

О спектре t – J -модели на деформированной решетке «лестница-ожерелье»

В.О. Черановский, Е.В. Езерская, А.А. Кравченко

Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61022, Украина

E-mail: cheranovskii@univer.kharkov.ua;

ezer@univer.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 15 декабря 2011 г.

В рамках теории возмущений и формализма циклических спиновых перестановок построены эффективные гамильтонианы, описывающие нижнюю часть энергетического спектра t – J -модели на решетке «лестница-ожерелье» при слабом взаимодействии элементарных ячеек. Показано, что в модели «лестница-ожерелье» отсутствуют магнитные поляроны, которые наблюдаются в аналогичных прямоугольных лестницах. Численно показана немонотонная зависимость спина основного состояния S_0 конечных фрагментов лестницы, содержащих L элементарных ячеек и $N = 3L - 1$ электронов, от величины обменного параметра J . В частности, для циклического фрагмента из четырех ячеек при $0 < J < 0,02304$ спин основного состояния равен $11/2$. Увеличение J сначала ведет к скачкообразному понижению S_0 до минимального значения, а потом к его увеличению до значения $S_0 = 3/2$, что согласуется с предложенной в работе качественной оценкой $S_0 = (L - 1)/2$ для больших значений J . Для циклических фрагментов решетки «лестница-ожерелье», содержащих $3L - 1$ электронов, при четных L показано точное разделение зарядовых и спиновых переменных в соответствующей t – J -модели.

У рамках теорії збурень і формалізму циклічних спінових перестановок побудовано ефективні гамільтоніани, що описують нижню частину енергетичного спектра t – J -моделі на ґратці «драбина-намисто» при слабкій взаємодії елементарних ґраток. Показано, що в моделі «драбина-намисто» відсутні магнітні полярони, які виникають в аналогічних прямокутних драбинах. Чисельно показано немонотонну залежність спіна основного стану S_0 кінцевих фрагментів драбини, що містять L елементарних ґраток та $N = 3L - 1$ електронів, від величини обмінного параметра J . Зокрема, для циклічного фрагмента з чотирьох ґраток при $0 < J < 0,02304$ спіні основного стану дорівнює $11/2$. Збільшення J спочатку призводить до стрибкоподібного зниження S_0 до мінімального значення, а потім до його збільшення до значення $S_0 = 3/2$, що узгоджується із запропонованою в роботі якісною оцінкою $S_0 = (L - 1)/2$ для великих значень J . Для циклічних фрагментів ґратки «драбина-намисто», що містять $3L - 1$ електронів, при парних L показано точний розподіл зарядових і спінових змінних у відповідній t – J -моделі.

PACS: 75.10.Jm Квантовые спиновые модели, включая квантовую спиновую фрустрацию;

75.40.Cx Статические свойства (параметр порядка, статическая восприимчивость, теплоемкости, критические индексы и т.д.).

Ключевые слова: t – J -модель, энергетический спектр, «лестница-ожерелье».

1. Введение

Низкотемпературные свойства квазиодномерных магнетиков на основе соединений меди хорошо описываются однозонной моделью Хаббарда с сильным электронным отталкиванием. При половинном заполнении зоны эта модель сводится к гейзенберговскому спиновому гамильтониану, отвечающему системе взаимодействующих спинов $S = 1/2$, локализованных на

узлах магнитной подрешетки. В частном случае изотропной подрешетки «лестница-ожерелье» (necklace ladder (NL)) такой гамильтониан описывает низкотемпературные свойства квазиодномерного комплекса $\text{IPA}_2\text{CuCL}_4$ (IPA — изопропиламмоний) [1,2]. Обменные интегралы модели Гейзенберга для комплексов переходных металлов чувствительны к модификации химической структуры лигандов, что в общем случае ведет к пространственной анизотропии взаимодейст-

вий и изменению магнитных свойств комплексов [3,4]. На эти свойства также может существенно повлиять появление дырок в наполовину заполненной зоне вследствие акцепторного допирования при синтезе магнетика [5].

В предельном случае модели Хаббарда с бесконечным отталкиванием остается только кинетическая часть, отвечающая перескокам электронов между соседними узлами решетки при условии запрета двукратного заполнения узлов. Даже такое упрощенное описание приводит к интересным эффектам. Например, согласно теореме Нагаоки [6] модель Хаббарда с бесконечным отталкиванием на прямоугольной решетке с одной дыркой в наполовину заполненной зоне имеет ферромагнитное основное состояние. При конечных концентрациях дырок ферромагнитное упорядочение в основном состоянии возможно для фрагментов прямоугольной решетки типа полос конечной ширины — прямоугольных лестниц, состоящих из слабо-взаимодействующих n -центровых элементарных ячеек [7,8]. Причиной возникновения такого упорядочения является образование магнитных поляронов, которые при определенных концентрациях дырок начинают охватывать всю решетку. В рамках t - J -модели подобный эффект может наблюдаться только при достаточно малых значениях обменного параметра J , а увеличение J приводит к исчезновению магнитных поляронов и понижению полного спина основного состояния модели до минимального значения. Для NL решетки кинетика дырок значительно меняется из-за особенностей топологии решетки. Кроме того, при половинном заполнении t - J -модель на такой решетке, в отличие от обычных прямоугольных лестниц, имеет ферромагнитное основное состояние (теорема Либя [9]). Следовательно, можно ожидать, что акцепторное допирование ферромагнетика, имеющего магнитную подрешетку типа NL, может нетривиальным образом повлиять на его магнитные свойства.

