'}$ имеют смысл $\ln g_\lambda$ из выражения (28). Если ограничиться в операторном разложении экспоненты первым членом, получим простой анзац для вычисления корреляционной энергии молекулы [80]:

$$|\psi\rangle = \left(1 - \sum_{ij} \eta_{ij\sigma\sigma'} n_{\sigma i} n_{j\sigma'}\right)|\varphi_0\rangle. \quad (37)$$

Оказывается, что для малых молекул даже анзац (37) дает довольно точное значение корреляционной энергии основного состояния (обычно порядка 97 % от точного значения) [68, 77, 80]. Используя теорему о связанных кластерах, можно развить диаграммную технику вычисления энергии основного состояния с пробной волновой функцией (36). Энергия основного состояния имеет вид

$$E = \frac{\langle\varphi_0|\exp(\hat{G})H\exp(\hat{G})|\varphi_0\rangle}{\langle\varphi_0|\exp(\hat{G})\exp(\hat{G})|\varphi_0\rangle} = \frac{\langle\exp(\hat{G})H\exp(\hat{G})\rangle}{\langle\exp(\hat{G})\exp(\hat{G})\rangle}. \quad (38)$$

Экспоненты в числителе (38) разложим в ряд. Теорема Вика позволяет выразить произвольные произведения вида $\hat{G}^n H \hat{G}^m$ через парные средние от операторов рождения и уничтожения электронов в i -м состоянии.

Каждый член разложения можно представить в виде диаграммы, которые могут быть связными или несвязными. После некоторых преобразований числитель дроби (38) факторизуется как

$$\langle\exp(\hat{G})H\exp(\hat{G})\rangle = \sum_{q,k} \frac{1}{q!(k-q)!} \langle\hat{G}^q H \hat{G}^{k-q}\rangle_C \times \\ \times \sum_{m,n} \frac{1}{(m-q)!(n-k+q)!} \langle\hat{G}^{m-q} \hat{G}^{n-k+q}\rangle, \quad (39)$$

где $\langle\ldots\rangle_C$ означает, что структура полностью связная, второй множитель является просто разложением числителя и сокращается. Таким образом, получаем окончательный результат [75]:

$$E = \langle\exp(\hat{G})H\exp(\hat{G})\rangle_C, \quad (40)$$

т.е. основное состояние определяется только связными диаграммами. Важно заметить, что при выводе (40) не было использовано никаких предположений о структуре $\hat{G}$ и H .

Были выполнены обширные исследования корреляций в малых молекулах [68]. Обычно в расчетах не используется полный набор параметров, а рассматриваются только два из них, соответствующие спиновым корреляциям ($\eta'_{ij} S_i S_j$) и корреляциям плотности ($\eta''_{ij} n_i n_j$). В рамках локального анзаца (37) были получены полезные приближенные алгебраические выражения для корреляционной энергии. Например, для различных парных связей в органических веществах [68, 81] эти выражения имеют вид

$$E_{\text{corr}}(C-H) = -0,44 - 5,9 \times 10^{-3}(d-1,08), \\ E_{\text{corr}}(C-C, \sigma) = -0,27 - 3,0 \times 10^{-3}(d-1,3) - \\ - 1,0 \times 10^{-4}(d-1,3)^2, \quad (41) \\ E_{\text{corr}}(C-C, \pi) = -1,57 - 3,47 \times 10^{-2}(d-1,3) - \\ - 6,28 \times 10^{-4}(d-1,3)^2.$$

Здесь энергия выражена в электрон-вольтах, длина связи d — в ангстремах, σ и π обозначают тип связи углерод–углерод. Сравнение с экспериментальными значениями корреляционной энергии указывает на хорошую точность формул (41) в небольших органических молекулах.

4.3. Основное состояние сильно коррелированных электронных систем на решетке в модели Хаббарда

Использование квантово-химических методов при решении проблемы БП в кристаллических системах оказывается малопродуктивным. Кристаллическая система содержит очень большое число электронов, поэтому собственные значения операторов P_λ являются большими числами. Тогда в разложении экспоненты (36) нельзя ограничиваться только первыми членами. Удастся просуммировать только диаграммы определенного класса и получить решение типа ПСФ [75]. Для микроскопического анализа БП этого явно недостаточно. Вариационный кластерный метод (ВКМ), или метод псевдоансамбля Кикучи, позволяет вычислять средние на пробной волновой функции (28), не прибегая к разложению (36) [82–85]. Этот метод широко исполь-

зается при расчетах основного состояния и термодинамических свойств магнетиков [1, 82, 83, 86] и неупорядоченных систем [87, 88], кинетических явлений [89, 90] и т.д. Его современная строгая формулировка опирается на описание в терминах кумулянтов [91, 92]. Ниже мы будем следовать наглядной традиционной формулировке ВКМ [1, 82, 83].

Мы начнем с вычисления энергии основного состояния в модели Хаббарда в парамагнитной фазе с половинным заполнением, т.е. для пробной волновой функции (35). Удобно выполнять все вычисления, используя равновероятное состояние $|\varphi_{\text{ep}}\rangle$, в котором модуль амплитуды всех конфигураций одинаков, $|A_I| = \text{const}$. Сразу же заметим, что это состояние не является исходным состоянием $|\varphi_0\rangle$, поскольку даже в случае невзаимодействующих фермионов в основном состоянии (20) имеются нелокальные корреляции. Мы вычислим сначала функцию $|\varphi_0\rangle$ из вариационной процедуры $|\varphi_0\rangle = \hat{F}|\varphi_{\text{ep}}\rangle$, полагая $U = 0$. Затем найдем волновую функцию коррелированной системы как $|\psi\rangle = \hat{F}'|\varphi_{\text{ep}}\rangle$. Тогда из групповых свойств операторов $\hat{F}$ следует, что мы определили искомое преобразование исходной волновой функции к коррелированной:

$$|\psi\rangle = \hat{F}'\hat{F}^{-1}|\varphi_0\rangle. \quad (42)$$

Прежде всего найдем норму произвольной пробной волновой функции вида $|\psi\rangle = F|\varphi_{\text{ep}}\rangle$. Следуя работам [21, 22], представим ее как

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= \sum_{\{x, y_3, y_4, y_7\}} W_{\{x, y_3, y_4, y_7\}} g_0^{2Lx} g_3^{2Ly_3} g_4^{8Ly_4} g_7^{2Ly_7} = \\ &= \sum_{\{x, y_3, y_4, y_7\}} R_{\{x, y_3, y_4, y_7\}}. \end{aligned} \quad (43)$$

Суммирование в выражении (43) выполняется по всем наборам $\{x, y_3, y_4, y_7\}$. Одному и тому же набору независимых переменных может соответствовать некоторое число конфигураций. $W_{\{x, y_3, y_4, y_7\}}$ — это число конфигураций¹, соответствующих фиксированному набору $\{x, y_3, y_4, y_7\}$. Будем называть эту величину весом набора. Для ее вычисления поступим следующим образом. Вычислим число способов, которыми можно разместить 10 возможных конфигураций пары узлов (см. табл. 2) по $zL/2$ связям между ближайшими соседями. В результате получим

$$Q = \frac{(zL/2)!}{\prod_{\lambda} [(zy_{\lambda}L/2)!]^{\beta_{\lambda}}}. \quad (44)$$

Здесь для простоты опущены нижние индексы. Эта величина даст нам сильно завышенную оценку W , так как возникнет большое число ложных конфигураций, в которых одному и тому же узлу соответствуют разные состояния (рис. 10). Далее можно оценить долю "правильных" распределений в "псевдоансамбле" конфигураций. Будем размещать возможные состояния узла X_{λ} по zL узлам псевдорешетки. В "правильной" конфигурации состояние каждого узла однозначно определено. Тогда доля "правильных" конфигураций в "псевдоансамбле"

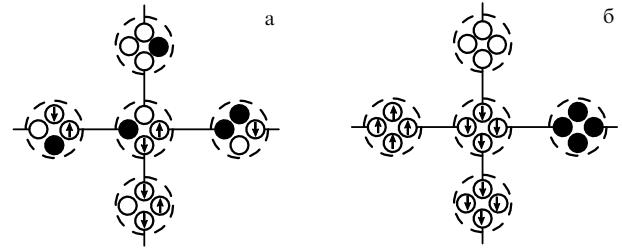


Рис. 10. Размещение парных конфигураций в вариационном кластерном методе по связям решетки: (а) "неправильная" конфигурация, (б) "правильная" конфигурация.

