Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Д. Ф. Дигор, В. А. Москаленко, Представление Ванье для трехзонной модели Хаббарда, *ТМФ*, 2002, том 130, номер 2, 320–338

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf305>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.198.67.100

26 апреля 2023 г., 18:13:33

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ВАНЬЕ ДЛЯ ТРЕХЗОННОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Получено ячеечное представление гамильтониана $(d - p)$ -модели. Используются ортогонализированные на узлах решетки меди орбитали Ванье для дырок, принадлежащих ионам меди и кислорода. Исходным этапом вычислений является диагонализация кинетической энергии кислородных дырок и введение на этой основе двух диагонализующих орбиталей кислородных фермионов. Эти две последние моды обладают существенно различными локальными энергиями, что заметно сказывается на результатах теории. Полученный гамильтониан представлен в виде суммы главного локального вклада и возмущения, определяющего делокализацию ванье-фермионов. Определены низколежащие состояния локального гамильтониана и их энергетический спектр. Показано, что введение диагонализующих фермионов приводит к существенному понижению энергии синглета Жанга–Райса.

1. ВВЕДЕНИЕ

Со времени открытия высокотемпературной сверхпроводимости велись усиленные поиски теоретических моделей, которые могли бы ее описать. Наиболее известной особенностью высокотемпературных материалов, которая считается ответственной за явление сверхпроводимости, является наличие слоистой структуры, содержащей CuO_2 -плоскости. Именно в данных плоскостях в основном и протекает это явление. Модельный гамильтониан, описывающий движение носителей заряда в этих плоскостях, был предложен в работах [1]–[3]. В элементарной ячейке CuO_2 -плоскости содержится только одна $d_{x^2-y^2}$ -орбиталь меди и по одной p -орбитали на двух атомах кислорода,

$$p^x \left(\vec{l} = \vec{i} \pm \frac{a}{2} \hat{x} \right), \quad p^y \left(\vec{l} = \vec{i} \pm \frac{a}{2} \hat{y} \right).$$

Орбитали меди локализованы на узлах $\vec{i}$ квадратной решетки меди с постоянной a и базисными векторами $\hat{x}$ и $\hat{y}$. Орбитали кислорода локализованы на узлах $\vec{l}$. Ион Cu^{1+}

*Институт прикладной физики АН Республики Молдова, Кишинев, Молдова.
E-mail: statphys@asm.md

†Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл., Россия.
E-mail: moskalen@thsun1.jinr.ru

($3d^{10}$ -состояние) отвечает полностью заполненным d -орбиталям, а ион O^{2-} ($2p^6$ -состояние) — полностью заполненным p -орбиталям. Ниже используется дырочное представление с вакуумным состоянием, отвечающим электронному состоянию $3d^{10}2p^6$.

Гамильтониан ($d-p$)-модели принимает вид

$$H = H_d + H_p + H_{d-p}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} H_d &= \epsilon_d \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}^d + U_d \sum_i n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d, \\ H_p &= \epsilon_p \sum_{l,\sigma} n_{l\sigma}^p + t_{pp} \sum_{\langle l,l'\rangle,\sigma} p_{l,\sigma}^+ p_{l',\sigma} S_{ll'} + U_p \sum_l n_{l\uparrow}^p n_{l\downarrow}^p, \\ H_{d-p} &= t_{dp} \sum_{\langle i,l\rangle,\sigma} (d_{i,\sigma}^+ p_{l,\sigma} + \text{h.c.}) S_{il} + U_{dp} \sum_{\langle i,l\rangle} n_i^d n_l^p. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $d_{i,\sigma}(d_{i,\sigma}^+)$ и $p_{l,\sigma}(p_{l,\sigma}^+)$ — операторы уничтожения (рождения) соответственно d - и p -дырок, расположенных на узлах меди i и кислорода l и обладающих спином σ . Плотности числа дырок $n_{i\sigma}^d = d_{i,\sigma}^+ d_{i,\sigma}$, $n_i^d = n_{i\uparrow}^d + n_{i\downarrow}^d$, $n_{l\sigma}^p = p_{l,\sigma}^+ p_{l,\sigma}$, $n_l^p = n_{l\uparrow}^p + n_{l\downarrow}^p$. Через ϵ_d и ϵ_p обозначены одноузельные энергии дырок на соответствующих ионах, отсчитанные от химического потенциала системы, $\epsilon_\alpha = \bar{\epsilon}_\alpha - \mu$ ($\alpha = d, p$), U_d и U_p — энергии кулоновского отталкивания дырок на узлах меди и кислорода, соответственно, U_{dp} — энергия межузельного отталкивания. Интегралы гибридизации состояний t_{dp} и t_{pp} умножаются на специально введенные фазовые факторы S_{il} и $S_{ll'}$. Выбор этих факторов для двух соседних орбиталей соответствует выбранному нами распределению знаковых функций самих орбиталей. Здесь мы следуем работам [4]–[13]. С учетом выбранного нами фазового фактора S_{il} можно переписать вклад в (2) от ($d-p$)-гибридизации в виде взаимодействия $d_{i,\sigma}$ -орбитали меди с кислородным орбитальным кластером $\beta_{i,\sigma}$, составленным из дырок четырех ионов кислорода, окружающих центральный ион меди с индексом узла i ,

$$2t_{dp} \sum_{i,\sigma} (d_{i,\sigma}^+ \beta_{i,\sigma} + \beta_{i,\sigma}^+ d_{i,\sigma}), \quad (3)$$

где оператор уничтожения кластера $\beta_{i,\sigma}$ имеет вид

$$\beta_{i,\sigma} = \frac{1}{2} \left(p_{i+\frac{a}{2}\hat{x},\sigma}^x - p_{i+\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^y - p_{i-\frac{a}{2}\hat{x},\sigma}^x + p_{i-\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^y \right). \quad (4)$$

Эта орбиталь введена в работе [4], где было отмечено ее значение для образования локальных синглетного и триплетного состояний дырки на меди и допированных дырок на кислороде. Было показано, что этот локальный синглет, образованный дыркой на центральном ионе Cu^{2+} и дыркой на четырех окружающих атомах кислорода, имеет значительную энергию связи и движется по решетке подобно дыркам в эффективной однозонной модели Хаббарда. Авторы [4] высказали предположение о возможности описания низкоэнергетических свойств ($d-p$)-модели на основе ее редукции к более простой

эффективной однозонной модели подобно тому, как однозонная модель Хаббарда была сведена Андерсоном [14] к так называемой $(t - J)$ -модели. Данная концепция обсуждалась в работах [5]–[13] и получила свое дальнейшее развитие в работах [15]–[43].

Наш подход к данной проблеме отличается от подхода, содержащегося в цитированных выше работах. Вместо введения с самого начала кластерной орбитали (4) и связанных с ней величин мы вводим прежде всего новые кислородные орбитали, которые диагонализуют кинетическую энергию кислородных дырок. Лишь затем на этой новой основе рассматривается процесс образования связанных состояний и изучаются динамические свойства трехзонной модели. При этом удается учесть роль такой важной для теории величины, как энергия переноса дырок с ионов меди на ионы кислорода при допировании вещества.

2. ДИАГОНАЛИЗУЮЩИЕ ОРБИТАЛИ

Вернемся к гамильтониану (1) и рассмотрим ту его часть H_p^0 , которая связана с движением кислородных дырок,

$$H_p^0 = \epsilon_p \sum_{l,\sigma} p_{l,\sigma}^+ p_{l,\sigma} + t_{pp} \sum_{\langle l,l' \rangle, \sigma} p_{l,\sigma}^+ p_{l',\sigma} S_{l,l'}. \quad (5)$$