Наша работа посвящена исследованию нижней части энергетического спектра t - J -модели на деформированной NL решетке. В рамках теории возмущений ана-

лизируется зависимость нижней части энергетического спектра от электронной концентрации при слабом взаимодействии между элементарными ячейками. В случае произвольного взаимодействия ячеек рассматривается спектр возбуждений конечных лестниц с циклическими граничными условиями для числа электронов на единицу меньшего числа узлов решетки (слабое акцепторное допирование). Основное внимание уделяется изучению зависимости спина основного состояния и спектра низколежащих возбуждений от параметров модели.

2. t - J -модель на решетке «лестница-ожерелье» из слабо-взаимодействующих элементарных ячеек

Рассмотрим деформированную решетку типа «лестница-ожерелье», образованную L слабо-взаимодействующими трехцентровыми элементарными ячейками. На рис. 1 приведены два типа такой решетки: решетка из «линейных» ячеек и решетка из «угловых» ячеек. Пусть все узлы решетки определяются парой индексов (i, k) . Первый индекс отвечает номеру элементарной ячейки ($i = 1, 2, \dots, L$), а второй индекс — номеру узла в i -й ячейке ($k = 1, 2, 3$). Пусть на этой решетке определен гамильтониан Хаббарда с сильным отталкиванием, описывающий систему N электронов. Сильное электронное отталкивание делает невыгодным состояния с двумя электронами на узел. Поэтому при $N < 3L$ в пределе бесконечного отталкивания разрешены только перескоки электронов с однократно заполненных узлов на соседние пустые узлы решетки. Пронумеруем все электроны последовательно по узлам ячеек решетки по мере роста номеров ячеек. Тогда перескоки электронов внутри ячеек не меняют спиновую конфигурацию электронной системы. В то же время перескоки между соседними ячейками в общем случае приводят к циклическим перестановкам спиновых переменных части электронов [7,10]. Для наглядности рассмотрим такие перестановки на примере системы из четырех электронов на фрагменте лестницы из двух «угловых» элементарных ячеек (рис. 2). Если электроны фрагмента пронумерованы последовательно по узлам решетки, то перескок электрона с первого узла первой ячейки на второй узел второй ячейки приводит к циклической перестановке спиновых переменных σ_i всех четырех электронов:

$$|\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4\rangle = |\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_1\rangle.$$

Аналогичный перескок электрона с третьего узла первой ячейки на второй узел второй ячейки ведет к перестановке спиновых переменных только третьего и четвертого электронов:

$$|\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4\rangle = |\sigma_1, \sigma_2, \sigma_4, \sigma_3\rangle.$$

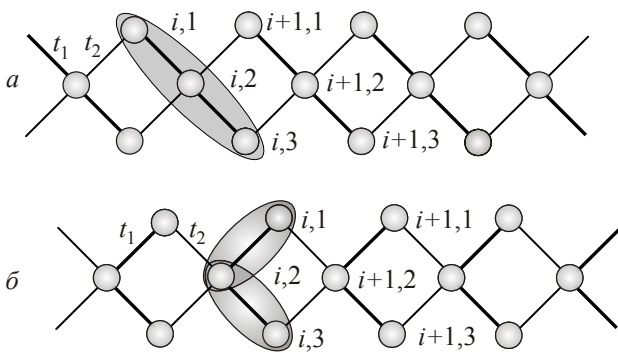


Рис. 1. Фрагмент деформированной решетки «лестница-ожерелье» (показаны два типа элементарных ячеек).

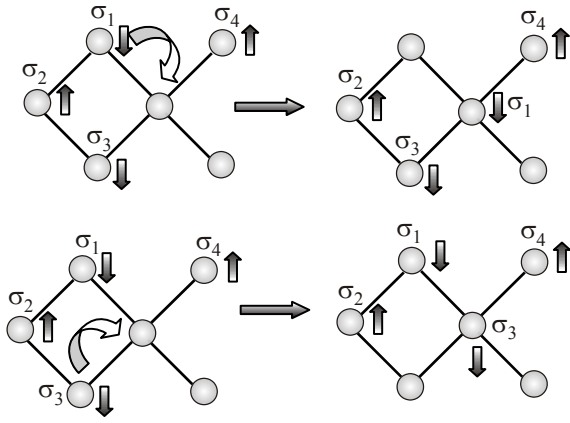


Рис. 2. Перескоки электронов между элементарными ячейками, ведущие к циклическим перестановкам спиновых переменных σ_i .

Обобщая приведенное выше рассмотрение на случай t - J -модели на решетке «лестница-ожерелье», гамильтониан модели можно записать в виде

$$\mathbf{H} = t_1 \mathbf{H}_0 + t_2 \sum_{i=1}^{L-1} \mathbf{H}_{i,i+1} + \mathbf{H}_J \quad (1)$$

Гамильтониан (1) разбит на три части. Оператор

$$\mathbf{H}_0 = \sum_{i=1}^L (\mathbf{a}_{i,1}^+ \mathbf{a}_{i,2} + \mathbf{a}_{i,2}^+ \mathbf{a}_{i,3}) + \text{H.c.}$$

отвечает набору L изолированных трехцентровых ячеек с вырожденным по спину энергетическим спектром. Здесь $\mathbf{a}_{i,k}^+$ — бесспиновый фермиевский оператор, описывающий появление электрона на узле (i, k) .