имеет вид

$$\Gamma = \frac{L! \prod_{\lambda} (x_{\lambda} z L)!}{(zL)! \prod_{\lambda} (x_{\lambda} L)!}. \quad (45)$$

И, наконец, гипотеза Кикучи [82] состоит в том, что

$$W = \Gamma Q. \quad (46)$$

Заметим, что эта гипотеза оказывается точной на решетках Бете [1, 84]. Для решеток, имеющих замкнутые пути, она приводит к приближенному решению. Ниже мы обсудим способы включения замкнутых путей в расчетную схему. В выражениях (44) и (45) зависимые параметры x_{λ} и y_{λ} должны быть выражены через независимые как

$$\begin{aligned} x_2 &= x_3 = \frac{1}{2} - x, \\ y_1 &= y_2 = x - y_3 - 2y_4, \\ y_6 &= y_{10} = \frac{1}{2} - x - y_7 - 2y_4. \end{aligned} \quad (47)$$

В термодинамическом пределе $L \rightarrow \infty$, как обычно [1, 15, 66, 82], мы можем ограничиться суммированием только тех членов ряда, которые близки к максимальному, т.е. для которых выполняется условие $\{x, y_3, y_4, y_7\} \rightarrow \{x, y_3, y_4, y_7\}_{\text{max}}$. Оставшиеся члены ряда оказываются экспоненциально малыми. Поскольку функция R положительная, удобно искать максимум ее логарифма вместо самой функции. Преобразуем все факториалы, входящие в R , при помощи асимптотической формулы Стирлинга. Затем логарифмируем полученное выражение и удержим только главные члены по L . Можно показать, что такая процедура равносильна замене $(zL/2)! \rightarrow (L!)^{z/2}$, использованной в работах [1, 82, 83]. После прямых вычислений получаем

$$\begin{aligned} L^{-1} \ln W &= 2(z-1) \left[x \ln x + \left(\frac{1}{2} - x \right) \ln \left(\frac{1}{2} - x \right) \right] - \\ &\quad - z(y_2 \ln y_2 + y_3 \ln y_3 + 4y_4 \ln y_4 + \\ &\quad + y_6 \ln y_6 + y_7 \ln y_7), \end{aligned} \quad (48)$$

где y_2 и y_6 определяются формулой (47). Область определения функции $L^{-1} \ln R$ ограничена условиями (33), (47) и требованием положительности x_{λ} и y_{λ} . При ненулевых конечных параметрах g_i ее градиент на границах направлен внутрь этой области, поэтому глобальный максимум функции $L^{-1} \ln R$ является ее внутренним максимумом. В этом случае необходимыми

¹ С точностью до постоянного множителя, который несуществен для дальнейших вычислений.

условиями максимума будут уравнения $\partial(\ln R)/\partial\eta_\lambda = 0$, где $\eta_\lambda = x, y_3, y_4, y_7$. Используя их, мы можем выразить параметры g_i через x, y_3, y_4, y_7 как

$$\begin{aligned} g_0 &= \left(\frac{1/2 - x}{x} \right)^{z-1} \left(\frac{x - y_3 - 2y_4}{1/2 - x - y_7 - 2y_4} \right)^{z/2}, \\ g_3^2 &= \frac{y_3}{x - y_3 - 2y_4}, \\ g_4^2 &= \frac{4y_4^2}{(1/2 - x - y_7 - 2y_4)(x - y_3 - 2y_4)}, \\ g_7^2 &= \frac{y_7}{1/2 - x - y_7 - 2y_4}. \end{aligned} \quad (49)$$

Следует обратить внимание на то, что функция $L^{-1} \ln R$ является строго выпуклой вверх по переменным y_3, y_4, y_7 при фиксированном значении x . Это означает, что, в действительности, мы ищем максимум функции не четырех переменных, а одной неявно заданной переменной.

Для вычисления энергии основного состояния гамильтониана (8) нам необходимо вычислить матрицу плотности первого порядка на пробной функции (35):

$$\rho_1 = L^{-1} \frac{\langle \psi | \sum_{(ij), \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \text{h.c.}) | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (50)$$

Здесь возникает существенное усложнение по сравнению с методом Гутцвиллера, так как при перескоке фермиона с узла i на узел j , изменяется не только конфигурация пары $i-j$, но и смежных пар узлов $i-k$ и $j-l$ решетки (рис. 11а). Зафиксируем некоторую конфигурацию фрагмента решетки, состоящего из связи $i-j$ и ее смежных связей (рис. 11а), и вычислим функцию W' оставшейся решетки, используя выражения (44)–(46). Тогда доля конфигураций, содержащих заданный фрагмент, может быть представлена в виде

$$\frac{W'}{W} = y_{(ij)} \prod_k \left(\frac{y_{(ki)}}{x_{(i)}} \right) \prod_l \left(\frac{y_{(jl)}}{x_{(j)}} \right), \quad (51)$$

где под $y_{(\alpha\beta)}$ подразумевается значение y_λ , соответствующее конфигурации связи $\alpha\beta$. Теперь вклад в матрицу плотности от перехода из конфигурации 1 в конфигурацию 2 примет форму

$$\frac{\prod_\alpha g_\alpha}{\prod_\beta g_\beta} \frac{W'(1)}{W}, \quad (52)$$

где первый множитель является отношением амплитуды конфигурации 1 к амплитуде конфигурации 2, т.е.

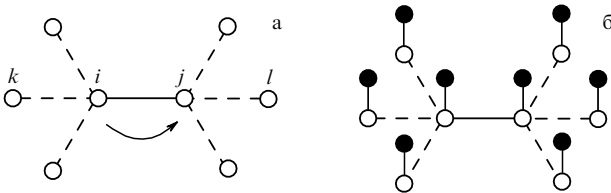


Рис. 11. (а) Фрагмент решетки с $z = 4$. При перескоке фермиона с узла i на узел j конфигурации смежных пар также изменяются; (б) фрагмент эквивалентной решетки Кондо–Хаббарда, черные кружки обозначают локализованные состояния.

g_α соответствует тем связям конфигурации 2, которые отсутствовали в конфигурации 1, и наоборот для g_β . Если конфигурации 1 и 2 отличаются на несколько одинаковых связей, то параметры g_α и g_β записываются в (51) в соответствующих степенях. В целом процедура аналогична методу Гутцвиллера [15, 66], где в выражение (52) входил только один параметр g_0 .

При помощи выражений (51) и (52) выполним прямое суммирование всех конфигураций и вычислим матрицу плотности (50):

$$\rho_1 = 4 \left[2y_4(a_1 a_2)^{z-1} + \frac{y_3 g_7}{g_0 g_3} a_1^{2(z-1)} + \frac{y_7 g_0 g_3}{g_7} a_2^{2(z-1)} \right], \quad (53)$$

где

$$a_1 = \frac{y_2 g_4 + y_3 g_4 / g_3 + y_4 (g_7 + 1) / g_4}{x}$$

и

$$a_2 = \frac{y_6 g_4 + y_7 g_4 / g_7 + y_4 (g_3 + 1) / g_4}{(1/2 - x)}.$$

Здесь и ниже мы используем y_2 и y_6 вместо выражений (47) для сокращения записи. Так же, как и в методе Гутцвиллера, в матрице плотности мы имеем три члена, первый из которых описывает движение фермиона в хаббардовской подзоне, а второй и третий — переходы между подзонами. Исключим параметры g_i из формулы (53) при помощи (49) и после прямых преобразований получим [22]

$$\rho_1 = 8(y_4 + \sqrt{y_3 y_7}) \times \left[\frac{y_4}{x(1/2 - x)} (\sqrt{y_2} + \sqrt{y_3} + \sqrt{y_6} + \sqrt{y_7})^2 \right]^{z-1}. \quad (54)$$

Окончательно полную энергию системы фермионов удобно представить в гутцвиллеровской форме [15]:

$$E = \frac{1}{L} \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = q \varepsilon_0 + x U, \quad (55)$$

где $q = \rho_1 / \rho_1^0$, ρ_1^0 — значение матрицы плотности некоррелированных электронов, т.е. вычисленное при $U = 0$, ε_0 — средняя энергия некоррелированных электронов. Такая нормировка соответствует процедуре (42). Таким образом, мы получили аналитическое выражение для энергии сильно коррелированной системы в аналитическом виде как функцию вариационных переменных.

Энергию основного состояния можно найти, минимизируя энергию (55) по четырем переменным x, y_3, y_4, y_7 . Поиск глобального минимума осуществлялся численно (усовершенствованный симплекс-метод Нелдера–Мида) и не представлял трудности, потому что выражение (55) — это гладкая дифференцируемая функция без особенностей внутри области определения.

На рисунке 8 представлены результаты расчетов энергии основного состояния парамагнитной фазы для линейной однородной цепочки с $z = 2$ и законом дисперсии $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2 \cos k_x$ (рис. 8а), для плоской квадратной решетки с $z = 4$, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2(\cos k_x + \cos k_y)$ (рис. 8б) и для простой кубической решетки с $z = 6$, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)$ (рис. 8в). На рисунке 12 приведены симметричная и антисимметричная корреляционные

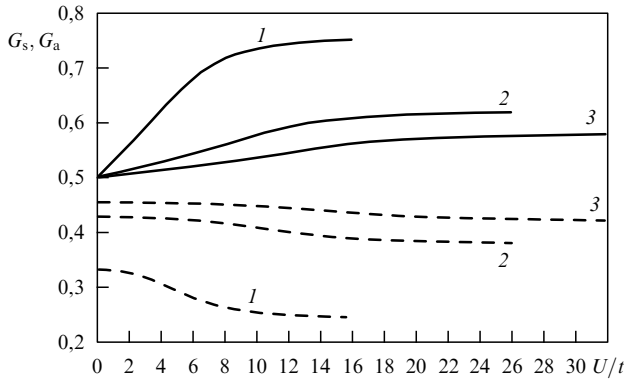


Рис. 12. Симметричная G_s (штриховые линии) и антисимметричная G_a (сплошные линии) корреляционные функции (56) для 1D цепочки (1), плоской квадратной (2) и простой кубической (3) решеток [21, 22].

функции пары ближайших узлов для различных решеток:

$$\begin{aligned} G_s &= \langle n_{\uparrow} n_{\uparrow} \rangle' + \langle n_{\downarrow} n_{\downarrow} \rangle' = 2(y_2 + 2y_4 + y_6), \\ G_a &= \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle' + \langle n_{\downarrow} n_{\uparrow} \rangle' = 2(y_2 + 2y_4 + y_7). \end{aligned} \quad (56)$$

Штрих в выражениях (56) обозначает усреднение по ближайшим соседям. Заметим, что при $U = 0$ корреляции фермионов противоположных спинов отсутствуют ($G_a = 0,5$), а в случае фермионов одного спина появляется обменная дырка ($G_a < 0,5$). Причем этот эффект возник естественным образом в результате вариационной процедуры.