Последнее слагаемое в (5), обязанное кислород-кислородной гибридизации состояний дырок, с учетом выбранных нами фазовых факторов приобретает вид

$$\begin{aligned} t_{pp} \sum_{\langle l,l' \rangle, \sigma} p_{l,\sigma}^+ p_{l',\sigma} S_{l,l'} = & \frac{1}{2} \sum_{l,\sigma} \left\{ p_{i+\frac{a}{2}\hat{x},\sigma}^{x+} \left[-p_{i+a\hat{x}+\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^y + \right. \right. \\ & + p_{i+\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^y - p_{i-\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^y + p_{i+a\hat{x}-\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^y \left. \right] + \\ & + p_{i+\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^{y+} \left[-p_{i+\frac{a}{2}\hat{x}+a\hat{y},\sigma}^x + p_{i-\frac{a}{2}\hat{x}+a\hat{y},\sigma}^x - p_{i-\frac{a}{2}\hat{x},\sigma}^x + p_{i+\frac{a}{2}\hat{x},\sigma}^x \right] + \\ & + p_{i-\frac{a}{2}\hat{x},\sigma}^{x+} \left[-p_{i+\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^y + p_{i-a\hat{x}+\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^y - p_{i-a\hat{x}-\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^y + p_{i-\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^y \right] + \\ & \left. + p_{i-\frac{a}{2}\hat{x},\sigma}^{y+} \left[-p_{i+\frac{a}{2}\hat{x},\sigma}^x + p_{i-\frac{a}{2}\hat{x},\sigma}^x - p_{i-\frac{a}{2}\hat{x}-a\hat{y},\sigma}^x + p_{i+\frac{a}{2}\hat{x}-a\hat{y},\sigma}^x \right] \right\}. \quad (6) \end{aligned}$$

Перейдем к фурье-представлению для дырочных операторов p^x и p^y , используя пространство волновых векторов $\vec{k}$ зоны Бриллюэна решетки лишь одних ионов меди,

$$\begin{aligned} p_{i\pm\frac{a}{2}\hat{x},\sigma}^x &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}(\vec{R}_i \pm \frac{a}{2}\hat{x})} p_{\vec{k},\sigma}^x, \\ p_{i\pm\frac{a}{2}\hat{y},\sigma}^y &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}(\vec{R}_i \pm \frac{a}{2}\hat{y})} p_{\vec{k},\sigma}^y. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь N – число ионов решетки меди. Компоненты волнового вектора $\vec{k} = (k_x, k_y)$ меняются в пределах от $-\pi/a$ до π/a , где a – постоянная решетки. В $\vec{k}$ -представлении оператор орбитали кислородного кластера (4)

$$\beta_{i,\sigma} = \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_i} (-p_{\vec{k},\sigma}^x S_x(\vec{k}) + p_{\vec{k},\sigma}^y S_y(\vec{k})), \quad (8)$$

где $S_x(\vec{k}) = \sin(k_x a/2)$ и $S_y(\vec{k}) = \sin(k_y a/2)$. В представлении волновых векторов оба слагаемых энергии (5) кислородных дырок имеют вид

$$\epsilon_p \sum_{l,\sigma} p_{l,\sigma}^+ p_{l,\sigma} = \epsilon_p \sum_{\vec{k},\sigma} (p_{\vec{k},\sigma}^{x+} p_{\vec{k},\sigma}^x + p_{\vec{k},\sigma}^{y+} p_{\vec{k},\sigma}^y), \quad (9)$$

$$t_{pp} \sum_{\langle l,l' \rangle, \sigma} p_{l,\sigma}^+ p_{l',\sigma} S_{l,l'} = 4t_{pp} \sum_{\vec{k},\sigma} S_x S_y (p_{\vec{k},\sigma}^{x+} p_{\vec{k},\sigma}^y + p_{\vec{k},\sigma}^{y+} p_{\vec{k},\sigma}^x). \quad (10)$$

Каноническое преобразование, которое диагонализует эти слагаемые, имеет вид

$$\begin{aligned} p_{\vec{k},\sigma}^x &= u(\vec{k}) a_{\vec{k},\sigma} + v(\vec{k}) b_{\vec{k},\sigma}, \\ p_{\vec{k},\sigma}^y &= -v^*(\vec{k}) a_{\vec{k},\sigma} + u^*(\vec{k}) b_{\vec{k},\sigma}. \end{aligned} \quad (11)$$

Коэффициенты преобразования (11) подчиним условиям

$$|u(\vec{k})|^2 + |v(\vec{k})|^2 = 1, \quad (u^*(\vec{k}))^2 = (v(\vec{k}))^2. \quad (12)$$

Второе условие (12) следует из необходимости диагонализации оператора (10). Фактически оба слагаемых в (5) диагонализуются независимо. Тем самым коэффициенты преобразования не зависят от величины энергии перескока t_{pp} . В новых амплитудах $a_{\vec{k},\sigma}$ и $b_{\vec{k},\sigma}$ оператор кинетической энергии принимает вид

$$\begin{aligned} H_p^0 &= \sum_{\vec{k},\sigma} \left\{ \epsilon_p (a_{\vec{k},\sigma}^+ a_{\vec{k},\sigma} + b_{\vec{k},\sigma}^+ b_{\vec{k},\sigma}) + \right. \\ &\quad \left. + 4t_{pp} S_x S_y (u(\vec{k}) v(\vec{k}) + u^*(\vec{k}) v^*(\vec{k})) (b_{\vec{k},\sigma}^+ b_{\vec{k},\sigma} - a_{\vec{k},\sigma}^+ a_{\vec{k},\sigma}) \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

Из условий (12) следует равенство модулей коэффициентов преобразования $|u(\vec{k})| = |v(\vec{k})| = 1/\sqrt{2}$, однако сохраняется произвол в выборе их фазовых множителей. Уменьшая этот произвол, потребуем, чтобы при $t_{pp} > 0$ выполнялось условие

$$uv + u^* v^* = \text{sgn}(S_x S_y). \quad (14)$$

В результате для оператора энергии кислородных дырок получаем

$$H_p^0 = \sum_{\vec{k}, \sigma} \left\{ \epsilon_a(\vec{k}) a_{\vec{k}, \sigma}^+ a_{\vec{k}, \sigma} + \epsilon_b(\vec{k}) b_{\vec{k}, \sigma}^+ b_{\vec{k}, \sigma} \right\}, \quad (15)$$

$$\epsilon_{a,b}(\vec{k}) = \epsilon_p \pm 4t_{pp} |S_x(\vec{k}) S_y(\vec{k})|.$$

Таким образом, гибридизация кислородных дырок привела к образованию двух подзон, одна из которых $\epsilon_a(\vec{k})$ лежит ниже, а вторая $\epsilon_b(\vec{k})$ – выше локального кислородного уровня ϵ_p . Оставшийся произвол в выборе фазовых множителей коэффициентов $u(\vec{k})$, $v(\vec{k})$ может быть использован для установления наиболее удобной связи между кластерной орбиталью и диагонализующими фермионами. Сделаем следующий окончательный выбор коэффициентов $u(\vec{k})$, $v(\vec{k})$:

$$u(\vec{k}) = \frac{i}{\sqrt{2}} \operatorname{sgn}(S_x(\vec{k})), \quad v(\vec{k}) = -\frac{i}{\sqrt{2}} \operatorname{sgn}(S_y(\vec{k})). \quad (16)$$

Если мы введем ортогонализированные по узлам решетки Ванье амплитуды для диагонализующих фермионов

$$a_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k},\sigma} e^{-i\vec{k}\vec{R}_i},$$

$$b_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k},\sigma} e^{-i\vec{k}\vec{R}_i}, \quad (17)$$

то сможем установить линейную связь между кластерной амплитудой $\beta_{i,\sigma}$ и диагонализующими амплитудами Ванье $a_{i,\sigma}$, $b_{i,\sigma}$ и соответствующие коэффициенты связи будут меньше единицы. Тогда для неортогонализованной кластерной амплитуды $\beta_{i,\sigma}$ получаем

$$\beta_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_i} \left[a_{\vec{k},\sigma} \frac{|S_x| + |S_y|}{\sqrt{2}} + b_{\vec{k},\sigma} \operatorname{sgn}(S_x S_y) \frac{|S_y| - |S_x|}{\sqrt{2}} \right] =$$

$$= \sum_j [\lambda_a(i-j) a_{j,\sigma} + \lambda_b(i-j) b_{j,\sigma}] = \sum_j \lambda(i-j) P_{i,\sigma}, \quad (18)$$

где

$$\lambda_a(\vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \frac{|S_x| + |S_y|}{\sqrt{2}} =$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}\pi} \left[\frac{\delta_{y,0}}{\frac{1}{4} - (\frac{x}{a})^2} + \frac{\delta_{x,0}}{\frac{1}{4} - (\frac{y}{a})^2} \right],$$

$$\lambda_b(\vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \operatorname{sgn}(S_x S_y) \frac{|S_y| - |S_x|}{\sqrt{2}} =$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \left[\frac{(1 - \cos \pi \frac{x}{a}) \frac{y}{a} \cos \pi \frac{y}{a}}{\frac{x}{a} [(\frac{y}{a})^2 - \frac{1}{4}]} - \frac{(1 - \cos \pi \frac{y}{a}) \frac{x}{a} \cos \pi \frac{x}{a}}{\frac{y}{a} [(\frac{x}{a})^2 - \frac{1}{4}]} \right],$$

$$\lambda(\vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} S(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{R}}.$$
(19)

Здесь $\vec{R} = (x, y)$ – расстояние между узлами решетки меди и, следовательно, величины x/a и y/a равны целым положительным или отрицательным числам. Согласно (19) имеем $\lambda_a(0) = 2\sqrt{2}/\pi \simeq 0.900$, $\lambda_b(0) = 0$.