Операторы

$$\mathbf{H}_{i,i+1} = \sum_{\langle k,l \rangle} (\mathbf{Q}_{m,n} \mathbf{a}_{i+1,l}^+ \mathbf{a}_{i,k} + \text{H.c.})$$

описывают взаимодействие ячеек, связанное с перескоками электронов с i - на $(i + 1)$ -ю ячейку. Такие взаимодействия приводят к частичному или полному снятию вырождения по спину. Суммирование выполняется только по соседним узлам; $\mathbf{Q}_{m,n}$ — оператор циклической перестановки $(n - m + 1)$ -спиновых переменных электронов σ_m , занимающих последовательно узлы решетки, начиная с узла (i, k) и заканчивая узлом $(i + 1, l)$. В общем случае

$$\mathbf{Q}_{m,n} |\sigma_m, \sigma_{m+1}, \dots, \sigma_{n-1}, \sigma_n\rangle = |\sigma_{m+1}, \dots, \sigma_{n-1}, \sigma_n, \sigma_m\rangle,$$

где $|\sigma_m, \sigma_{m+1}, \dots, \sigma_{n-1}, \sigma_n\rangle$ — исходная спиновая конфигурация $(n - m + 1)$ -электронов.

Обменная часть \mathbf{H}_J гамильтониана (1) имеет вид

$$\mathbf{H}_J = J_1 \sum_{i=1}^L \sum_{k=1}^2 \mathbf{P}_{m,m+1} \mathbf{n}_{i,k} \mathbf{n}_{i,k+1} + J_2 \sum_{i=1}^{L-1} \sum_{\langle i,k \rangle} \mathbf{P}_{m,n} \mathbf{n}_{i,k} \mathbf{n}_{i+1,l},$$

где $\mathbf{P}_{m,n} = \mathbf{S}_m \mathbf{S}_n - 1/4$, $\mathbf{n}_{i,k} = \mathbf{a}_{i,k}^+ \mathbf{a}_{i,k}$, \mathbf{S}_n — оператор спина n -го электрона, $J_i = 4t_i^2/U$, $i = 1, 2$, U — потенциал электронного отталкивания в модели Хаббарда.

Рассмотрим фрагмент лестницы из двух слабосвязанных элементарных ячеек ($|t_2/t_1| \ll 1$) с одним электроном на ячейку. Если взаимодействия между ячейками нет ($t_2 = 0$), нижние энергетические уровни такой двухэлектронной системы вырождены по спину. Появление взаимодействия между ячейками снимает вырождение. Расщепление вырожденных энергетических уровней при слабом взаимодействии между ячейками может быть описано в рамках операторной теории возмущений (ТВ) [10]. Можно показать, что поправки первого порядка ТВ по малому параметру $|t_2/t_1|$ к энергиям уровней равны нулю, а вырождение снимается только во втором порядке по t_2 . Нижние энергетические уровни фрагмента из двух «линейных» ячеек описываются гейзенберговским спиновым гамильтонианом:

$$\mathbf{H}_{1,2} = \frac{19\sqrt{2}J_0 + 12J_2}{48} \mathbf{P}_{1,2} - \frac{\sqrt{2}}{4} J_0, \quad J_0 = \frac{t_2^2}{|t_1|}. \quad (2)$$

Для фрагмента лестницы из L ячеек такое рассмотрение приводит к гамильтониану антиферромагнитной гейзенберговской цепочки спинов

$$\mathbf{H} = J_{\text{eff}} \sum_{i=1}^{L-1} \mathbf{P}_{i,i+1} - \frac{\sqrt{2}(L-1)}{4} J_0, \quad (3)$$

где $J_{\text{eff}} = \frac{19\sqrt{2}J_0 + 12J_2}{48}$.

Аналогичный анализ для лестницы из «угловых» ячеек приводит к эффективному спиновому гамильтониану (3), в котором

$$J_{\text{eff}} = \frac{5\sqrt{2}J_0 + 3J_2}{12}.$$

Таким образом, в случае заполнения с одним электроном на элементарную ячейку основное состояние «лестницы-ожерелья» при слабом взаимодействии ячеек отвечает минимальному значению полного спина, а спектр возбуждений является бесщелевым. Отметим, что случай сильного акцепторного допирования для t - J -модели на изотропной NL решетке изучался в работе [2], где было показано, что основное состояние модели отвечает минимальному значению полного спина.

Пусть теперь полное число электронов N лестницы на единицу больше числа ячеек ($N = L + 1$). При $|t_2/t_1| \ll 1$ нижние энергетические уровни фрагмента из L ячеек отвечают такому электронному заполнению, когда на одну пару соседних ячеек приходится три электрона, а на оставшиеся ячейки — по одному электрону. В этом случае взаимодействие двух соседних

ячеек с разным заполнением в первом порядке теории возмущений по t_2 может быть описано следующим эффективным гамильтонианом блочного вида:

$$\mathbf{H}_{1,2} = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 4J_1 \mathbf{P}_{1,2} & -\sqrt{2} t_2 \mathbf{A} \\ -\sqrt{2} t_2 \mathbf{A}^+ & 4J_1 \mathbf{P}_{2,3} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где $\mathbf{A} = \mathbf{Q}_{1,2} + \mathbf{Q}_{2,3} - 2$ для «линейных» ячеек и $\mathbf{A} = \mathbf{Q}_{1,2} + \mathbf{Q}_{2,3} - \mathbf{Q}_{1,3} - 1$ для «угловых» ячеек.