Для исследования предела $D = \infty$ в ПМ фазе были выполнены расчеты энергии основного состояния для гиперкубических решеток с $z = 50, 100, 200, 400, 1000$ [22]. При увеличении размерности решетки энергия основного состояния стремилась к решению Гутцвиллера, точному при $D = \infty$. Для $z = 1000$ оба решения совпадали с точностью 0,1 % при U , лежащем в диапазоне $[0, U_C/2]$, и с точностью 1 % в диапазоне $[U_C/2, 0,8U_C]$, где $U_C = 8\varepsilon_0$.

Полезно сравнить результаты расчетов энергии основного состояния, выполненных вариационным кластерным методом, с результатами, полученными методом вариационного Монте-Карло [20] (см. рис. 8, 9). Как уже обсуждалось в разделе 3.3, в методе вариационного Монте-Карло вычисления выполняются на базе пробной функции Гутцвиллера, т.е. нелокальные корреляции практически игнорируются. В работе [22] найдена энергия основного состояния для пробной функции, включающей в явном виде корреляции ближайших соседей на решетке. Корреляции большего радиуса в нашей модели подчиняются суперпозиционной гипотезе [1]. Таким образом, разница энергий основного состояния в этих двух методах возникает из-за короткодействующих корреляций между фермионами в основном состоянии. Для одномерной цепочки (рис. 8а) разница в энергиях основного состояния незначительна, и результаты метода вариационного Монте-Карло на рисунке не показаны. В случае же плоской квадратной и простой кубической решеток в ПМ фазе (рис. 8б, в) видно, что вблизи U_C энергия основного состояния пробной волновой функции с БП (35) существенно ниже (в 2–3 раза) энергии, полученной методом вариационного Монте-

Карло. Таким образом, в ПМ фазе БП сильно понижает энергию основного состояния 2D и 3D решеток и становится определяющим фактором сильно коррелированного состояния. Метод вариационного Монте-Карло [20] и аналитическое разложение $1/D + 1/D^2$ [70] в этом случае фактически приводят к некорректным результатам.

В отличие от известного приближения "Хаббард-III" [14, 93], в вариационной теории БП ближние АФМ корреляции не исчезают в пределе $U \gg \Delta$. Это согласуется с тем, что в таком пределе модель Хаббарда с половинным заполнением зоны совпадает с моделью Гейзенберга спина 1/2. Значения корреляционных функций на рис. 12 при больших значениях U согласуются с результатами исследования основного состояния модели Гейзенберга [94].

Для сравнения теоретических результатов с экспериментальными данными (см. раздел 2) полезно сформулировать результаты работ [21, 22] в терминах корреляционной длины. Для этого наряду с корреляционными функциями (56) введем корреляционную функцию $G_b = G_s - G_a$. Здесь и далее мы будем использовать такую нормировку корреляционных функций, чтобы при ферромагнитной ориентации спинов пары $G_b = 1$, а при антиферромагнитной $G_b = -1$. Согласно суперпозиционной гипотезе [1] корреляционная функция пары соседей, следующих за ближайшими, составляет G_b^2 , а n -го соседа — G_b^n . В этом случае корреляции должны спадать по экспоненциальному закону $\propto \exp(-r/\xi)$, где корреляционная длина $\xi = a/|\ln G_b|$, a — расстояние между ближайшими соседями. Тогда из рис. 12 мы получаем, что при больших U для одномерной цепочки $\xi = 1,4a$, для простой квадратной решетки $\xi = 0,7a$ и для простой кубической решетки $\xi = 0,55a$. Согласно оптическим измерениям [95], можно принять, что ширина зоны для V_2O_3 в металлической ПМ фазе $\approx 0,5$ эВ, а $U \approx 1$ эВ. Тогда оценка $\xi = 0,55a$ разумно согласуется с результатами измерений по рассеянию нейтронов [5].

В работе [22] была вычислена энергия основного состояния АФМ фазы модели Хаббарда с половинным заполнением, аналогично приведенным выше расчетам. Главное отличие состояло в выборе пробной волновой функции и набора операторов Y_λ . Чтобы пробная волновая функция для АФМ фазы отвечала необходимым трансляционным свойствам, выберем хартри-фоковскую волновую функцию АФМ металла $|\varphi_0^{AFM}\rangle$ [20, 96] в качестве исходной волновой функции. Тогда энергетический спектр исходной волновой функции и магнитный момент подрешеток примут вид [96]

$$\varepsilon_k^{AFM} = \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{1 + (\delta/\varepsilon_k)^2}}, \quad m = \int \frac{\delta \mathbf{k}}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \delta^2}}, \quad (57)$$

где ε_k — энергетический спектр некоррелированных фермионов ПМ фазы, δ — параметр АФМ порядка, интегрирование выполняется по уменьшенной зоне Бриллюэна [96], $m = (\langle n_{\uparrow} \rangle_A + \langle n_{\downarrow} \rangle_B - \langle n_{\downarrow} \rangle_A - \langle n_{\uparrow} \rangle_B)/2$. В последнем выражении усреднение производится по узлам подрешеток A и B . В АФМ фазе частично снимается вырождение операторов Y_λ , и число их возрастает.

Результаты расчета энергии основного состояния АФМ фазы представлены на рис. 9. Интересно, что в АФМ фазе они практически совпадают с расчетами по

методу вариационного Монте-Карло [20]. Расхождение находится в пределах 1 %. Таким образом, в АФМ фазе БП не развивается, и волновая функция Гутцвиллера дает хорошее решение.

В работе [99] исследовалась парамагнитная фаза с половинным заполнением в магнитном поле. В этом случае средняя кинетическая энергия невзаимодействующих фермионов зависит от магнитного момента $\varepsilon_0(m)$, и набор операторов расширяется по сравнению с набором табл. 2. Основной целью работы было исследование метамангнитного перехода в магнитном поле. Для бесконечномерной решетки в магнитном поле возникает переход первого рода [67]. С другой стороны, фазовый переход, который возникает в отсутствие магнитного поля при критическом U_C , является особенностью бесконечномерной решетки. Поэтому не очевидно, что метамангнитный переход в магнитном поле в теории Гутцвиллера корректно отражает ситуацию для конечномерных решеток. В результате расчета энергии основного состояния с учетом БП оказалось, что в модели Хаббарда при половинном заполнении на одномерной цепочке и двумерной квадратной решетке метамангнитный переход возникал, а на простой кубической решетке отсутствовал [99]. Это указывает на существенную роль размерности и структуры решетки.

Из примеров, приведенных выше, видны общие правила выбора исходной волновой функции и набора операторов $\hat{Y}_\lambda$: 1) пробная волновая функция должна удовлетворять требованиям симметрии фазы, для которой производится расчет; 2) набор операторов $\hat{Y}_\lambda$, с одной стороны, должен быть максимально широким, а с другой — не нарушать симметрию данной фазы.

В заключение этого параграфа отметим, что в предлагаемой теории были использованы два упрощения. Во-первых, мы пренебрегли влиянием границ, во-вторых, при расчете величины W мы не принимали во внимание замкнутые пути на решетке. Однако в рамках теории ВКМ можно рассматривать не только парные корреляции, но и более сложные модели, например, корреляции трех и более узлов [83]. Расширение кластера ведет к постепенному включению замкнутых путей на решетке. Более того, можно рассмотреть последовательность приближенных решений: теорию Гутцвиллера (кластер состоит из одного узла) как нулевое приближение, пробную волновую функцию (28) (кластер состоит из пары узлов) как первое приближение и т.д. Очень важно, что для последовательности таких приближений строго доказана сходимости к точному решению в двух- и трехмерном случаях [84].

4.4. Спектр элементарных возбуждений сильно коррелированной системы

Энергетический спектр квазичастиц — это один из центральных вопросов теории сильно коррелированного состояния. Ему посвящено большое число оригинальных работ и обзоров (см., например, [4, 8–12, 67, 68, 74, 50, 97, 98]). В данном разделе мы сосредоточимся на проблеме одночастичных возбуждений в вариационной теории БП. Возбужденные состояния сильно коррелированной системы в рамках вариационной теории можно получить двумя способами. Сначала мы исследуем спектр когерентных возбуждений. Пусть исходным состоянием $|\varphi_0\rangle$ будет ферми-море невзаимодействующих фермионов (20). Создадим возбужденное некор-

релированное состояние $a_{\mathbf{k}\sigma}^+|\varphi_0\rangle$, которое обладает волновым вектором $\mathbf{k}$ и энергией $\varepsilon_{\mathbf{k}}$. Если мы теперь используем новое состояние в качестве исходного и применим к нему вариационную процедуру, аналогичную использованной для определения основного состояния, то получим новое коррелированное состояние с тем же волновым вектором $\mathbf{k}$ (так как оператор $\hat{F}$ трансляционно инвариантен) и минимальной энергией в классе пробных функций с волновым вектором $\mathbf{k}$. Поскольку волновой вектор и энергия нового состояния хорошо определены, естественно принять новое состояние в качестве квазичастичного возбужденного состояния.