3. ВАНЬЕ-ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ГАМИЛЬТониАНА СИСТЕМЫ

На основании (18) гамильтониан $(d-p)$ -гибридизации приобретает вид

$$H_{d-p} = 2t_{dp}\lambda_a(0) \sum_i (d_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} + a_{i\sigma}^+ d_{i\sigma}) + \\ + 2t_{dp} \sum_{j \neq i} (d_{i\sigma}^+ [\lambda_a(i-j)a_{j\sigma} + \lambda_b(i-j)b_{j\sigma}] + \text{h.c.}). \quad (20)$$

Первое слагаемое в (20) соответствует главному локальному приближению, тогда как второе слагаемое, содержащее убывающие с удалением от центрального иона меди функции λ_a и λ_b , описывает процесс делокализации. В отличие от исходного гамильтониана этот член содержит вклады не только от ближайших соседей. Данное расширение пространств перескоков носит искусственный характер и соответствует процедуре узельной ортогонализации.

Из (19) ($\varepsilon_1, \varepsilon_2 = \pm 1$) имеем

$$\begin{aligned} \lambda_a(x = \varepsilon_1 a, y = 0) &= \lambda_a(x = 0, y = \varepsilon_2 a) = -\frac{\lambda_a(0, 0)}{6}, \\ \lambda_a(x = 2\varepsilon_1 a, y = 0) &= \lambda_a(x = 0, y = 2\varepsilon_2 a) = -\frac{\lambda_a(0, 0)}{30}, \\ \lambda_b(x = \varepsilon_1 a, y = 0) &= \lambda_b(x = 0, y = \varepsilon_2 a) = \lambda_b(x = \varepsilon_1 a, y = \varepsilon_2 a) = 0, \\ \lambda_b(x = \varepsilon_1 a, y = 2\varepsilon_2 a) &= -\lambda_b(x = 2\varepsilon_1 a, y = \varepsilon_1 a) = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \lambda_a(0, 0) \frac{4\sqrt{2}}{15\pi}, \\ \lambda_b(x = \varepsilon_1 a, y = 3\varepsilon_2 a) &= -\lambda_b(x = 3\varepsilon_1 a, y = \varepsilon_2 a) = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \lambda_a(0, 0) \frac{16\sqrt{2}}{315\pi}. \end{aligned}$$

Функция $\lambda_a(x, y)$ отлична от нуля не только на центральном узле меди, но и на его ближайших соседях, быстро спадая на следующих соседних узлах. Функция $\lambda_b(x, y)$ равна нулю как на центральном, так и на ближайших соседних к нему узлах. Она отлична от нуля на следующих за ближайшими соседями узлах $x = \varepsilon_1 a$, $y = 2\varepsilon_2 a$ или $x = 2\varepsilon_1 a$, $y = \varepsilon_2 a$ (где $\varepsilon_{1,2} = \pm 1$), затем она быстро спадает. Следовательно, существуют два канала делокализации дырок на меди, а именно, посредством их гибридизации как с $a_{i,\sigma}$ -, так и с $b_{i,\sigma}$ -орбиталями.

Перейдем сейчас к гамильтониану H_p^0 свободных кислородных дырок и перепишем его в кластерном представлении,

$$H_p^0 = \sum_{i,j',\sigma} (t_a(j-j')a_{j,\sigma}^+ a_{j',\sigma} + t_b(j-j')b_{j,\sigma}^+ b_{j',\sigma}), \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} t_{a,b}(\vec{R}) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \varepsilon_{a,b}(\vec{k}) = \varepsilon_p \delta_{\vec{R},0} \pm 4t_{pp} \tau(\vec{R}), \\ \tau(\vec{R}) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} |S_x S_y| = \frac{1}{(2\pi)^2 \left[\frac{1}{4} - \left(\frac{x}{a}\right)^2\right] \left[\frac{1}{4} - \left(\frac{y}{a}\right)^2\right]}. \end{aligned} \quad (22)$$

На основании (22) получаем

$$\tau(0) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^2 = 0.4045, \quad \varepsilon_{a,b} \equiv \varepsilon_p \mp 4t_{pp} \tau(0)$$

и, следовательно, выражение (21) может быть переписано в виде

$$H_p^0 = \sum_{j,\sigma} (\varepsilon_a a_{j,\sigma}^+ a_{j,\sigma} + \varepsilon_b b_{j,\sigma}^+ b_{j,\sigma}) - 4t_{pp} \sum_{i \neq j', \sigma} (a_{j,\sigma}^+ a_{j',\sigma} - b_{j,\sigma}^+ b_{j',\sigma}) \tau(j - j'). \quad (23)$$

Первое слагаемое в (23) представляет собой основной вклад от центрированных на узле меди амплитуд кислородных дырок, второе слагаемое описывает процесс их делокализации. Этот процесс протекает с одинаковой интенсивностью для обеих кислородных мод. Величина $\tau(\vec{R})$ быстро падает с удалением от центрального узла решетки меди. Так, например,

$$\tau(\pm a, 0) = \tau(0, \pm a) = -\frac{\tau(0, 0)}{3}, \quad \tau(\pm a, \pm a) = \frac{\tau(0, 0)}{9}.$$

Для перехода в остальных членах гамильтониана (1) к кластерному представлению выполним сначала этот переход в амплитудах кислородных дырок,

$$\begin{aligned} p_{i \pm \frac{a}{2} \hat{x}, \sigma}^x &= \sum_{\vec{j}} [a_{\vec{j}, \sigma} \mu_a^{\pm x}(\vec{i} - \vec{j}) + b_{\vec{j}, \sigma} \mu_b^{\pm x}(\vec{i} - \vec{j})], \\ p_{i \pm \frac{a}{2} \hat{y}, \sigma}^y &= \sum_{\vec{j}} [a_{\vec{j}, \sigma} \mu_a^{\pm y}(\vec{i} - \vec{j}) + b_{\vec{j}, \sigma} \mu_b^{\pm y}(\vec{i} - \vec{j})], \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$\begin{aligned} \mu_a^{\pm x}(\vec{R}) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} u(\vec{k}) e^{\mp i k_x \frac{a}{2}} = \frac{\delta_{y,0}}{\sqrt{2} \pi \left(\frac{x}{a} \pm \frac{1}{2}\right)}, \\ \mu_b^{\pm x}(\vec{R}) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} v(\vec{k}) e^{\mp i k_x \frac{a}{2}} = \frac{\mp \cos \frac{\pi x}{a} (1 - \cos \frac{\pi y}{a})}{\sqrt{2} \pi^2 \left(\frac{x}{a} \pm \frac{1}{2}\right) \left(\frac{y}{a}\right)}, \\ \mu_a^{\pm y}(\vec{R}) &= -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} v^*(\vec{k}) e^{\mp i k_y \frac{a}{2}} = -\frac{\delta_{x,0}}{\sqrt{2} \pi \left(\frac{y}{a} \pm \frac{1}{2}\right)}, \\ \mu_b^{\pm y}(\vec{R}) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} u^*(\vec{k}) e^{\mp i k_y \frac{a}{2}} = \frac{\mp \cos \frac{\pi y}{a} (1 - \cos \frac{\pi x}{a})}{\sqrt{2} \pi^2 \left(\frac{y}{a} \pm \frac{1}{2}\right) \left(\frac{x}{a}\right)}. \end{aligned} \quad (25)$$

Продолжая переход к кластерному представлению членов гамильтониана (1), рассмотрим кулоновское взаимодействие дырок на ионах кислорода. Соответствующий член гамильтониана имеет вид

$$H_p^c = U_p \sum_{\vec{i}} [p_{x\uparrow}^+ p_{x\uparrow} p_{x\downarrow}^+ p_{x\downarrow} + p_{y\uparrow}^+ p_{y\uparrow} p_{y\downarrow}^+ p_{y\downarrow}], \quad (26)$$