Основное состояние гамильтониана (4) отвечает минимальному спину $S_0 = 1/2$, а два состояния, отвечающие спину $S = 3/2$, имеют нулевую энергию. Можно ожидать, что основное состояние фрагмента лестницы, состоящего из L слабозаимодействующих ячеек, при $N = L + 1$ также отвечает минимальному значению полного спина. Это заключение согласуется с численными расчетами нижней части точного спектра малых решеточных кластеров методом Дэвидсона [11]. Эффективный гамильтониан $\mathbf{H}_{1,2}$ для прямоугольной лестницы, образованной такими же элементарными ячейками, как и «лестница-ожерелье», определяется формулой (4), в которой оператор $\mathbf{A} = (9\mathbf{Q}_{1,2} + 9\mathbf{Q}_{2,3} - \mathbf{Q}_{1,3} - \mathbf{I}) / (2\sqrt{2})$. При $12|t_2| > 13J_1$ основное состояние гамильтониана такой трехэлектронной системы отвечает полному спину $S_0 = 3/2$. В этом случае в прямоугольной лестнице из L ячеек наблюдается конкуренция взаимодействий ячеек с одинаковым и различным электронным заполнением, приводящая к образованию магнитного полярона — области ферромагнитного упорядочения, охватывающей несколько ячеек [2]. В модели «лестница-ожерелье» такие поляроны не образуются.

Последовательное описание в рамках теории возмущений нижних энергетических уровней лестницы при $2L \geq N > L + 1$ требует учета взаимодействий соседних ячеек с двумя электронами на ячейку. В случае двух «линейных» ячеек во втором порядке теории возмущений получаем эффективный спиновый гамильтониан негейзенберговского вида:

$$\mathbf{H}_{12} = \frac{\sqrt{2}}{192} J_0 \{ \mathbf{Q}_{1,2} + \mathbf{Q}_{3,4} + 36\mathbf{Q}_{2,3} - 3(\mathbf{Q}_{1,3} + \mathbf{Q}_{2,4} + \text{H.c.}) - 74 \} + \mathbf{H}_J, \quad (5)$$

$$\mathbf{H}_J = \frac{1}{2} J_1 (\mathbf{P}_{1,2} + \mathbf{P}_{3,4}),$$

а в случае двух «угловых» ячеек гамильтониан

$$\mathbf{H}_{1,2} = \frac{\sqrt{2}}{384} J_0 [58\mathbf{Q}_{1,2} + 4\mathbf{Q}_{3,4} - 148 + (\mathbf{Q}_{1,4} + \mathbf{Q}_{1,3}\mathbf{Q}_{3,4} - 7\mathbf{Q}_{1,3} - 14\mathbf{Q}_{12}\mathbf{P}_{1,4} + \text{H.c.})] + \mathbf{H}_J. \quad (6)$$

В обменном члене \mathbf{H}_J мы пренебрегли вкладами $\sim J_2$, так как $J_2 \ll J_0, J_1$ при $U \gg |t_1|$.

Эффективный спиновый гамильтониан линейного фрагмента лестницы из L элементарных ячеек с двумя

электронами на ячейку имеет вид суммы гамильтонианов (5) или (6) по всем парам соседних ячеек. Мы использовали этот гамильтониан для численных расчетов нижних энергетических уровней конечных фрагментов лестницы ($L = 2 - 7, N = 2L$) методом Дэвидсона. Для уменьшения вычислительных затрат, матрица гамильтониана модели строилась в пространстве функций правильного спина с помощью техники диаграмм ветвления [12]. Согласно нашим расчетам, оба гамильтониана имеют синглетное основное состояние. Для фрагмента лестницы, состоящей из «линейных» ячеек, увеличение L при $J_1 = 0$ приводит к быстрому сближению синглетного основного и триплетного первого возбужденного состояний. Для $L > 5$ наблюдается практически точное двукратное вырождение основного состояния лестницы. Обменный член \mathbf{H}_J при больших значениях J_1 должен приводить к щели $\Delta E \sim 0,75J_1$ между основным и первым возбужденным состояниями. Согласно численным расчетам, такая щель появляется при $J_1 > 0,5J_0$ (рис. 3). В случае «угловых» ячеек численные расчеты показывают, что основное состояние лестницы отделено от возбужденных состояний конечной щелью, которая практически не зависит от числа ячеек при $J_0 \geq J_1 \geq 0$.

При $N > 2L$ хотя бы на одну пару соседних ячеек приходится 5 электронов. В первом порядке по t_2 взаимодействие таких ячеек описывается гамильтонианом

$$\mathbf{H}_{1,2} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} J_1 \mathbf{R}_1 & -\sqrt{2} t_2 \mathbf{A} \\ -\sqrt{2} t_2 \mathbf{A}^+ & J_1 \mathbf{R}_2 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где $\mathbf{R}_1 = 4\mathbf{P}_{1,2} + 4\mathbf{P}_{2,3} + 2\mathbf{P}_{4,5}$, $\mathbf{R}_2 = 2\mathbf{P}_{1,2} + 4\mathbf{P}_{3,4} + 4\mathbf{P}_{4,5}$; $\mathbf{A} = \mathbf{Q}_{23} + \mathbf{Q}_{34}$ для «линейных» ячеек и $\mathbf{A} = \mathbf{Q}_{1,4} + \mathbf{Q}_{34}$ для «угловых» ячеек.