Эту процедуру можно сформулировать в терминах теории ферми-жидкости аналогично тому, как это было сделано в теории почти локализованной ферми-жидкости [67]. Изменение энергии системы при слабом отклонении функции распределения от равновесного можно представить как

$$\delta E = \varepsilon_0 \sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial q}{\partial y_{\lambda}} \frac{\partial y_{\lambda}}{\partial n_{\sigma}} \delta n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\varepsilon_0 \frac{\partial q}{\partial x} + U \right) \frac{\partial x}{\partial n_{\sigma}} \delta n_{\mathbf{k}\sigma} + q \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^0 \delta n_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_0 \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial q}{\partial n_{\sigma}} \delta n_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (58)$$

где $\delta n_{\mathbf{k}\sigma}$ — вариация функции распределения, $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^0 = \partial \varepsilon_0 / \partial n_{\mathbf{k}\sigma}$ — спектр возбуждений некоррелированной системы частиц, т.е. при $U = 0$. Индекс λ пробегает значения, соответствующие независимым переменным. Нетрудно заметить, что первое и второе слагаемые обращаются в нуль в силу условий минимума энергии основного состояния по вариационным параметрам. Оставшееся выражение полностью совпадает с выражением, полученным в рамках почти локализованной ферми-жидкости [67]:

$$\delta E = q \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^0 \delta n_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_0 \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial q}{\partial n_{\sigma}} \delta n_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (59)$$

Первое слагаемое в (59) представляет собой спектр системы невзаимодействующих частиц, "сжатый" фактором q . Второе слагаемое было интерпретировано в теории почти локализованной ферми-жидкости для ^3He как член, отвечающий взаимодействию в теории Ландау [67]. Действительно, частная производная в этом слагаемом описывает изменение функции распределения. Для жидкого ^3He это "взаимодействие" является переменным при изменении внешнего давления, плотности и т.д. Для кристаллических тел величина $\varepsilon_0 \partial q / \partial n_{\sigma}$ постоянна. Более того, видно, что она не зависит от волнового вектора. Таким образом, в нашем случае второй член в выражении (59) описывает просто смещение спектра на постоянную величину и является несущественным. Окончательно квазичастичный спектр можно представить как

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = q \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^0. \quad (60)$$

Спектр сужен множителем q . Плотность состояний и эффективная масса увеличивается пропорционально q^{-1} . На рисунке 13 приведена зависимость от U для эффективной массы электронов в парамагнитной фазе модели Хаббарда с половинным заполнением. По форме квазичастичный спектр (60) совпадает со спектром, полученным в методе вспомогательных бозонов [64] и в теории почти локализованной ферми-жидкости [102, 103].

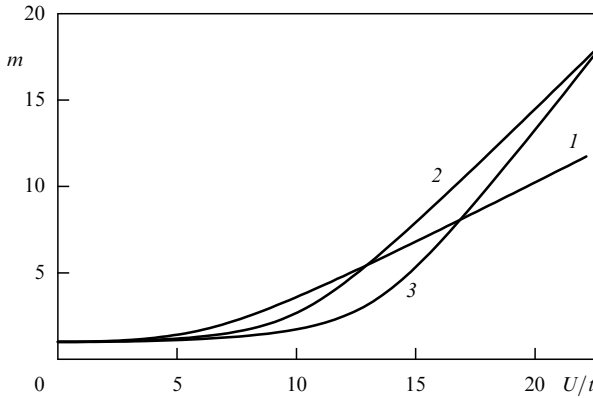


Рис. 13. Эффективная масса квазичастиц в модели Хаббарда в ПМ фазе: 1 — одномерная цепочка, 2 — квадратная решетка, 3 — простая кубическая решетка.

Некогерентные возбуждения также можно исследовать в рамках вариационной модели. Для этого создадим возбужденное состояние $a_{i\sigma}^+|\psi\rangle$, где $|\psi\rangle$ — основное состояние коррелированной системы (28). Такое возбужденное состояние будет соответствовать внезапному включению возмущения в отличие от адиабатического включения, рассмотренного выше в формулах (58)–(60). Эволюцию возбужденного состояния $a_{i\sigma}^+|\psi\rangle$ можно исследовать, например, методом уравнений движения для функций Грина. В качестве простейшего примера рассмотрим приближение "Хаббард-I" [104]. Фактически, отличие приближения "Хаббард-I" от стандартного приближения состоит только в замене основного состояния. Вместо парамагнитного состояния невзаимодействующих фермионов мы используем $|\psi\rangle$, которое определено из вариационной процедуры и содержит в себе динамические корреляции. Заметим, что при выводе уравнений движения используются только свойства операторов рождения и уничтожения, входящих в функции Грина, поэтому уравнения движения остаются теми же, что и в работе [104]:

$$E\Gamma_{ij}^\sigma = \frac{1}{2\pi} \delta_{ij} \langle n_{i,-\sigma} \rangle + U\Gamma_{ij}^\sigma + \sum_{l \neq i} t_{il} \langle \langle n_{i,-\sigma} a_{l\sigma}; a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle_E + \sum_{l \neq i} t_{il} \left(\langle \langle a_{i,-\sigma}^+ a_{l,-\sigma} a_{i\sigma}; a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle_E - \langle \langle a_{i,-\sigma}^+ a_{l,-\sigma} a_{i\sigma}; a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle_E \right), \quad (61)$$

где $\Gamma_{ij}^\sigma = \langle \langle n_{i,-\sigma} a_{i\sigma}; a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle_E, \langle \langle \dots; \dots \rangle \rangle_E$ — функция Грина в обозначениях [104, 105]. Отличие возникает при расщеплении двухчастичных функций Грина. В приближении "Хаббард-I" последним членом в уравнении (61) пренебрегают, а третий член в правой части (61) записывают приближенно как

$$\langle \langle n_{i,-\sigma} a_{i\sigma}; a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle_E \approx \langle n_{i,-\sigma} \rangle \langle \langle a_{i\sigma}; a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle_E. \quad (62)$$

Эта запись означает отсутствие корреляций в основном состоянии между фермионами с противоположными спинами на соседних узлах решетки, что справедливо для парамагнитного состояния невзаимодействующих электронов с точностью до поправок более высокого порядка. С другой стороны, в основном состоянии $|\psi\rangle$

такие корреляции существуют. Поэтому мы должны заменить (62) на

$$\langle \langle n_{i,-\sigma} a_{i\sigma}; a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle_E \approx C \langle n_{i,-\sigma} \rangle \langle \langle a_{i\sigma}; a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle_E, \quad (63)$$

где $C = \langle n_{i,-\sigma}(1 - n_{l\sigma}) \rangle / \langle n_{i,-\sigma} \rangle \langle 1 - n_{l\sigma} \rangle$ — поправочный множитель, учитывающий БП в основном состоянии. В приближении "Хаббард-I" влияние БП на спектр возбуждений имеет чисто количественный характер. Из этого примера видно, что методы уравнений движения могут быть перенесены в вариационную модель с поправками, возникающими вследствие БП.

Представляет интерес анализ свойств системы при низких (ненулевых) температурах. Поведение пробной вариационной функции (28) при ненулевых температурах может быть исследовано в рамках вариационного кластерного метода [85]. Это требует трудоемких вычислений. С другой стороны, можно использовать менее строгий, но гораздо более простой подход, который ранее использовался для исследования термодинамики почти локализованной ферми-жидкости [102, 103]. Для вычисления свободной энергии при низкой температуре перейдем к безразмерным переменным [103]

$$\xi = \frac{2\varepsilon}{\Delta}, \quad t = \frac{2k_B T}{\Delta}, \quad h' = \frac{2h}{\Delta}, \quad f = \frac{2F}{\Delta}, \quad v = \frac{2\varepsilon_F}{\Delta}, \quad (64)$$

где Δ — ширина исходной зоны. Можно показать, что, если энергия основного состояния имеет вид (55), свободную энергию коррелированной системы можно выразить как [102, 103]

$$f_c = qf_0 + ux, \quad (65)$$

где свободная энергия некоррелированной системы

$$f_0\left(\frac{t}{q}, v\right) = \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 \rho(\xi) \times \left\{ n_{\sigma} \xi + \frac{t}{q} [n_{\sigma} \ln n_{\sigma} + (1 - n_{\sigma}) \ln(1 - n_{\sigma})] \right\} d\xi. \quad (66)$$

Здесь концентрация частиц со спином σ имеет вид

$$n_{\sigma} = \left[1 + \exp \frac{q(\xi - v_{\sigma})}{t} \right]^{-1}.$$

Считая плотность состояний известной (для одномерной цепочки и двумерной решетки она известна в аналитическом виде), можно вычислить f_0 . Вычисление f_c полностью аналогично вычислению энергии основного состояния.

4.5. Основное состояние решетки Кондо–Хаббарда

Взаимодействие электронов проводимости с решеткой локализованных состояний может приводить к особому коррелированному состоянию — тяжелым фермионам [3, 59, 68, 106, 107]. Это явление наблюдается, как правило, в соединениях f-металлов. Иногда тяжелые фермионы могут возникнуть в соединениях d-металлов, например, в Li_2VO_4 [32]. Во многих случаях исходная зона проводимости в этих веществах образуется d-электронами, поэтому наряду с обменным взаимодействием электронов проводимости и локализованных электронов необходимо учитывать хаббардовское взаимодействие. Оба эти взаимодействия входят в модель

Кондо–Хаббарда [100]. Рассмотрим два сорта фермионов на решетке: подвижные, с сильным ближним взаимодействием, т.е. описываемые гамильтонианом Хаббарда, и локализованные. Если локализованное состояние имеет замороженный орбитальный момент и спин $1/2$, что типично для локализованных d-состояний, то гамильтониан Кондо–Хаббарда запишем как [100]

$$H_{\text{KH}} = H_{\text{H}} + J \sum_i S_i^{\text{L}} S_i^{\text{C}}, \quad (67)$$

где H_{H} — гамильтониан Хаббарда (8) электронов проводимости, $S_i^{\text{L(c)}}$ — оператор спина локализованного электрона (электрона проводимости) со спином $1/2$. Ниже мы предполагаем антиферромагнитный характер обмена в (67), $J > 0$. Такую систему удобно представить в виде эквивалентной решетки, показанной на рис. 11б. Заметим, что на такой решетке не возникает дополнительных замкнутых путей по сравнению с решеткой рис. 11а, поэтому в рамках вариационной теории БП мы не вносим никаких новых упрощений.