где для краткости использованы обозначения $p_x = p_{i+\frac{a}{2}\hat{x}}$, $p_y = p_{i+\frac{a}{2}\hat{y}}$. Подставим в правую часть (26) формулы (24) для операторов кислородных дырок:

$$\begin{aligned} H_p^c = U_p \sum_i \sum_{j_1, j_2, j_3, j_4} \bigg\{ & [a_{j_1\uparrow}^+ \mu_a^x(i-j_1) + b_{j_1\uparrow}^+ \mu_b^x(i-j_1)] \times \\ & \times [a_{j_2\uparrow} \mu_a^x(i-j_2) + b_{j_2\uparrow} \mu_b^x(i-j_2)] [a_{j_3\downarrow}^+ \mu_a^x(i-j_3) + \\ & + b_{j_3\downarrow}^+ \mu_b^x(i-j_3)] [a_{j_4\downarrow} \mu_a^x(i-j_4) + b_{j_4\downarrow} \mu_b^x(i-j_4)] + \\ & + [a_{j_1\uparrow}^+ \mu_a^y(i-j_1) + b_{j_1\uparrow}^+ \mu_b^y(i-j_1)] [a_{j_2\uparrow} \mu_a^y(i-j_2) + \\ & + b_{j_2\uparrow} \mu_b^y(i-j_2)] [a_{j_3\downarrow}^+ \mu_a^y(i-j_3) + b_{j_3\downarrow}^+ \mu_b^y(i-j_3)] \times \\ & \times [a_{j_4\downarrow} \mu_a^y(i-j_4) + b_{j_4\downarrow} \mu_b^y(i-j_4)] \bigg\}. \end{aligned} \quad (27)$$

Для выполнения суммирования по индексу узла меди воспользуемся фурье-представлениями (25) функций $\mu_{a(b)}^{x(y)}$. После этого преобразования возникает довольно громоздкое выражение, содержащее 16 членов, каждый из которых является произведением четырех фермионных операторов в ванье-представлении. Перечислим те из них, которые оказываются наиболее существенными в локальном случае, т.е. при равенстве всех индексов узлов j ,

$$\begin{aligned} H_p^c = U_p \sum_{j_1, j_2, j_3, j_4} \bigg\{ & a_{j_1\uparrow}^+ a_{j_2\uparrow} a_{j_3\downarrow}^+ a_{j_4\downarrow} \Psi^{aaaa}(j_1-j_2, j_3-j_4, j_2-j_4) + \\ & + b_{j_1\uparrow}^+ b_{j_2\uparrow} b_{j_3\downarrow}^+ b_{j_4\downarrow} \Psi^{bbbb}(j_1-j_2, j_3-j_4, j_2-j_4) + \\ & + a_{j_1\uparrow}^+ a_{j_2\uparrow} b_{j_3\downarrow}^+ b_{j_4\downarrow} \Psi^{aabb}(j_1-j_2, j_3-j_4, j_2-j_4) + \\ & + b_{j_1\uparrow}^+ b_{j_2\uparrow} a_{j_3\downarrow}^+ a_{j_4\downarrow} \Psi^{bbaa}(j_1-j_2, j_3-j_4, j_2-j_4) + \\ & + a_{j_1\uparrow}^+ b_{j_2\uparrow} b_{j_3\downarrow}^+ a_{j_4\downarrow} \Psi^{abba}(j_1-j_4, j_3-j_2, j_4-j_2) + \\ & + b_{j_1\uparrow}^+ a_{j_2\uparrow} a_{j_3\downarrow}^+ b_{j_4\downarrow} \Psi^{baab}(j_1-j_4, j_3-j_2, j_4-j_2) \bigg\}, \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\begin{aligned}
 \Psi^{aaaa}(j_1 - j_2, j_3 - j_4, j_2 - j_4) &= \frac{1}{N^3} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} e^{-i\vec{k}(\vec{j}_1 - \vec{j}_2)} \times \\
 &\times e^{-i\vec{k}'(\vec{j}_3 - \vec{j}_4) + i\vec{q}(\vec{j}_2 - \vec{j}_4)} [u^*(\vec{k})u(\vec{k} + \vec{q})u^*(\vec{k}')u(\vec{k}' - \vec{q}) + \\
 &+ v(\vec{k})v^*(\vec{k} + \vec{q})v(\vec{k}')v^*(\vec{k}' - \vec{q})], \\
 \Psi^{aabb}(j_1 - j_2, j_3 - j_4, j_2 - j_4) &= \frac{1}{N^3} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} e^{-i\vec{k}(\vec{j}_1 - \vec{j}_2)} \times \\
 &\times e^{-i\vec{k}'(\vec{j}_3 - \vec{j}_4) + i\vec{q}(\vec{j}_2 - \vec{j}_4)} [u^*(\vec{k})u(\vec{k} + \vec{q})v^*(\vec{k}')v(\vec{k}' - \vec{q}) + \\
 &+ v(\vec{k})v^*(\vec{k} + \vec{q})u(\vec{k}')u^*(\vec{k}' - \vec{q})].
 \end{aligned} \tag{29}$$

Остальные четыре коэффициента в (28) отличаются от приведенных в (29) заменой индексов a и b и функций $u(\vec{k})$ и $v(\vec{k})$ между собой. На основании определений (16) следуют равенства

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{N^3} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} u^*(\vec{k})u(\vec{k} + \vec{q})u^*(\vec{k}')u(\vec{k}' - \vec{q}) &= \frac{1}{12}, \\
 \frac{1}{N^3} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} u^*(\vec{k})u(\vec{k} + \vec{q})v^*(\vec{k}')v(\vec{k}' - \vec{q}) &= \frac{1}{16},
 \end{aligned} \tag{30}$$

которые, будучи подставлены в (29), приводят к следующим значениям локальных коэффициентов:

$$\begin{aligned}
 \Psi^{aaaa}(0, 0, 0) &= \Psi^{bbbb}(0, 0, 0) = \frac{1}{6}, \\
 \Psi^{aabb}(0, 0, 0) &= \Psi^{bbaa}(0, 0, 0) = \Psi^{abba}(0, 0, 0) = \Psi^{baab}(0, 0, 0) = \frac{1}{8}.
 \end{aligned} \tag{31}$$

Из приведенных вычислений следует, что основной вклад от кулоновского отталкивания кислородных дырок в ячейке, центрированной на узле меди, имеет вид

$$\begin{aligned}
 H_p^c &= U_a \sum_j n_{j\uparrow}^a n_{j\downarrow}^a + U_b \sum_j n_{j\uparrow}^b n_{j\downarrow}^b + \\
 &+ U_{ab} \sum_j (n_{j\uparrow}^a n_{j\downarrow}^b + n_{j\uparrow}^b n_{j\downarrow}^a - S_{j+}^a S_{j-}^b - S_{j-}^a S_{j+}^b),
 \end{aligned} \tag{32}$$

где ренормированные константы $U_a = U_b = U_p/6$ и $U_{ab} = U_p/8$. В (32) используются определения операторов числа дырок $n_{j,\sigma}^c$ и переворота спина $S_{j\pm}^c$, где $c = a, b$,

$$n_{j,\sigma}^c = c_{j,\sigma}^+ c_{j,\sigma}, \quad S_{j+}^c = c_{j\uparrow}^+ c_{j\downarrow}, \quad S_{j-}^c = c_{j\downarrow}^+ c_{j\uparrow}. \tag{33}$$

Последнее слагаемое в (32) может быть представлено в более простом виде

$$U_{ab} \sum_j (a_{j\uparrow}^+ b_{j\downarrow}^+ - a_{j\downarrow}^+ b_{j\uparrow}^+) (b_{j\downarrow} a_{j\uparrow} - b_{j\uparrow} a_{j\downarrow}), \tag{34}$$

что демонстрирует взаимодействие (a, b) -синглетных пар. Гамильтониан (26) и его ячейное локальное представление (32) коммутируют с оператором спина $\vec{S}$ кислородных дырок и его квадратом как в исходном, так и в конечном представлении. В ячейном локальном представлении оператор спина имеет вид

$$\vec{S}^{ab} = \sum_j (\vec{S}_j^a + \vec{S}_j^b), \quad (35)$$

где

$$S_{jx}^c = \frac{1}{2}(S_{j+}^c + S_{j-}^c), \quad S_{jy}^c = \frac{1}{2i}(S_{j+}^c - S_{j-}^c), \quad S_{jz}^c = \frac{1}{2}(n_{j\uparrow}^c - n_{j\downarrow}^c), \quad c = a, b. \quad (36)$$