При бесконечном отталкивании ($J_1 = 0$) численные расчеты дают вырожденное по спину основное состояние $\mathbf{H}_{1,2}$ для обоих типов решеток.

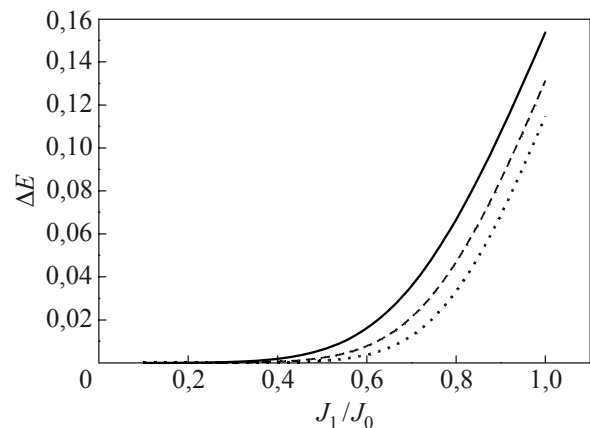


Рис. 3. Зависимость энергетической щели ΔE между основным и первым возбужденным состояниями фрагмента лестницы с двумя электронами на ячейку от J_1/J_0 из элементарных ячеек L : 5 (—), 6 (---), 7 (· · · · ·).

3. t - J -модель на линейном фрагменте решетки «лестница-ожерелье» при $N = 3L - 1$

Изучение особенностей спектра t - J -модели NL в случае одной дырки в наполовину заполненной зоне удобно начать с рассмотрения линейного фрагмента из трех элементарных ячеек, на которые приходится 8 электронов (рис. 4). Перескоки электронов между соседними узлами приводят к перемещению дырки в электронном заполнении и изменению конфигурации спиновых переменных. Рассмотрим состояния с одним перевернутым спином. Таким состояниям отвечает z -проекция полного спина $S^z = 3$. Перескоки электронов не могут переместить перевернутый спин, первоначально расположенный на одном из первых трех узлов решетки, на узлы с номерами больше пятого. Аналогичное рассмотрение может быть проведено для линейного фрагмента произвольных размеров при условии $N_e = 3L - 1$. Таким образом, матрица гамильтониана линейного фрагмента «лестницы-ожерелья» приводима (имеет блочный вид в пространстве электронных конфигураций). Следовательно, можно ожидать частичное вырождение энергетического спектра для линейных решеточных фрагментов при $N = 3L - 1$. Отметим, что энергетический спектр линейной цепочки, описываемой моделью Хаббарда с бесконечным отталкиванием, вырожден по спину для любого заполнения зоны [13].

Численные расчеты для линейных фрагментов NL ($L = 2 - 5$) при $t_1 = t_2$, $U = \infty$ дают основное состояние вырожденное по спину. По аналогии с линейной цепочкой можно ожидать, что конечная величина электронного отталкивания приводит к снятию такого вырождения. Этот эффект может быть адекватно описан в рамках соответствующей t - J -модели. Однако, в отличие от линейной цепочки, обменное взаимодействие $N = 3L - 1$ электронных спинов на фрагменте NL должно приводить к ненулевому значению спина основного состояния S_0 при больших значениях J . Это можно качественно показать, сравнивая энергии спиновых конфигураций при различных положениях дырки. Пусть средняя энергия основного состояния модели Гейзенберга на линейном фрагменте NL в расчете на одну связь между соседними спинами равна ε . То-

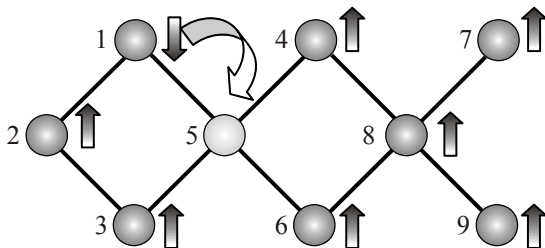


Рис. 4. Одна из спиновых конфигураций 8 электронов на фрагменте изотропной лестницы из трех элементарных ячеек.

гда при локализации дырки на нечетных узлах элементарной ячейки правого конца фрагмента полная обменная энергия E_J соответствующей t - J -модели порядка $\sim \varepsilon(4L - 3)$ (число взаимодействий соседних спинов уменьшается на единицу по сравнению с гейзенберговской моделью). Если дырка расположена на нечетных узлах внутри фрагмента, то $E_J \sim \varepsilon(4L - 4)$, а если на четных узлах — $E_J \sim \varepsilon(4L - 6)$. Поэтому при больших J выгодна локализация дырки на крайних нечетных узлах линейного фрагмента. В этом случае спин основного состояния t - J -модели будет определяться системой $N = 3L - 1$ локализованных спинов на фрагменте NL решетки из N узлов. В итоге, согласно теореме Либана,

$$S_0 = (L - 1) / 2. \quad (8)$$

Отметим, что оценка (8) справедлива также в случае циклических фрагментов NL, для которых дырка должна преимущественно располагаться на нечетных узлах решетки.