Пробная волновая функция решетки Кондо–Хаббарда имеет общий вид [101]

$$|\psi\rangle = \prod_{\lambda} g_{\lambda}^{\hat{P}_{\lambda}} \prod_{\zeta} g_{\zeta}^{\hat{P}_{\zeta}} |\varphi_{\text{c}}\rangle |\varphi_{\text{f}}\rangle = \prod_{\zeta} g_{\zeta}^{\hat{P}_{\zeta}} |\psi_{\text{c}}\rangle |\varphi_{\text{f}}\rangle. \quad (68)$$

Здесь $|\varphi_{\text{c}}\rangle$ — волновая функция невзаимодействующих электронов проводимости (см. раздел 4.1), $|\psi_{\text{c}}\rangle$ — пробная волновая функция модели Хаббарда (28), $|\varphi_{\text{f}}\rangle$ — волновая функция невзаимодействующих локализованных фермионов, $\hat{P}_{\zeta}$, g_{ζ} — набор проекционных операторов и соответствующие вариационные параметры кондовской части пробной функции.

Ниже мы выполним расчеты для ПМ фазы модели Кондо–Хаббарда с половинным заполнением зоны проводимости. Рассмотрим состояния пары локализованный электрон–электрон проводимости на одном узле решетки. Имеется три возможных конфигурации такой пары в ПМ фазе: синглетная, триплетная и с нулевым полным спином электронов проводимости на узле (табл. 3). Обозначим собственные значения операторов как r_1 , r_2 , r_0 . Для них можно записать два условия самосогласования:

$$\begin{aligned} r_0 &= \frac{1}{2} x, \\ r_1 + r_2 &= \frac{1}{2} - x. \end{aligned} \quad (69)$$

Отсюда следует, что к независимым параметрам, описывающим электроны проводимости ($x = x_1 = x_4$, y_3 , y_4 и y_7), мы должны добавить еще один независимый параметр $r = r_1$. Пробную волновую функцию решетки

Таблица 3. Конфигурации пары локализованное состояние – делокализованное состояние на одном узле на решетке Кондо–Хаббарда (спин $1/2$, ПМ фаза, половинное заполнение)

Собственное значение	Конфигурация		Кратность вырождения
	Делокализованное состояние	Локализованное состояние	
$x/2$	$S = 0$	$\uparrow$	2
r	$\uparrow$	$\downarrow$	2
$1/2 - x - r$	$\uparrow$	$\uparrow$	2

Кондо–Хаббарда в этом случае запишем как

$$|\psi_{\text{KH}}\rangle = g_r^{\beta_r \hat{R}} |\psi_{\text{H}}\rangle |\varphi_{\text{f}}\rangle = g_r^{\beta_r \hat{R}} g_0^{\hat{X}} g_3^{\beta_3 \hat{Y}_3} g_4^{\beta_4 \hat{Y}_4} g_7^{\beta_7 \hat{Y}_7} |\varphi_{\text{c}}\rangle |\varphi_{\text{f}}\rangle. \quad (70)$$

Здесь $|\psi_{\text{H}}\rangle$ — пробная волновая функция модели Хаббарда в парамагнитной фазе (35), $\hat{R} = -4 \sum_i S_{zi}^{\text{L}} S_{zi}^{\text{C}}, S_{zi}^{\text{C(1)}}$ — z-проекция спина. Норма пробной волновой функции может быть разделена на две части:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_{\{r, x, y_3, y_4, y_7\}} W_{\{x, r\}}^{\text{K}} W_{\{x, y_3, y_4, y_7\}}^{\text{H}} g_r^{4Lr} g_0^{2Lx} g_3^{2Ly_3} \times \\ &\times g_4^{8Ly_4} g_7^{2Ly_7} = \sum_{\{r, x, y_3, y_4, y_7\}} R_{\{r, x, y_3, y_4, y_7\}}, \end{aligned} \quad (71)$$

где $W^{\text{K(H)}}$ — кондовская (хаббардовская) часть W . W^{H} известна (см. выражение (43)), а кондовская часть легко вычисляется:

$$W^{\text{K}} = \frac{(2xL)!}{[(xL)!]^2} \left\{ \frac{[L(1/2 - x)]!}{(rL)! [(1/2 - x - r)L]!} \right\}^2. \quad (72)$$

Далее осуществляем поиск глобального максимума аналогично процедуре раздела 4.3 и получаем уравнения $\partial(\ln R)/\partial \eta_{\lambda} = 0$, где $\eta_{\lambda} = r, x, y_3, y_4, y_7$. Уравнения для y_3, y_4, y_7 остаются теми же, что и для модели Хаббарда (49), для оставшихся параметров имеем

$$\begin{aligned} g_0 &= \frac{1/2 - x}{2\sqrt{r(1/2 - x - r)}} \left(\frac{1/2 - x}{x} \right)^{z-1} \times \\ &\times \left(\frac{x - y_3 - 2y_4}{1/2 - x - y_7 - 2y_4} \right)^{z/2}, \quad (73) \\ g_r &= \left(\frac{r}{1/2 - x - r} \right)^{1/4}. \end{aligned}$$

Поскольку при перескоке электрона проводимости изменяются конфигурации пар электрон проводимости – локализованный электрон на одном узле, матрица плотности хаббардовских членов (54) изменяется. Теперь вместо (54) мы получаем [101]

$$\begin{aligned} \rho_{\text{H}} &= 4 \left[2y_4(a_1 a_2)^{z-1} b_1 b_2 + \right. \\ &\left. + \frac{y_3 g_7}{g_0 g_3} a_1^{2(z-1)} b_2^2 + \frac{y_7 g_0 g_3}{g_7} a_2^{2(z-1)} b_1^2 \right], \end{aligned} \quad (74)$$

где

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{r}{g_r} + g_r \left(\frac{1}{2} - x - r \right), \\ b_2 &= \frac{1}{2} (g_r + g_r^{-1}). \end{aligned}$$

После прямых вычислений zz и спин-флип члены в матрице плотности примут вид

$$\rho_{zz} = -\frac{1}{2} \left(2r + x - \frac{1}{2} \right), \quad (75)$$

$$\rho_{\pm} = -r \frac{2y_4 + y_6 g_7 + y_7 g_7^{-1}}{(1/2 - x)^z}.$$

Полную энергию системы фермионов можно представить в форме (55)

$$E = \frac{1}{L} \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = qe_0 + xU + J(\rho_{zz} + \rho_{\pm}), \quad (76)$$

где $q = \rho_H / \rho_H^0$, ρ_H^0 — значение хаббардовской части матрицы плотности при $U = 0$. Далее определяем энергию основного состояния минимизацией функции (76) по переменным r, x, y_3, y_4, y_7 . На рисунках 14 и 15 приведены доля синглетов ($2r$), корреляционные функции электро-

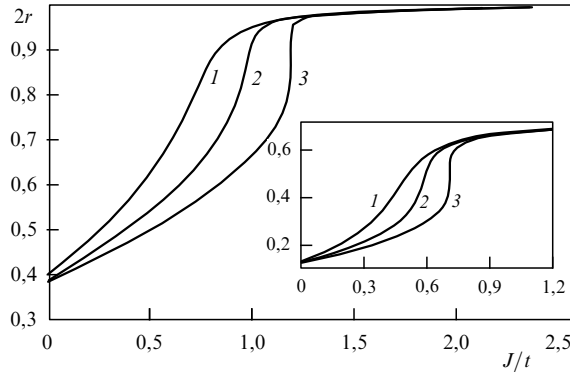


Рис. 14. Доля кондо-синглетов $2r$ в модели Кондо–Хаббарда со спином $1/2$ ($U = 0,5U_C$): 1 — одномерная цепочка, 2 — квадратная решетка, 3 — простая кубическая решетка. На вставке: то же самое для f-спина $5/2$ [101].