Как видно из полученных значений энергий U_a и U_{ab} , эффективное кулоновское отталкивание a - и b -фермионов, центрированных на узле меди, существенно меньше величины кулоновского отталкивания дырок, реально происходящего на ионах кислорода. Следует заметить, что уменьшение параметров U_a и U_{ab} по отношению к U_p , как и следовало ожидать, оказалось более значительным, чем соответствующее уменьшение при использовании канонических фермионов. В работе [22] приведено значение эффективного отталкивания в этом последнем случае: $\Psi(0, 0, 0)U_p = 0.2109U_p$. В предлагаемом выше подходе $U_a = 0.1666U_p$, а величина $U_{ab} = 0.125U_p$ оказалась еще меньше. Если воспользоваться стандартной системой значений параметров, типичных для купратов и приведенных в работах [19], [22],

$$t_{dp} = 1.3 \text{ эВ}, \quad \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_d}{t_{dp}} = 2.7, \quad \frac{t_{pp}}{t_{dp}} = 0.5, \quad (37)$$

$$\frac{U_d}{t_{dp}} = 7, \quad \frac{U_p}{t_{dp}} = 3, \quad \frac{U_{dp}}{t_{dp}} = 1,$$

то можно оценить полученные значения для эффективного отталкивания U_a и U_{ab} как величины, соразмерные с энергией гибридизации дырок кислорода $U_a = t_{pp}$ и $U_{ab} = \frac{3}{4}t_{pp}$. Следовательно, оба эти эффекта должны рассматриваться одновременно. Поэтому представляется неправомерным учет кулоновского отталкивания U_p дырок на кислороде и одновременное пренебрежение матричными элементами t_{pp} межкислородного туннелирования. Наряду с эффективным ячейным гамильтонианом (32) оператор (28) содержит также межячеечные слагаемые, которые описывают процессы делокализации дырок, обусловленные кулоновским отталкиванием H_p^c дырок на кислороде. Все эти слагаемые имеют несовпадающие индексы узлов решетки меди. Следует ожидать, что нелокальные вклады в (28) в несколько раз меньше, чем локальный вклад (32), который сам по себе оказался сильно ослабленным по сравнению с реальным отталкиванием U_p . Эти нелокальные слагаемые будут в дальнейшем опущены. Одновременно будут опущены нелокальные вклады, связанные с межкислородной гибридизацией дырок.

Рассмотрим, наконец, преобразование слагаемого исходного гамильтониана (1), которое описывает кулоновское отталкивание дырок на соседних ионах меди и кислорода. Перепишем это слагаемое в виде

$$H_{d-p}^c = U_{dp} \sum_{i,\sigma,\sigma'} d_{i,\sigma}^+ d_{i,\sigma} (p_{x,\sigma'}^+ p_{x,\sigma'} + p_{-x,\sigma'}^+ p_{-x,\sigma'} + p_{y,\sigma'}^+ p_{y,\sigma'} + p_{-y,\sigma'}^+ p_{-y,\sigma'}). \quad (38)$$

Здесь используются краткие обозначения (26) для операторов $p_{x,\sigma}$ и $p_{y,\sigma}$. Подставив в (38) формулы (24) и выполнив несложные преобразования, получим выражение, содержащее операторы орбиталей, центрированных на узлах решетки меди,

$$\begin{aligned} H_{dp}^c = U_{dp} \sum_{i,j,j'} \sum_{\sigma,\sigma'} n_{i\sigma}^d [\phi^{aa}(i-j; i-j') a_{j\sigma'}^+ a_{j'\sigma'} + \phi^{ab}(i-j; i-j') a_{j\sigma'}^+ b_{j'\sigma'} + \\ + \phi^{ba}(i-j; i-j') b_{j\sigma'}^+ a_{j'\sigma'} + \phi^{bb}(i-j; i-j') b_{j\sigma'}^+ b_{j'\sigma'}]. \end{aligned} \quad (39)$$

Коэффициенты этого выражения определены следующим образом:

$$\begin{aligned} \phi^{aa}(i-j; i-j') &= \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j) - i\vec{k}'(\vec{R}_i - \vec{R}_{j'})} \times \\ &\times \left[2 \cos \frac{(k_x - k'_x)a}{2} u(\vec{k}) u(\vec{k}') + 2 \cos \frac{(k_y - k'_y)a}{2} v(\vec{k}) v(\vec{k}') \right], \\ \phi^{ab}(i-j; i-j') &= \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j) - i\vec{k}'(\vec{R}_i - \vec{R}_{j'})} \times \\ &\times \left[2 \cos \frac{(k_x - k'_x)a}{2} u(\vec{k}) v(\vec{k}') - 2 \cos \frac{(k_y - k'_y)a}{2} v(\vec{k}) u(\vec{k}') \right], \\ \phi^{bb}(i-j; i-j') &= \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j) - i\vec{k}'(\vec{R}_i - \vec{R}_{j'})} \times \\ &\times \left[2 \cos \frac{(k_x - k'_x)a}{2} v(\vec{k}) v(\vec{k}') + 2 \cos \frac{(k_y - k'_y)a}{2} u(\vec{k}) u(\vec{k}') \right], \\ \phi^{ba}(i-j; i-j') &= (\phi^{ab}(i-j'; i-j))^*. \end{aligned} \quad (40)$$

В локальном случае, т.е. при $i = j = j'$, из четырех коэффициентов (40) только первый оказывается отличным от нуля,

$$\phi^{aa} = \phi^{aa}(0, 0) = \frac{8}{\pi^2} \simeq 0.811. \quad (41)$$

Следовательно, в ячейке, центрированной на узле i , проявляется кулоновское отталкивание только между диагонализующими a_i -фермионами и d_i -дырками. Вклад от диагонализующих b_i -фермионов при этом отсутствует, как это видно из выражения

$$\begin{aligned} H_{ad}^c &= U_{ad} \sum_i n_i^d n_i^a, \\ U_{ad} &= U_{dp} \phi^{aa} = \frac{8U_{dp}}{\pi^2}, \quad n_i^\alpha = \sum_\sigma n_{i\sigma}^\alpha, \quad \alpha = a, d. \end{aligned} \quad (42)$$

Соответствующее выражение, полученное в работе [22] при использовании канонических фермионов, привело к несколько большему значению эффективной константы отталкивания, а именно $\varphi_{000}U_{dp} = 0.9180U_{dp}$.

Приведем здесь результаты вычислений коэффициентов (40), которые будут использоваться в дальнейшем. На основании значений (16) для величин $u(\vec{k})$ и $v(\vec{k})$ нетрудно получить, что

$$\begin{aligned}\varphi^{aa}(\vec{R}, \vec{R}') &= \frac{1}{\pi^2} \left\{ \frac{\delta_{x,0}\delta_{x',0}(\frac{y}{a}\frac{y'}{a} + \frac{1}{4})}{[(\frac{y}{a})^2 - \frac{1}{4}][(\frac{y'}{a})^2 - \frac{1}{4}]} + \begin{pmatrix} x \rightarrow y \\ x' \rightarrow y' \end{pmatrix} \right\}, \\ \varphi^{ab}(\vec{R}, \vec{R}') &= -\frac{1}{2\pi^3} \left\{ \frac{\delta_{x,0}[1 - \cos(\frac{\pi x'}{a})]\cos(\frac{\pi y'}{a})(\frac{y}{a} + \frac{y'}{a})}{(\frac{x'}{a})[(\frac{y}{a})^2 - \frac{1}{4}][(\frac{y'}{a})^2 - \frac{1}{4}]} - \begin{pmatrix} x \rightarrow y \\ x' \rightarrow y' \end{pmatrix} \right\}, \\ \varphi^{bb}(\vec{R}, \vec{R}') &= \frac{1}{\pi^4} \left\{ \frac{[1 - \cos(\frac{\pi x'}{a})][1 - \cos(\frac{\pi x}{a})]\cos(\frac{\pi y}{a})\cos(\frac{\pi y'}{a})}{(\frac{x}{a})(\frac{x'}{a})[(\frac{y}{a})^2 - \frac{1}{4}][(\frac{y'}{a})^2 - \frac{1}{4}]} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(\frac{y}{a}\frac{y'}{a} + \frac{1}{4} \right) - \begin{pmatrix} x \rightarrow y \\ x' \rightarrow y' \end{pmatrix} \right\}.\end{aligned}\quad (43)$$

Здесь x (x') и y (y') – проекции вектора $\vec{R}$ ($\vec{R}'$). При этом считается, что отношения x/a (x'/a), y/a (y'/a) – целые положительные или отрицательные числа. Как видно из полученных выражений, межузельная ($d-p$)-кулоновская энергия отталкивания трансформируется к ячеечному представлению без существенного своего ослабления. После выделения локальной части (42) оператор (39) может быть представлен в виде суммы этого основного слагаемого и величины, определяющей межузельные перескоки дырок,

$$H_{dp}^c = H_{ad}^c + H'_{dp}, \quad (44)$$

где H'_{dp} получается из гамильтониана (39), если в последнем опустить слагаемые с совпадающими индексами.