Мы провели численные расчеты методом Дэвидсона нижних энергетических уровней t - J -модели на линейных фрагментах изотропной решетки ($t_1 = t_2 = 1$), образованных 2–5 элементарными ячейками при различных значениях обменного параметра J . В качестве примера, на рис. 5 приведены результаты такого расчета для линейного фрагмента NL из 5 ячеек. В этом случае при $J \geq 1,086$ спин основного состояния равен 2, что согласуется с полученной выше качественной оценкой (8). Одновременно наблюдается локализация дырки на правом конце фрагмента. Например, при $J = 0,1$ вклад электронных конфигураций с дыркой, локализованной на правых концевых узлах, в основное состояние фрагмента составляет $\sim 15\%$. При $J = 1,1$ этот вклад увеличивается до 68%. Дальнейшее увеличение J , не меняя значение S_0 , усиливает локализацию дырки на правом конце фрагмента. В частности, она достигает $\sim 89\%$ при $J = 2$. Отметим, что, как показано в [2],

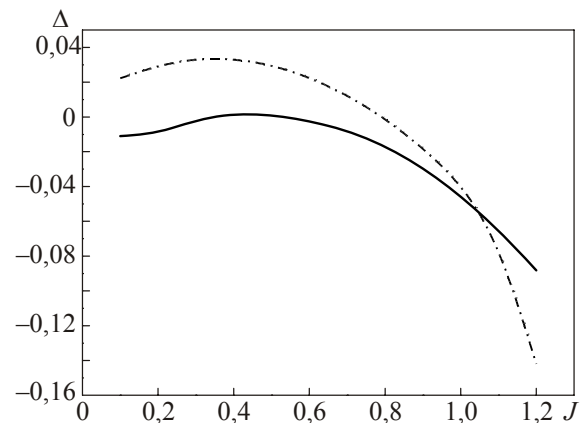


Рис. 5. Зависимость величин $\Delta_S = E(S) - E(0)$ от обменного параметра J изотропной (t - J -модели для линейного фрагмента лестницы из 5 элементарных ячеек. $E(S)$ — энергия нижнего уровня спина S . Δ_1 (—), Δ_2 (---).

для NL, описываемой моделью с одной дыркой на элементарную ячейку, дырки преимущественно локализуются на четных узлах решетки вследствие преобладающего влияния кинетического члена модели.

4. t - J -модель на замкнутой NL решетке при $N = 3L - 1$

Рассмотрим фрагмент NL с циклическими граничными условиями и числом электронов на единицу меньшим числа узлов, который описывается гамильтонианом Хаббарда с бесконечным отталкиванием. В этом случае перевернутые спины могут «перемещаться» по всей решетке. Это означает, что матрица гамильтониана неприводима в каждом подпространстве с заданным числом перевернутых спинов. Следовательно, для четных L с помощью теоремы Перрона–Фробениуса можно показать, что основное состояние циклического фрагмента NL невырожденное и имеет ферромагнитный характер (аналог теоремы Нагаоки).

Для определения спина основного состояния циклического фрагмента NL при $N = 3L - 1$ и сильном электронном отталкивании рассмотрим соответствующую t - J -модель на решетке из четного числа элементарных ячеек. В случае периодических граничных условий решетка имеет ось симметрии L -го порядка, а гамильтониан модели коммутирует с оператором сдвига номеров всех узлов на одно элементарное звено. Если все электроны пронумерованы последовательно по ячейкам вдоль решетки, то такой сдвиг приводит к циклической перестановке спиновых переменных электронов. Используя стандартную технику теории групп, можно показать, что базисные функции правильной пространственной симметрии для решеточно-гамильтониана могут быть выбраны в следующем виде:

$$\Psi_m(S, M) = (L)^{-1/2} \sum_{n=1}^L \exp[ik(1-n)] Q_{1,N}^{3(1-n)} \times \sum_{l=1}^3 c_l^+ \mathbf{b}_{n,l}^+ |0\rangle \Phi_m(S, M), \quad (9)$$

$k = (2\pi/L)n$, $n = 0, 1, \dots, L-1$; $|0\rangle$ — состояние с одним электроном на узел решетки (наполовину заполненная зона), фермиевский оператор $\mathbf{b}_{n,l}^+$ описывает появление дырки в состоянии $|0\rangle$ на l -м узле n -й элементарной ячейки, $\Phi_m(S, M)$ — m -я базисная спиновая функция $N = 3L - 1$ электронов.

В формализме операторов циклических спиновых перестановок гамильтониан модели Хаббарда с бесконечным отталкиванием для NL можно представить в следующем виде:

$$\mathbf{H}_t = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_1^+ & \mathbf{0} & \mathbf{A}_2 \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_2^+ & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где

$$\begin{cases} \mathbf{A}_1 = t_1 + t_2 Q_{1,N}^3 Q_{2,3} \exp(ik) \\ \mathbf{A}_2 = t_1 + t_2 Q_{1,N}^3 Q_{3,4} \exp(ik) \end{cases}$$

для «линейной» элементарной ячейки,

$$\begin{cases} \mathbf{A}_1 = t_1 + t_2 Q_{1,4} Q_{1,N}^{-3} \exp(-ik) \\ \mathbf{A}_2 = t_1 + t_2 Q_{1,N}^3 Q_{3,4} \exp(ik) \end{cases}$$

для «угловой» элементарной ячейки.

Таким образом, используя формализм спиновых перестановок и симметрию модели, можно записать ее гамильтониан в чисто спиновом виде, в котором квазиимпульс k дырки в наполовину заполненной зоне является параметром.