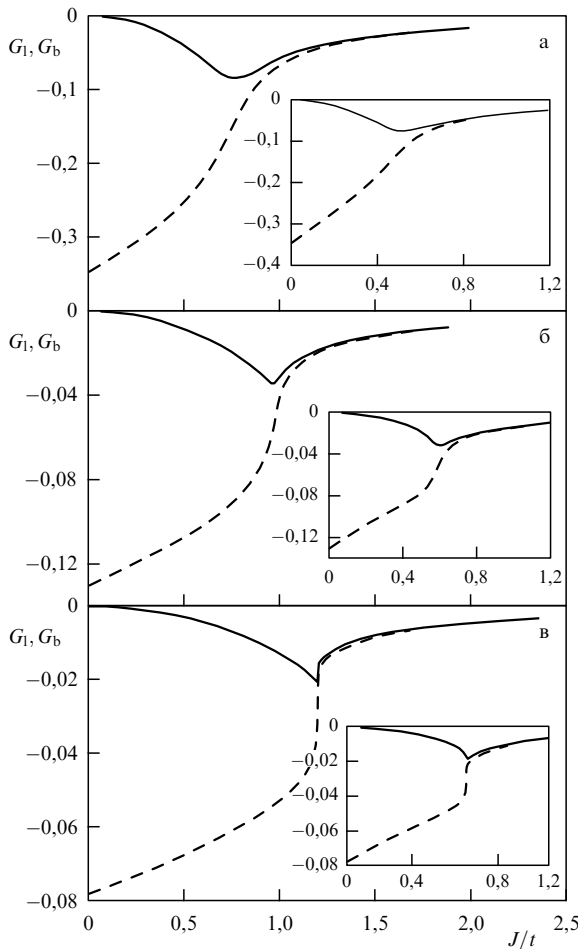


Рис. 15. Корреляционные функции G_l (сплошная линия) и G_b (штриховая линия) в модели Кондо–Хаббарда со спином $1/2$ ($U = 0,5U_C$): (а) одномерная цепочка, (б) квадратная решетка, (в) простая кубическая решетка. На вставке: то же самое для f-спина $5/2$ [101].

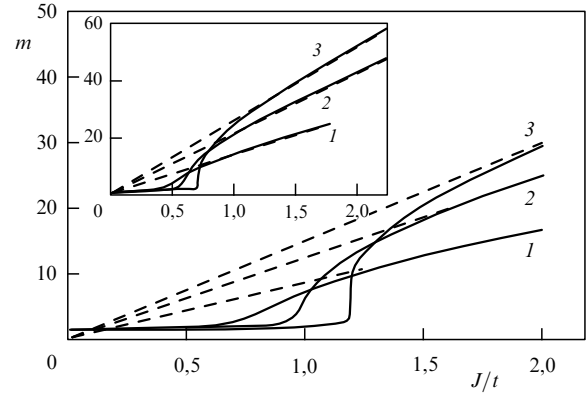


Рис. 16. Эффективная масса квазичастиц в модели Кондо–Хаббарда спина $1/2$ при $U = 0,5U_C$ (сплошная линия): 1 — одномерная цепочка, 2 — квадратная решетка, 3 — простая кубическая решетка. На вставке: то же самое для f-спина $5/2$ [101].

нов проводимости

$$G_b = 2\langle S_{zi}^c S_{zj}^c \rangle' = 2(y_6 - y_7) \quad (77)$$

и пары ближайших локализованных состояний

$$G_l = 8\langle S_{zi}^c S_{zj}^c \rangle' \langle S_{zi}^l S_{zj}^l \rangle^2 = 2(y_6 - y_7)(1 - 2x - 4r)^2. \quad (78)$$

Выражение (78) получено из суперпозиционной гипотезы [1]. На рисунке 16 приведена зависимость эффективной массы квазичастиц $m = q^{-1}$ от J .

Имея в виду решетки Кондо–Хаббарда с ионами церия (Ce^{3+}), обобщим результаты, полученные выше, на решетку локализованных состояний с полным моментом $5/2$. Гамильтониан (67) формально сохраняет прежний вид, только под S_i^1 мы будем понимать полный магнитный момент (оператор f-спина [100]). Заметим также, что мы пренебрегли расщеплением мультиплета кристаллическим полем, т.е. мы предполагаем его слабым по сравнению с обменным взаимодействием J .

Составим таблицу возможных конфигураций проекций полного момента локализованного электрона и электрона проводимости на одном узле решетки (табл. 4). Вероятности появления различных конфигураций с нулевым спином электронов проводимости на узле равны в силу инвариантности по отношению к вращениям, т.е. $r_0 = x/6$. В отличие от случая локализованной

Таблица 4. Конфигурации пары локализованное состояние — делокализованное состояние на одном узле на решетке Кондо–Хаббарда (спин $5/2$, ПМ фаза, половинное заполнение)

Собственное значение	Конфигурация		Кратность вырождения
	Делокализованное состояние	Локализованное состояние	
$x/6$	$S = 0$	любое	2
r_1	$1/2$	$-5/2$	2
r_2	$1/2$	$-3/2$	2
r_3	$1/2$	$-1/2$	2
r_4	$1/2$	$1/2$	2
r_5	$1/2$	$3/2$	2
$r_6 = 1/2 - x - \sum_{i=1}^5 r_i$	$1/2$	$5/2$	2

примеси спина 1/2, у нас имеется 6 конфигураций с ненулевым спином электрона проводимости r_i . Они связаны условием нормировки

$$\sum_{i=1}^6 r_i = \frac{1}{2} - x. \quad (79)$$

Тогда только 5 параметров будут независимыми, например, r_6 будем считать зависимым. В качестве пробной вариационной функции примем естественное обобщение формулы (70) для спина 5/2. Смысл этого анзаца можно понять по аналогии с пробной функцией Гутцвиллера. Если обменное взаимодействие имеет АФМ характер, то конфигурация с антипараллельными моментами локализованного состояния и электрона проводимости $S_{zi}^1 S_{zi}^c = -6$ имеет максимальную амплитуду. По мере увеличения произведения $S_{zi}^1 S_{zi}^c$ амплитуда состояния уменьшается. Норма пробной волновой функции имеет вид

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{\{r_i, x, y_3, y_4, y_7\}} W_{\{x, r_i\}}^K W_{\{x, y_3, y_4, y_7\}}^H g_r^{4L \sum_{i=1}^6 r_i (7-2i)} \times \\ \times g_0^{2Lx} g_3^{2Ly_3} g_4^{8Ly_4} g_7^{2Ly_7}. \quad (80)$$

Кондовская часть веса конфигурации в случае $J = 5/2$ приводится к следующему виду:

$$W^K = \frac{(2xL)!}{[(xL)!]^6} \left\{ \frac{[L(1/2 - x)]!}{\prod_i (r_i L)!} \right\}^2. \quad (81)$$

Минимизация по независимым параметрам $\partial(\ln R)/\partial \eta_\lambda = 0$, где $\eta_\lambda = r_i, x, y_3, y_4, y_7$ приводит к девяти уравнениям. В частности, для пяти независимых r_i мы получаем пять уравнений

$$g_r^{4(6-i)} = \frac{r_i}{r_6}, \quad (82)$$

где $r_6 = 1/2 - x - \sum_{i=1}^5 r_i$. Отсюда видно, что в действительности имеется только один независимый параметр r_i , например, $r = r_1$. Далее путем несложных манипуляций мы получаем нелинейное уравнение, связывающее g_r и r :

$$r(1 + g_r^{-4} + g_r^{-8} + g_r^{-12} + g_r^{-16} + g_r^{-20}) = \frac{1}{2} - x. \quad (83)$$

Уравнение для g_0 принимает вид

$$g_0 = \frac{1/2 - x}{6\sqrt{rr_6}} \left(\frac{1/2 - x}{x} \right)^{z-1} \left(\frac{x - y_3 - 2y_4}{1/2 - x - y_7 - 2y_4} \right)^{z/2}. \quad (84)$$

Уравнения для y_3, y_4, y_7 опять остаются теми же, что и для модели Хаббарда (49).

Матрица плотности так же, как и для локализованной примеси спина 1/2, разделяется на хаббардовскую, zz и спин-флип части. Общий вид хаббардовского члена остается прежним (см. формулу (74)), где

$$b_1 = \frac{\sum_{i=1}^3 (g_r^{2i-1} + g_r^{1-2i})}{6}, \quad (85)$$

$$b_2 = \frac{r \sum_{i=1}^6 g_r^{-3-2i}}{1/2 - x}.$$

Путем прямых вычислений получаем zz и спин-флип члены:

$$\rho_{zz} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 r g_r^{4(1-i)} (7 - 2i), \quad (86)$$

$$\rho_{\pm} = -(1 - 2x - r g_r^{-20}) g_r^{-2}.$$

Энергия системы электронов теперь может быть записана в виде (76). Энергия основного состояния определяется минимизацией по пяти вариационным параметрам. В данном случае возникают некоторые осложнения в численном счете, поскольку параметр g_r не может быть выражен через r аналитически. В остальном, процедура аналогична случаю спина 1/2. На вставках рис. 14 и 15 приведены графики функции $2r$, корреляционных функций зонных электронов (77) и ближайших локализованных соседей:

$$G_1 = \langle S_{zi}^c S_{zj}^c \rangle' (\langle S_{zi}^c S_{zi}^1 \rangle)^2 = \frac{8}{25} (y_6 - y_7) r^2 \times \\ \times [5(1 - g_r^{-20}) + 3(g_r^{-4} - g_r^{-16}) + g_r^{-8} - g_r^{-12}]^2. \quad (87)$$

Зависимость эффективной массы $m = q^{-1}$ от J показана на вставке рис. 16.