Данный этап вычислений завершает преобразование к ячеечному представлению тех слагаемых гамильтониана (1), которые содержат кислородные дырки, образующие кластер вокруг иона меди. После такого преобразования определяются как главные вклады, локализованные на ячейках, центрированных на узлах меди, так и межъячеечные слагаемые, содержащие, вообще говоря, дальнodelствующее туннелирование ортогонализированных ванье-фермионов. В результате исходный гамильтониан (1) может быть представлен в виде суммы основного локального вклада H^0 и слагаемого H' , определяющего процесс делокализации как d -, так и диагонализующих a - и b -дырок,

$$H = H^0 + H', \quad H^0 = \sum_i H_i^0, \quad (45)$$

где одноячеечный локальный вклад

$$H^0 = \epsilon_d \sum_{\sigma} n_{\sigma}^d + U_d n_{\uparrow}^d n_{\downarrow}^d + \epsilon_a \sum_{\sigma} n_{\sigma}^a + U_a n_{\uparrow}^a n_{\downarrow}^a + \epsilon_b \sum_{\sigma} n_{\sigma}^b + U_b n_{\uparrow}^b n_{\downarrow}^b + \\ + t_{ad} \sum_{\sigma} (d_{\sigma}^+ a_{\sigma} + a_{\sigma}^+ d_{\sigma}) + U_{ad} n_{\uparrow}^d n_{\downarrow}^a + U_{ab} (n_{\uparrow}^a n_{\downarrow}^b + n_{\downarrow}^a n_{\uparrow}^b - S_+^a S_-^b - S_-^a S_+^b). \quad (46)$$

Здесь для простоты опущен индекс i узла меди и подразумеваются равенства $U_b = U_a$, $U_{ab} = \frac{3}{4}U_a$, $\epsilon_{a,b} = \epsilon_p \mp 4t_{pp}\tau(0)$. Возмущающий гамильтониан H' имеет довольно сложный вид, так как он содержит многочисленные слагаемые, которые описывают квантовые переходы d -, a - и b -фермионов между различными ячейками. Мы выделим в качестве наиболее существенных следующие два слагаемых и опустим остальные:

$$H' = 2t_{dp} \sum_{j \neq i} [d_{i\sigma}^+ (\lambda_a(i-j)a_{j\sigma} + \lambda_b(i-j)b_{j\sigma}) + \text{h.c.}] + \\ + U_{dp} \sum_{i,j,j'}' \sum_{\sigma} n_i^d [\phi^{aa}(i-j, i-j') a_{j\sigma}^+ a_{j'\sigma} + \phi^{ab}(i-j, i-j') a_{j\sigma}^+ b_{j'\sigma} + \\ + \phi^{ba}(i-j, i-j') b_{j\sigma}^+ a_{j'\sigma} + \phi^{bb}(i-j, i-j') b_{j\sigma}^+ b_{j'\sigma}]. \quad (47)$$

Здесь штрих у суммы подразумевает отсутствие слагаемых с тремя совпадающими индексами ($i = j = j'$) узлов решетки меди. В выражение (47) не включены слагаемые, обязанные матричным элементам перескоков τ_{pp} и эффективному кулоновскому отталкиванию U_a и U_{ab} ввиду их меньшей значимости.

4. ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ ЯЧЕЕЧНОГО ГАМИЛЬТониАНА И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Как видно из выражения (46), в каждой ячейке, центрированной на узлах меди, имеются три вида сильно коррелированных фермионов, а именно d -дырки на ионах меди и диагонализующие фермионы a и b , описывающие движение кислородных дырок в CuO_2 -плоскости. Каждый из трех видов фермионов, если считать их независимыми, обладает четырьмя квантовыми состояниями $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$ с энергиями $E_0^\alpha = 0$, $E_\sigma^\alpha = \epsilon_\alpha$, $E_2^\alpha = 2\epsilon_\alpha + U_\alpha$, где $\alpha = a, b, d$. Полное число квантовых состояний ячейки, равное числу состояний независимых a -, b - и d -фермионов, есть $4^3 = 64$. Поэтому матрица гамильтониана (46), построенная на состояниях ϕ_A этих частиц, представляется довольно громоздким образованием. Индекс A квантового состояния содержит числа частиц N_a , N_b и N_d системы, их полный спин S и проекцию спина S_z . На самом деле целесообразно использовать вместо трех чисел N_α суммарное значение числа частиц состояния $N = N_a + N_b + N_d$ и два других независимых числа, скажем, N_a и N_b . Это связано с тем, что ренормированные состояния гамильтониана (46), обозначенные нами через $|E_\lambda\rangle$, являются линейными комбинациями функций ϕ_A , которые сохраняют числа

N , S и S_z , но не сохраняют отдельные значения числа частиц. Таким образом, набор квантовых чисел λ , помимо упомянутых, содержит также и дополнительные числа. На самом деле рассматриваемая матрица является квазидиагональной, и проблема определения ренормированных квантовых состояний и их энергий сводится к диагонализации субматриц с небольшим числом строк и столбцов (не большим четырех).

Для непосредственного определения ренормированных величин воспользуемся методом канонического преобразования, предложенным в работах [44]–[46] по периодической модели Андерсона. Метод основан на введении ортонормированной системы функций $\Phi_n(E_\lambda)$, удовлетворяющей матричному уравнению

$$(\hat{H}^0 - E_\lambda \hat{I}) \begin{pmatrix} \Phi_1(E_\lambda) \\ \vdots \\ \Phi_n(E_\lambda) \end{pmatrix} = 0 \quad (48)$$

и условиям ортонормировки

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda} \Phi_n^*(E_\lambda) \Phi_m(E_\lambda) &= \delta_{nm}, \\ \sum_n \Phi_n^*(E_\lambda) \Phi_n(E_{\lambda'}) &= \delta_{\lambda\lambda'}. \end{aligned} \quad (49)$$

Здесь $\hat{H}^0$ – матрица гамильтониана, построенная на функциях независимых частиц, $\hat{I}$ – единичный оператор.

Связь между исходными Ψ_n и ренормированными $|E_\lambda\rangle$ состояниями имеет вид

$$\Psi_n = \sum_{\lambda} \Phi_n(E_\lambda) |E_\lambda\rangle, \quad |E_\lambda\rangle = \sum_n \Phi_n^*(E_\lambda) \Psi_n. \quad (50)$$

Перейдем к детальному анализу ренормированных состояний в соответствии с принятой классификацией. Состояние с $N = 0$ соответствует вакуумному состоянию. Оно обозначается через $|0\rangle$ и не ренормируется взаимодействиями, содержащимися в H^0 . Энергия этого состояния равна нулю.