Можно показать, что при четных L собственные значения (10) не зависят от знаков t_1 и t_2 . В случае одного перевернутого спина точный энергетический спектр при произвольных значениях параметров модели определяется трансцендентными уравнениями. Соответствующее рассмотрение приведено в Приложении. Для нескольких перевернутых спинов энергетический спектр, по-видимому, может быть найден только численно.

Рассмотрим изотропный случай $t_1 = t_2 = 1$. Применяя предложенный выше подход к t - J -модели, получаем следующий гамильтониан:

$$\mathbf{H}_{t-J} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_0 + \mathbf{R}_1 & 1 + Q_{1,4} Q_{1,N}^{-3} \exp(-ik) & \mathbf{0} \\ 1 + Q_{1,N}^3 Q_{1,4} \exp(ik) & \mathbf{R}_0 + \mathbf{R}_2 & 1 + Q_{1,N}^3 Q_{3,4} \exp(ik) \\ \mathbf{0} & 1 + Q_{3,4} Q_{1,N}^{-3} \exp(-ik) & \mathbf{R}_0 + \mathbf{R}_3 \end{pmatrix}; \quad (11)$$

$$\mathbf{R}_0 = \sum_{n=2}^{L-1} (\mathbf{P}_{3n-3, 3n-2} + \mathbf{P}_{3n-2, 3n-1} + \mathbf{P}_{3n-3, 3n+1} + \mathbf{P}_{3n-1, 3n+1}) + \mathbf{P}_{N-2, N-1} + \mathbf{P}_{N-1, N};$$

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{P}_{1,2} + \mathbf{P}_{2,4} + \mathbf{P}_{1, N-2} + \mathbf{P}_{1, N}, \quad \mathbf{R}_2 = \mathbf{P}_{1,4} + \mathbf{P}_{2,4}, \quad \mathbf{R}_3 = \mathbf{P}_{1,2} + \mathbf{P}_{1,4} + \mathbf{P}_{2, N-2} + \mathbf{P}_{2, N}.$$

Таким образом, t - J -модель на замкнутой NL решетке с одной дыркой в наполовину заполненной зоне допускает точное разделение зарядовых и спиновых переменных.

Можно ожидать, что для бесконечной лестницы с одной дыркой в наполовину заполненной зоне из-за доминирования обменного вклада в полную энергию ферромагнитное упорядочение в основном состоянии будет разрушаться при любом конечном значении параметра электронного отталкивания U . Для конечных фрагментов лестницы значение спина основного состояния S_0 будет определяться величиной обменного параметра J и размерами решетки.

В качестве примера рассмотрим результаты расчетов методом Дэвидсона нижних энергетических уровней циклического фрагмента изотропной решетки NL ($L = 4$, $N = 11$) при различных значениях обменного параметра J . Согласно этим расчетам, зависимость спина основного состояния от обменного параметра немонотонная. В интервале $0 < J < 0,02304$ основное состояние отвечает максимальному значению полного спина $S_0 = 11/2$. При переходе J через критическое значение $\sim 0,02304$ происходит скачкообразное понижение спина основного состояния до минимального значения ($S_0 = 1/2$). При $J > 0,533$ S_0 увеличивается на единицу ($S_0 = 3/2$), что согласуется с оценкой (8).

Заключение

В рамках теории возмущений и формализма циклических спиновых перестановок построены эффективные гамильтонианы, описывающие нижнюю часть энергетического спектра t - J -модели на решетке «лестница-ожерелье» при слабом взаимодействии элементарных ячеек и произвольном числе дырок в наполовину заполненной зоне. Показано, что в модели «лестница-ожерелье» отсутствуют магнитные поляроны и переходы с изменением спина основного состояния при изменении заполнения зоны, которые наблюдаются в обычной прямоугольной лестнице, образованной слабозадействующими трехцентровыми элементарными ячейками.

С помощью численных расчетов показано, что изотропная модель Хаббарда с бесконечным отталкиванием на линейных фрагментах лестницы, образованных L элементарными ячейками ($L = 3-5$), при числе электронов $N = 3L - 1$ имеет основное состояние, вырожденное по спину. Учет конечности электронного отталкивания в рамках t - J -модели приводит к снятию вырождения. Показано, что при больших J спин основного состояния S_0 линейного фрагмента из L ячеек принимает значение $(L-1)/2$, а дырка локализуется на правом конце фрагмента.

Для циклических фрагментов лестницы с числом электронов на единицу меньшим числа узлов построены эффективные спиновые гамильтонианы негейзенберговского типа, описывающие нижнюю часть точно-

го энергетического спектра соответствующей t - J -модели. Таким образом, в этом частном случае получено точное разделение зарядовых и спиновых переменных. Численные расчеты продемонстрировали немонотонную зависимость спина основного состояния модели от обменного параметра J . В частности, при $L = 4$ увеличение J сначала ведет к скачкообразному понижению S_0 до минимального значения, а потом — к его увеличению до значения $S_0 = 3/2$, что согласуется с предложенной выше оценкой спина S_0 для больших значений J .