На рисунках 14–16 отчетливо видны два типа поведения фермионов в зависимости от J . При малых J (хаббардовский режим) обменное взаимодействие слабо влияет на энергию основного состояния и эффективную массу квазичастиц. Для этого режима характерно нарастание АФМ корреляций между ближайшими соседями (G_1). Этот эффект возникает, поскольку АФМ корреляции зонных электронов существуют даже при $J = 0$ (хаббардовские корреляции). Тогда при малых J состояния локализованных электронов как бы повторяют зонные корреляции. По мере роста J зонные АФМ корреляции подавляются, и происходит переход к новому режиму (кондо-решетка). При больших J происходит быстрый рост эффективной массы квазичастиц, подавление АФМ корреляций как зонных, так и локализованных состояний. Энергия основного состояния стремится к пределу связанных кондо-синглетов (для спина 1/2 он равен $-(3/4)J$). На рисунке 14 видно, что доля синглетов ($2r$) для случая спина 1/2 стремится к 1. В случае спина 5/2 функция $2r$ стремится к пределу < 1 . Это происходит потому, что в основное состояние пары локализованных спинов $S = 5/2$ и $S = 1/2$, связанных гейзенберговским обменом, наряду с состояниями $|S_z^1 = 5/2\rangle |S_z^b = -1/2\rangle$ и $|S_z^1 = -5/2\rangle |S_z^b = 1/2\rangle$ входят, хотя и с меньшими весами, состояния вида $|S_z^1 = 3/2\rangle |S_z^b = -1/2\rangle$, $|S_z^1 = -3/2\rangle |S_z^b = 1/2\rangle$ и т.д. Тенденция к развитию АФМ корреляций между локализованными состояниями при малых J и их подавление при больших J характерно для диаграммы Дониаха [47]. Однако интересно отметить, что мы не вводили РККИ взаимодействие в нашу схему, т.е. природа немонотонной зависимости АФМ корреляций ближайших локализованных соседей отличается от предложенной в работе [47]. Для построения полной физической картины в дальнейшем необходимо рассмотреть также АФМ фазу кондо-решетки.

В гамильтониан (67) можно включить кристаллическое поле для спина $S = 5/2$. В общем случае, когда кристаллическое поле нельзя считать ни сильным, ни слабым по сравнению с обменным взаимодействием,

² Это связано с тем, что в пробной функции мы использовали только один параметр g_r .

приходится вводить дополнительные вариационные параметры. Например, кристаллическое поле кубической симметрии расщепляет конфигурацию $4f^1$ иона Ce^{+3} на дублет Γ_7 и квадруплет Γ_8 . Тогда необходим один дополнительный вариационный параметр, чтобы управлять относительной заселенностью этих двух уровней. Модель (67) спина $1/2$ может быть применена к анализу тяжелых фермионов в Li_2VO_4 . Как уже отмечалось, расчеты электронной структуры [34] показывают, что состояния a_{1g} спина $1/2$ могут считаться локализованными, а состояния e_g реализуют полузаполненную d -зону. За счет правила Хунда возникает сильное ферромагнитное обменное взаимодействие на одном узле J_H [34]. Принимая исходные параметры из расчетов электронной структуры методом $\text{LDA} + U$ [34]: $U = 3$ эВ, ширина зоны проводимости $\Delta = 2$ эВ, $J = 1$ эВ, мы получаем коэффициент перенормировки эффективной массы порядка $q^{-1} \propto 100$, что согласуется с экспериментальными данными [32, 33]. Заметим также, что в модели Хаббарда при тех же параметрах мы получаем значительно более низкие значения эффективной массы.

5. Заключение

Эксперименты по магнитному рассеянию нейтронов указывают на существование ближнего (нелокального) порядка практически во всех сильно коррелированных системах: классических сильно коррелированных металлах, соединениях с тяжелыми фермионами, купратных высокотемпературных сверхпроводниках. При разрушении сильно коррелированного состояния магнитным полем, температурой и прочими факторами, как правило, исчезает и БП. Сильные ближние корреляции вряд ли возможно рассматривать как квазичастичные возбуждения, так как они плохо определены в импульсном пространстве и быстро распадаются во времени.

Методы исследования нелокальных корреляций в квантовой химии (малые кластеры и молекулы) и в физике твердого тела (кристаллические твердые тела) принципиально различны. В первом случае хорошие результаты дают разложения по слабо возбужденным состояниям. Во втором необходима многочастичная теория, учитывающая БП. В обзоре показано, что микроскопические модели, опирающиеся на решения для бесконечномерных решеток (метод вариационного Монте-Карло, разложение $1/D + 1/D^2$ пробной волновой функции Гутцвиллера, ДТСП) существенно недооценивают ближние нелокальные корреляции в двух- и трехмерных решетках.

Развита вариационная теория, которая содержит в явном виде вариационные параметры, отвечающие БП. В пределе бесконечномерной решетки решение, полученное в модели Хаббарда, стремится к решению Гутцвиллера, т.е. является практически точным. В противоположном пределе одномерной цепочки вариационная теория БП в АФМ фазе дает решение, очень близкое к точному решению [13]. При $U \rightarrow 0$ предлагаемая теория переходит в зонный предел, при $U \rightarrow \infty$ при половинном заполнении она хорошо согласуется с результатами модели Гейзенберга. Вариационная теория, содержащая параметры БП, дает существенно более низкую энергию основного состояния в парамагнитной фазе модели Хаббарда, чем метод вариационного Монте-Карло [20],

что указывает на существенную роль нелокальных корреляций. Когерентные возбужденные состояния образуют узкую квазичастичную зону, определяющую термодинамические свойства сильно коррелированной системы при низких температурах.

Расчеты, выполненные в рамках модели Кондо–Хаббарда, демонстрируют развитие когерентного состояния с тяжелыми фермионами. Выделены два типа поведения (хаббардовский и кондо-решетка). В моделях Хаббарда и Кондо–Хаббарда корреляции большего радиуса, чем расстояние между ближайшими соседями, подчиняются суперпозиционной гипотезе [1]. Поэтому их затухание в координатном пространстве происходит по экспоненциальному закону, что согласуется с экспериментальными данными, обсуждавшимися в разделе 2. Заметим, что в случае решетки Кондо–Хаббарда это неочевидный результат, так как РККИ взаимодействие между локализованными состояниями спадает по степенному, а не по экспоненциальному закону.

Предложенная вариационная теория легко обобщается на более сложные модели. Например, для того, чтобы перейти от модели Хаббарда в парамагнитной фазе к расширенной модели Хаббарда U – J , которая содержит дополнительно обменное изинговское взаимодействие между соседними узлами, надо добавить в выражение (55) всего одно слагаемое: $2J_m(y_7 - y_6)$, где J_m — константа взаимодействия. Основной проблемой при усложнении моделей является увеличение числа вариационных параметров. Расчеты для 4–7 вариационных переменных могут проводиться на персональном компьютере. Дальнейшее увеличение числа переменных требует больших вычислительных ресурсов. Поэтому большой интерес представляют упрощенные модели, например, t – J -модель (27). Поскольку в t – J -модели имеется 3 состояния узла, то всего возможно 9 конфигураций пары узлов. С учетом условий нормировки и самосогласованности число независимых вариационных параметров уменьшается до 7 в любом случае (произвольное заполнение, ферромагнитная и антиферромагнитная фазы, магнитное поле и др.). Другим путем преодоления проблемы большого числа вариационных параметров является использование численных методов, например, метода вариационного Монте-Карло, но на пробной волновой функции (28).

Ряд вопросов, касающихся предложенной выше модели БП, остаются открытыми. Это относится к спектрам квазичастичных возбуждений и термодинамике БП. Выше мы лишь наметили возможные пути их исследования. В обзоре мы не затрагивали проблемы сверхпроводимости в вариационной модели, так как эта проблема заслуживает отдельного исследования. Сверхпроводящие фазы могут быть также исследованы в рамках теории, представленной выше, при соответствующем выборе исходной волновой функции и набора операторов $\hat{Y}_\lambda$.

Автор благодарен Дж. Бруксу (J. Brooks) и В. Льюису (W. Lewis) за внимание к работе и неоценимую поддержку. Автор признателен П. Фульде (P. Fulde) за гостеприимство во время пребывания в Институте комплексных систем Макса Планка (Max-Planck-Institut für Komplexer Systeme). Работа частично поддержана Международным научно-техническим центром (проект № 829).