При $N = 1$ имеются три функции независимых частиц со спином $S = 1/2$ и его проекцией $S_z = 1/2$ вида

$$\Psi_1 = d_{\uparrow}^+ |0\rangle, \quad \Psi_2 = a_{\uparrow}^+ |0\rangle, \quad \Psi_3 = b_{\uparrow}^+ |0\rangle. \quad (51)$$

Нетрудно видеть, что действие гамильтониана H^0 на эти функции приводит к следующим равенствам:

$$H^0 \Psi_1 = \varepsilon_d \Psi_1 + V \Psi_2, \quad H^0 \Psi_2 = \varepsilon_a \Psi_2 + V \Psi_1, \quad H^0 \Psi_3 = \varepsilon_b \Psi_3. \quad (52)$$

Для краткости по аналогии с работами [44], [45] введено обозначение $V = t_{ad}$. Соответствующая субматрица второго ранга в подпространстве состояний Ψ_1 и Ψ_2 имеет вид

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_d - E & V \\ V & \varepsilon_a - E \end{pmatrix} \quad (53)$$

(здесь и в дальнейшем приводится подматрица матрицы $\hat{H}^0 - E\hat{I}$). На ее основе, полагая соответствующий детерминант равным нулю, получаем два значения энергии из ренормированного энергетического спектра дублета,

$$E_{1,2} \left(N = 1, S = \frac{1}{2} \right) = E_{1,2} = \frac{1}{2} [\varepsilon_a + \varepsilon_d \mp \sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_d)^2 + 4V^2}]. \quad (54)$$

На основе (53) определим две ортонормированные функции $\Phi_1(E_\lambda)$ и $\Phi_2(E_\lambda)$ по правилам (48). Нетрудно видеть, что

$$\begin{aligned} \Phi_2(E_\lambda) &= \frac{E_\lambda - \varepsilon_d}{V} \Phi_1(E_\lambda), \\ \Phi_1(E_{1,2}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 \mp \frac{\varepsilon_a - \varepsilon_d}{\sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_d)^2 + 4V^2}} \right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (55)$$

и, следовательно, ренормированные состояния дублета суть

$$\begin{aligned} |E_1\rangle &= \Phi_1(E_1) \left[\Psi_1 + \frac{E_1 - \varepsilon_d}{V} \Psi_2 \right], \\ |E_2\rangle &= \Phi_1(E_2) \left[\Psi_1 + \frac{E_2 - \varepsilon_d}{V} \Psi_2 \right]. \end{aligned} \quad (56)$$

В этих формулах, как и далее, мы для краткости опускаем значения квантовых чисел N , S и S_z и учитываем вещественность функции Φ_n . Функция Ψ_3 является собственной функцией оператора H^0 , $H^0 \Psi_3 = \varepsilon_b \Psi_3$ и, следовательно, $E_3 = \varepsilon_b$, $|E_3\rangle = \Psi_3$. Имеются еще три функции Ψ_4 , Ψ_5 и Ψ_6 , которые отличаются от рассмотренных направлением спина частиц. Соответствующие им ренормированные величины имеют тот же вид, что и для функций Ψ_1 , Ψ_2 и Ψ_3 , соответственно. Поэтому можно написать, что $E_{4,5} = E_{1,2}$, $E_6 = E_3$, $\Phi_{4,5} = \Phi_{1,2}$, $\Phi_6 = 1$.

Перейдем теперь к состояниям с двумя частицами, $N = 2$. Имеются два возможных значения полного спина $S = 0$ и $S = 1$. Здесь мы рассмотрим первый случай. При $S = 0$ имеются шесть синглетных состояний $\Psi(N = 2, S = 0, n)$ с $n = 1, \dots, 6$, которые перечислены ниже (для простоты опускаем индексы N и S):

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow^+ a_\downarrow^+ - d_\downarrow^+ a_\uparrow^+) |0\rangle, & \Psi_2 &= a_\uparrow^+ a_\downarrow^+ |0\rangle, \\ \Psi_3 &= d_\uparrow^+ d_\downarrow^+ |0\rangle, & \Psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow^+ b_\downarrow^+ - d_\downarrow^+ b_\uparrow^+) |0\rangle, \\ \Psi_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a_\uparrow^+ b_\downarrow^+ - a_\downarrow^+ b_\uparrow^+) |0\rangle, & \Psi_6 &= b_\uparrow^+ b_\downarrow^+ |0\rangle. \end{aligned} \quad (57)$$

Действие гамильтониана (46) на эти функции приводит к следующим равенствам:

$$\begin{aligned} H^0 \Psi_1 &= (\varepsilon_a + \varepsilon_d + G) \Psi_1 + \sqrt{2} V \Psi_2 + \sqrt{2} V \Psi_3, \\ H^0 \Psi_2 &= (2\varepsilon_a + U_a) \Psi_2 + \sqrt{2} V \Psi_1, \\ H^0 \Psi_3 &= (2\varepsilon_d + U_d) \Psi_3 + \sqrt{2} V \Psi_1, \quad H^0 \Psi_4 = (\varepsilon_d + \varepsilon_b) \Psi_4 + V \Psi_5, \\ H^0 \Psi_5 &= (\varepsilon_a + \varepsilon_b + 2U_{ab}) \Psi_5 + V \Psi_4, \quad H^0 \Psi_6 = (2\varepsilon_b + U_b) \Psi_6. \end{aligned} \quad (58)$$

Согласно этим равенствам матрица гамильтониана (46) в подпространстве первых трех состояний имеет вид

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_a + \varepsilon_d + G - E & \sqrt{2} V & \sqrt{2} V \\ \sqrt{2} V & 2\varepsilon_a + U_a - E & 0 \\ \sqrt{2} V & 0 & 2\varepsilon_d + U_d - E \end{pmatrix}, \quad (59)$$

где использовано обозначение работ [44], [45] $G = U_{ad}$. Три значения энергии синглетов, образованных a - и d -фермионами, находятся из решения кубического уравнения относительно E ,

$$\begin{aligned} (2\varepsilon_a + U_a - E)(2\varepsilon_d + U_d - E)(\varepsilon_a + \varepsilon_d + G - E) - \\ - 2V^2(2\varepsilon_a + U_a + 2\varepsilon_d + U_d - 2E) = 0 \end{aligned} \quad (60)$$

(синглет Жанга–Райса [4] имеет наименьшую энергию). Функции $\Phi_n(E_\lambda)$ в данном случае имеют вид

$$\begin{aligned} \Phi_1(E_\lambda) &= \left(1 + \frac{2V^2}{(2\varepsilon_a + U_a - E_\lambda)^2} + \frac{2V^2}{(2\varepsilon_d + U_d - E_\lambda)^2} \right)^{\frac{1}{2}}, \\ \Phi_2(E_\lambda) &= -\frac{\sqrt{2} V \Phi_1(E_\lambda)}{2\varepsilon_a + U_a - E_\lambda}, \quad \Phi_3(E_\lambda) = -\frac{\sqrt{2} V \Phi_1(E_\lambda)}{2\varepsilon_d + U_d - E_\lambda}, \end{aligned} \quad (61)$$

и, следовательно, три ренормированных состояния ($\lambda = 1, 2, 3$)

$$|E_\lambda\rangle = \frac{\Phi_1(E_\lambda)}{\sqrt{2}} \left[d_\uparrow^\dagger a_\downarrow^\dagger - d_\downarrow^\dagger a_\uparrow^\dagger - \frac{2V a_\uparrow^\dagger a_\downarrow^\dagger}{2\varepsilon_a + U_a - E_\lambda} - \frac{2V d_\uparrow^\dagger d_\downarrow^\dagger}{2\varepsilon_d + U_d - E_\lambda} \right] |0\rangle. \quad (62)$$

Для подсистемы функций Ψ_4 и Ψ_5 матрица ячеечного гамильтониана есть

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_d + \varepsilon_b - E & V \\ V & \varepsilon_a + \varepsilon_b + 2U_{ab} - E \end{pmatrix}. \quad (63)$$

Отсюда следуют два значения энергии

$$E_{4,5}(2, 0) = \varepsilon_b + \frac{1}{2} \left[\varepsilon_a + \varepsilon_d + 2U_{ab} \mp \sqrt{(\varepsilon_d - \varepsilon_a - 2U_{ab})^2 + 4V^2} \right] \quad (64)$$

(d, b) - и (a, b) -синглетов, построенных в виде (a, d) -дублета (54) и одного b -фермиона с заменой энергии ε_a на $\varepsilon_a + 2U_{ab}$. Здесь могут быть использованы выражения (55) с необходимой модификацией для получения интересующих нас величин $\Phi_n(E_\lambda)$,

$$\begin{aligned}\Phi_5(E_\lambda) &= \frac{(E_\lambda - \varepsilon_d - \varepsilon_b)}{V} \Phi_4(E_\lambda), \\ \Phi_4(E_{4,5}) &= \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_a + 2U_{ab} - \varepsilon_d}{\sqrt{(\varepsilon_a + 2U_{ab} - \varepsilon_d)^2 + 4V^2}} \right]^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}\quad (65)$$

На этом основании получаем

$$|E_{4,5}\rangle = \Phi_4(E_{4,5}) \left(\Psi_4 + \frac{E_{4,5} - \varepsilon_d - \varepsilon_b}{V} \Psi_5 \right). \quad (66)$$

Синглет Ψ_6 не ренормируется и состоит из двух b -частиц с противоположными спинами. Энергия этого состояния $E_6 = 2\varepsilon_b + U_b$, и выполняется равенство $|E_6\rangle = \Psi_6$.