Список литературы

1. Займан Д М *Модели беспорядка: Теоретическая физика одно-одно неупорядоченных систем* (М.: Мир, 1982)
2. Мотт Н Ф *Переходы металл–изолятор* (М.: Наука, 1979)
3. Hewson A C *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1997)
4. Плакида Н М *Высокотемпературные сверхпроводники* (М.: Международная программа образования, 1996)
5. Bao W et al. *Phys. Rev. B* **58** 12727 (1998); cond-mat/9804320
6. Rossat-Mignod J et al. *J. Magn. Magn. Mater.* **76–77** 376 (1988)
7. Протогенов А П *УФН* **162** (7) 1 (1992)
8. Вальков В В, Овчинников С Г *Квазичастицы в сильно коррелированных системах* (Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001)
9. Изюмов Ю А *УФН* **165** 403 (1995)
10. Овчинников С Г *УФН* **167** 1043 (1997)
11. Senatore G, March N H *Rev. Mod. Phys.* **66** 445 (1994)
12. Georges A et al. *Rev. Mod. Phys.* **68** 13 (1996)
13. Lieb E H, Wu F Y *Phys. Rev. Lett.* **20** 1445 (1968)
14. Gebhard F *The Mott Metal-Insulator Transition: Models and Methods* (New York: Springer-Verlag, 1997)
15. Gutzwiller M C *Phys. Rev.* **134** A923 (1964); **137** A1726 (1965)
16. Зайцев Р О *ЖЭТФ* **75** 2361 (1978)
17. Metzner W, Vollhardt D *Phys. Rev. Lett.* **59** 121 (1987)
18. Metzner W, Vollhardt D *Phys. Rev. Lett.* **62** 324 (1989)
19. Metzner W Z. *Phys. B: Cond. Mat.* **77** 253 (1989)
20. Yokoyama H, Shiba H J. *Phys. Soc. Jpn.* **56** 1490, 3582 (1987)
21. Kudasov Yu B *Phys. Lett. A* **245** 153 (1998)
22. Кудасов Ю Б *ЖЭТФ* **117** 624 (2000)
23. Мория Т *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами* (М.: Мир, 1988)
24. Raymond S et al. *J. Low Temp. Phys.* **109** 205 (1997)
25. Kuwamoto H, Honig J M, Appel J *Phys. Rev. B* **22** 2626 (1980)
26. Бугаев А А, Захарченя Б П, Чудновский Ф А *Фазовый переход металл–полупроводник и его применение* (Л.: Наука, 1979)
27. Brinkman W F, Rice T M *Phys. Rev. B* **2** 4302 (1970)
28. Bao W et al. *Phys. Rev. Lett.* **71** 766 (1993)
29. Park J-H et al. *Phys. Rev. B* **61** 11506 (2000)
30. Bao W et al. *J. Magn. Magn. Mater.* **177–181** 283 (1998)
31. Kondo S et al. *Phys. Rev. Lett.* **78** 3729 (1997)
32. Johnston D C *Physica B* **281** 21 (2000); cond-mat/9910404
33. Urano C et al. *Phys. Rev. Lett.* **85** 1052 (2000)
34. Anisimov V I et al. *Phys. Rev. Lett.* **83** 364 (1999); cond-mat/9903372
35. Fulde P et al., cond-mat/0101455
36. Lee S-H et al. *Phys. Rev. Lett.* **86** 5554 (2001)
37. Stewart G R, Fisk Z, Wire M S *Phys. Rev. B* **30** 482 (1984)
38. Tsujii H et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 5407 (2000)
39. Aeppli G et al. *Phys. Rev. Lett.* **57** 122 (1986)
40. Aeppli G, Busher E, Mason T E, in *Physical Phenomena at High Magnetic Fields* (Eds E Manousakis et al.) (Redwood City, Calif.: Addison-Wesley, 1992) p. 175
41. Aeppli G et al. *Phys. Rev. Lett.* **58** 808 (1987)
42. Goldman A I et al. *J. Magn. Magn. Mater.* **63–64** 380 (1987)
43. Bernhoeft N R, Lonzarich G G *J. Phys.: Condens. Matter* **7** 7325 (1995)
44. Regnault L P et al. *Phys. Rev. B* **38** 4481 (1988)
45. Broholm C et al. *Phys. Rev. Lett.* **58** 917 (1987)
46. Walter U, Wohleben D, Fisk Z Z. *Phys. B: Cond. Mat.* **62** 235 (1986)
47. Doniach S *Physica B + C* **91** 231 (1977)
48. Kambe S et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** 3294 (1996)
49. von Löhneysen H J. *Phys.: Condens. Matter* **8** 9689 (1996)
50. Садовский М В *УФН* **171** 539 (2001)
51. Mason T E, cond-mat/9812287
52. Birgeneau R J et al., in *Mechanisms of High Temperature Superconductivity* (Springer Ser. in Materials Sci., Vol. 11, Eds H Kamimura, A Oshiyama) (Berlin: Springer-Verlag, 1989) p. 120
53. Bourges Ph "Spin dynamics in high- T_c cuprates", in *19th General Conf. of the Condensed Matter Division of the European Physical Society, Brighton, UK, 7–11 April 2002*, Europhysics Conf. Abstracts Vol. 26A (2002) p. 41; cond-mat/0009373
54. Bourges Ph et al., cond-mat/0006085
55. Fawcett E et al. *Phys. Rev. Lett.* **61** 558 (1988)
56. Hayden S M et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 999 (2000); cond-mat/9911442
57. Изюмов Ю А, Кацнельсон М И, Скрябин Ю Н *Магнетизм коллективизированных электронов* (М.: Физматлит, 1994)
58. Sanchez-Castro C, Bedell K S, Cooper B R *Phys. Rev. B* **47** 6879 (1993)
59. Fazekas P *Lecture Notes on electron Correlation and Magnetism* (Singapore: World Scientific, 1999)
60. Coqblin B et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (Suppl. B) 64 (1996)
61. Lacroix C et al. *Physica B* **230–232** 503 (1997)
62. Rappoport T G, Figueira M S, Continentino M A *Phys. Lett. A* **264** 497 (2000); cond-mat/9904221
63. Fye R M, Hirsch J E *Phys. Rev. B* **40** 4780 (1989)
64. Kotliar G, Ruckenstein A E *Phys. Rev. Lett.* **57** 1362 (1986)
65. Trapper U, Ihle D, Fehske H *Phys. Rev. B* **52** R11553 (1995)
66. Ogawa T, Kanda K, Matsubara T *Prog. Theor. Phys.* **53** 614 (1975)
67. Vollhardt D *Rev. Mod. Phys.* **56** 99 (1984)
68. Fulde P *Electron Correlations in Molecules and Solids* 3rd ed. (Berlin: Springer-Verlag, 1995)
69. Gebhard F, Vollhardt D *Phys. Rev. Lett.* **59** 1472 (1987); *Phys. Rev. B* **38** 6911 (1988)
70. Gebhard F *Phys. Rev. B* **41** 9452 (1990)
71. Harris A B, Lange R V *Phys. Rev.* **157** 295 (1967)
72. Chao K A, Spalek J, Oles A M *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10** L271 (1977)
73. Gros C, Joynt R, Rice T M *Phys. Rev. B* **36** 381 (1987)
74. Изюмов Ю А *УФН* **167** 465 (1997)
75. Horsch P, Fulde P Z. *Phys. B: Cond. Mat.* **36** 23 (1979)
76. Stollhoff G, Fulde P Z. *Phys. B: Cond. Mat.* **29** 231 (1978)
77. Stollhoff G, Fulde P Z. *Phys. B: Cond. Mat.* **26** 257 (1977)
78. Razafimandimby H A Z. *Phys. B: Cond. Mat.* **49** 33 (1982)
79. Kubo R J. *Phys. Soc. Jpn.* **17** 1100 (1962)
80. Stollhoff G, Fulde P J. *Chem. Phys.* **73** 4548 (1980)
81. Rościszewski K, Chaumet M, Fulde P *Chem. Phys.* **143** 47 (1990)
82. Kikuchi R *Phys. Rev.* **81** 988 (1951)
83. Kikuchi R, Brush S G *J. Chem. Phys.* **47** 195 (1967)
84. Kikuchi R *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **115** 1 (1995)
85. Morita T *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **115** 27 (1995)
86. Tanaka G, Kimura M *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **115** 207 (1995)
87. Pelizzola A *Phys. Rev. B* **61** 11510 (2000)
88. Cenedese P, Cahn J W *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **115** 95 (1995)
89. Ishii T J. *Phys. Soc. Jpn.* **69** 139 (2000)
90. Wada K, Kaburagi M *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **115** 273 (1995)
91. An G J. *Stat. Phys.* **52** 727 (1988)
92. Morita T J. *Stat. Phys.* **59** 819 (1990)
93. Hubbard J *Proc. R. Soc. London Ser. A* **281** 401 (1964)
94. Manousakis E *Rev. Mod. Phys.* **63** 1 (1991)
95. Thomas G A et al. *Phys. Rev. Lett.* **73** 1529 (1994)
96. des Cloizeaux J J. *Phys. (Paris)* **20** 606 (1959)
97. Plakida N M, Oudovenko V S *Phys. Rev. B* **59** 11949 (1999)
98. Plakida N M et al., cond-mat/0104234
99. Кудасов Ю Б *ФТТ* **43** 1491 (2001)
100. Schork T, Blawid S, Igarashi J *Phys. Rev. B* **59** 9888 (1999)
101. Кудасов Ю Б, cond-mat/0012018
102. Кудасов Ю Б *ЖЭТФ* **109** 174 (1996)
103. Кудасов Ю Б *ФТТ* **38** 1335 (1996)
104. Hubbard J *Proc. R. Soc. London Ser. A* **276** 238 (1963)
105. Зубарев Д Н *УФН* **71** 71 (1960)
106. Fulde P *Ann. Phys. (Leipzig)* **9** 871 (2000)
107. Lavagna M, Pepin C, in *Proc. of the XXXVIII Cracow School of Theoretical Physics, Zakopane, Poland, June 1–10, 1998; Acta Phys. Pol. B* **29** 3753 (1998); cond-mat/9903093

Short-range order in strongly correlated Fermi systems

Yu.B. Kudasov

Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute of Experimental Physics

prosp. Mira 37, 607188 Sarov, Nizhni-Novgorod Region, Russian Federation

Tel. (7-83130) 455-84

Fax (7-83130) 453-84

E-mail: kudasov@ntc.vniief.ru

The role of short-range order (SRO) in strongly correlated metallic systems is discussed. Neutron magnetic scattering experiments show that SRO is a universal property of such systems. Different theoretical approaches to the analysis of SRO are considered. Microscopic models based on infinite-dimensional lattice solutions (the Monte Carlo variational technique, a $1/D + 1/D^2$ expansion for the Gutzwiller trial wave function, the dynamical mean-field theory) do not correctly describe SRO in strongly correlated systems. A variational theory of SRO in Fermi systems is presented in which, in addition to Gutzwiller's variational parameter, a set of new parameters describing nonlocal short-range correlations is used.

PACS numbers: 71.10.Fd, **71.27. + a**, **71.28. + d**

Bibliography — 107 references

Received 17 July 2002