Если воспользоваться стандартной системой значений параметров теории (37), то уровни энергии состояний с $N = 1$ становятся

$$\begin{aligned}E_1 &= \varepsilon_d - 1.088t_{dp} = \varepsilon_d - 1.414 \text{ эВ}, \\ E_2 &= \varepsilon_d + 2.978t_{dp} = \varepsilon_d + 3.871 \text{ эВ}, \\ E_3 &= \varepsilon_d + 3.510t_{dp} = \varepsilon_d + 4.563 \text{ эВ}.\end{aligned}\quad (67)$$

В отсутствие диагонализации эти же уровни энергии имеют несколько иные значения:

$$\begin{aligned}\overline{E}_1 &= \varepsilon_d - 0.994t_{dp} = \varepsilon_d - 1.292 \text{ эВ}, \\ \overline{E}_2 &= \varepsilon_d + 3.694t_{dp} = \varepsilon_d + 4.802 \text{ эВ}, \\ \overline{E}_3 &= \varepsilon_d + 2.700t_{dp} = \varepsilon_d + 3.510 \text{ эВ}.\end{aligned}$$

Нижний уровень дублета из-за введения диагонализации оказывается несколько ниже (на 0.122 эВ), чем при ее отсутствии. Аналогичный результат получен для синглета Жанга–Райса. В самом деле, уравнение (60), определяющее три уровня синглетов, для значений параметров (37) переписывается в виде

$$\begin{aligned}E_n &= 2\varepsilon_d + e_n t_{dp}, \quad n = 1, 2, 3, \\ (7 - e)(2.701 - e)(4.280 - e) - 6.48(11.280 - 2e) &= 0.\end{aligned}\quad (68)$$

Это кубическое уравнение имеет решения

$$e_1 = 0.174, \quad e_2 = 5.294, \quad e_3 = 8.513. \quad (69)$$

В отсутствие перенормировки кислородных дырок кубическое уравнение и его решения оказываются иными,

$$(7 - \bar{e})(3.618 - \bar{e})(6.033 - \bar{e}) - 7.342(13.033 - 2\bar{e}) = 0,$$

$$\bar{e}_1 = 0.957, \quad \bar{e}_2 = 6.471, \quad \bar{e}_3 = 9.223.$$

Из сопоставления этих решений видно, что различие между энергиями синглета Жанга–Райса в этих двух случаях $E_1 - \bar{E}_1 = -1.018$ эВ оказалось существенным.

Таким образом, можно сделать вывод, что выполненные нами диагонализация кинетической энергии кислородных дырок и их перенормировка способствуют понижению энергии низкоэнергетической части спектра и должны оказать существенное влияние на динамические свойства системы.

Благодарности. Авторы выражают глубокую признательность проф. Н. М. Плакиде за неоднократные обсуждения различных аспектов работы. Мы благодарим Высший Совет по науке и технологическому развитию Республики Молдова за предоставленные гранты. Один из авторов (В.М.) благодарит за поддержку Программу Гейзенберг–Ландау.

Список литературы

- [1] V. J. Emery. Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 2794.
- [2] C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams. Solid State Commun. 1987. V. 62. P. 681.
- [3] Yu. B. Gaididei, V. M. Loktev. Phys. Status Solidi B. 1988. V. 147. P. 307.
- [4] F. C. Zhang, T. M. Rice. Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 3759.
- [5] V. J. Emery, G. Reiter. Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 4547.
- [6] B. Sriram Shastry. Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. P. 1288.
- [7] F. C. Zhang. Phys. Rev. B. 1989. V. 39. P. 7375.
- [8] D. M. Frenkel, R. J. Gooding, B. I. Shraiman, E. D. Siggia. Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 350.
- [9] J. L. Shen, C. S. Ting. Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 1969.
- [10] H. B. Pang, T. Xiang, Z. B. Su, L. Yu. Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 7209.
- [11] F. C. Zhang, T. M. Rice. Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 7243.
- [12] V. J. Emery, G. Reiter. Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 7247.
- [13] J. L. Shen, J. H. Xu, C. S. Ting, T. K. Lee. Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 8728.
- [14] P. W. Anderson. Science. 1987. V. 235. P. 1196.
- [15] S. V. Lovtsov, V. Yu. Yushankhai. Physica C. 1991. V. 179. P. 159.
- [16] S. V. Lovtsov, V. Yu. Yushankhai. Phys. Stat. Sol. (b). 1991. V. 166. P. 209.
- [17] R. Hayn, V. Yu. Yushankhai, S. V. Lovtsov. Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 5253.
- [18] V. Yu. Yushankhai, V. S. Oudovenko, R. Hayn. Phys. Rev. B. 1997. V. 55. P. 15562.
- [19] В. Ю. Юшанхай. Эффекты сильных электронных корреляций в моделях высокотемпературных сверхпроводников. Докторская диссертация. Дубна: ОИЯИ, 1999.
- [20] J. H. Jefferson. Physica B. 1990. V. 165–166. P. 1013.
- [21] J. H. Jefferson, H. Eskes, L. F. Feiner. Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 7959.
- [22] L. F. Feiner, J. H. Jefferson, R. Raimondi. Phys. Rev. B. 1996. V. 53. P. 8751.
- [23] R. Raimondi, J. H. Jefferson, L. F. Feiner. Phys. Rev. B. 1996. V. 53. P. 8774.
- [24] H.-B. Schuttler, A. J. Fedro. Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 7588.

- [25] *V. I. Belinicher, A. L. Chernyshev.* Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 390.
- [26] *V. I. Belinicher, A. L. Chernyshev.* Physica C. 1993. V. 213. P. 298.
- [27] *V. I. Belinicher, A. L. Chernyshev.* Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P. 9746.
- [28] *V. I. Belinicher, A. L. Chernyshev, L. V. Popovici.* Phys. Rev. B. 1994. V. 50. P. 13768;
Phys. Rev. B. 1996. V. 53. P. 335.
- [29] *S. V. Lovtsov, N. M. Plakida, V. Yu. Yushankhai.* Physica B. 1990. V. 165–166. P. 1007.
- [30] *N. M. Plakida, R. Hayn, J.-L. Richard.* Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 16599.
- [31] *N. M. Plakida.* Physica C. 1997. V. 282–287. P. 1737.
- [32] *A. Fujimori, F. Minami.* Phys. Rev. B. 1984. V. 30. P. 957.
- [33] *G. A. Sawatzky, J. W. Allen.* Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 2339.
- [34] *J. Zaanen, G. A. Sawatzky, J. M. Allen.* Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55. P. 418.
- [35] *F. Mila.* Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 11358.
- [36] *A. Fujimori.* Phys. Rev. B. 1989. V. 39. P. 793.
- [37] *H. Eskes, G. A. Sawatzky, L. F. Feiner.* Physica C. 1989. V. 160. P. 424.
- [38] *H. Eskes, L. H. Tjeng, G. A. Sawatzky.* Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 288.
- [39] *D. C. Mattis.* Mod. Phys. Lett. B. 1994. V. 8. P. 1387.
- [40] *D. C. Mattis, J. M. Wheatley.* Mod. Phys. Lett. 1995. V. 9. P. 1107.
- [41] *D. C. Mattis, J. M. Wheatley.* Phys. Rev. B. 1995. V. 52. P. 15103.
- [42] *D. C. Mattis.* Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. P. 3676.
- [43] *D. C. Mattis.* Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 7166.
- [44] *В. А. Москаленко, Н. Б. Перкинс.* ТМФ. 1999. Т. 121. № 3. С. 464.
- [45] *V. A. Moskalenko, P. Entel, M. Marinaro, N. B. Perkins, C. Holfort.* Phys. Rev. B. 2001.
V. 63. P. 245119.
- [46] *Д. Ф. Дигор, П. Ентел, М. Маринаро, В. А. Москаленко, Н. Б. Перкинс.* ТМФ. 2001.
Т. 127. № 2. С. 304.

Поступила в редакцию 24.VIII.2001 г.