Приложение. Точные решения для циклического фрагмента NL из угловых ячеек, описываемого гамильтонианом Хаббарда с бесконечным отталкиванием в случае $N = 3L - 1$ и одного перевернутого спина

Рассмотрим циклический фрагмент решетки «лестница-ожерелье», состоящий из четного числа «угловых» ячеек и описываемый гамильтонианом Хаббарда с бесконечным отталкиванием. Если ограничиться описанием состояний с одной дыркой в наполовину заполненной зоне и одним перевернутым спином, гамильтониан фрагмента можно записать в более удобном для аналитических вычислений виде

$$\mathbf{H} = t_1 \mathbf{H}_1 + t_2 \mathbf{H}_2; \quad (\text{П.1})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_1 = & \sum_{n=1}^L \left[\mathbf{b}_{n,1}^+ \mathbf{b}_{n,2} P(n,1 \rightarrow n,2) + \mathbf{b}_{n,2}^+ \mathbf{b}_{n,1} P(n,2 \rightarrow n,1) + \right. \\ & \left. + \mathbf{b}_{n,2}^+ \mathbf{b}_{n,3} P(n,2 \rightarrow n,3) + \mathbf{b}_{n,3}^+ \mathbf{b}_{n,2} P(n,3 \rightarrow n,2); \right. \\ \mathbf{H}_2 = & \sum_{n=1}^L \left[\mathbf{b}_{n,1}^+ \mathbf{b}_{n+1,2} P(n,1 \rightarrow n+1,2) + \right. \\ & \left. + \mathbf{b}_{n+1,2}^+ \mathbf{b}_{n,1} P(n+1,2 \rightarrow n,1) + \mathbf{b}_{n,3}^+ \mathbf{b}_{n+1,2} P(n,3 \rightarrow n+1,2) + \right. \\ & \left. + \mathbf{b}_{n+1,2}^+ \mathbf{b}_{n,3} P(n+1,2 \rightarrow n,3) \right] \end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{b}_{n,i}^+$, $\mathbf{b}_{n,i}$ — бесспиновые фермиевские операторы рождения и уничтожения дырки на узле (n, i) , операторы $P(n,1 \rightarrow n,2)$, $P(n,1 \rightarrow n+1,2)$ и т.д. действуют на спиновые переменные следующим образом:

$$\begin{aligned} P(n,1 \rightarrow n,2) S_{n,1}^- |0\rangle &= S_{n,2}^- |0\rangle, \\ P(n,1 \rightarrow n+1,2) S_{n,1}^- |0\rangle &= S_{n+1,2}^- |0\rangle \text{ и т.д.} \end{aligned}$$

$|0\rangle$ — вектор вакуумного состояния, в котором все спины ориентированы параллельно избранной оси z . Циклические граничные условия предполагают, что узел с номером $(2, L+1)$ эквивалентен узлу с номером $(2, 1)$.

Таким образом, в (П.1) двойная нумерация используется как для спинов, так и для узлов решетки. Теперь вектор стационарного состояния с одной дыркой можно искать в виде

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j=1}^3 \sum_{m=1}^L A_{i,m}^{i,j} a_{i,i}^+ S_{m,j}^- |0\rangle \quad (\text{П.2})$$

с дополнительным условием отсутствия нефизических состояний $A_{n,n}^{i,j} = 0$. Вектор состояния (П.2) удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера

$$\mathbf{H}|\Psi\rangle = \varepsilon|\Psi\rangle.$$

Для волновой функции в узельном представлении $A_{n,m}^{i,j}$ получим систему уравнений в конечных разностях, которая состоит из 9 «основных» и 8 «граничных» уравнений. Рассмотрим сначала циклические граничные условия

$$A_{N+1,m}^{i,j} = A_{1,m}^{i,j}, \quad A_{n,N+1}^{i,j} = A_{n,1}^{i,j}. \quad (\text{П.3})$$

Трансляционная симметрия позволяет ввести квази-волновой вектор

$$A_{n,m}^{i,j} = e^{ik} A_{n+1,m+1}^{i,j}, \quad k = \frac{2\pi r}{L}, \quad r = 0, 1, \dots, L-1. \quad (\text{П.4})$$

и искать решение в виде

$$A_{n,m}^{i,j} = \exp(ikm) f_{n-m}. \quad (\text{П.5})$$

Данная модель имеет плоскость симметрии, что позволяет отдельно искать антисимметричные

$$\begin{aligned} A_{n,m}^{1,1} &= -A_{n,m}^{3,3}, \quad n \neq m; & A_{n,m}^{2,2} &= 0, \quad n \neq m; \\ A_{n,m}^{1,3} &= -A_{n,m}^{3,1}; & A_{n,m}^{2,1} &= -A_{n,m}^{2,3}; & A_{n,m}^{1,2} &= -A_{n,m}^{3,2}; \end{aligned} \quad (\text{П.6})$$

и симметричные решения

$$\begin{aligned} A_{n,m}^{1,1} &= A_{n,m}^{3,3}, \quad n \neq m; & A_{n,m}^{1,3} &= A_{n,m}^{3,1}; \\ A_{n,m}^{2,1} &= A_{n,m}^{2,3}; & A_{n,m}^{1,2} &= A_{n,m}^{3,2}. \end{aligned} \quad (\text{П.7})$$

Антисимметричные волновые функции (П.6) удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$\left\{ \begin{aligned} \varepsilon A_{n,m}^{1,1} - t_1 A_{n,m}^{2,1} - t_2 A_{n+1,m}^{2,1} &= 0, \quad n \neq m = 1, \dots, L, \\ \varepsilon A_{n,m}^{3,1} - t_1 A_{n,m}^{2,1} - t_2 A_{n+1,m}^{2,1} &= 0, \quad n, m = 1, \dots, L, \\ \varepsilon A_{n,m}^{2,1} - t_1 (A_{n,m}^{1,1} + A_{n,m}^{3,1}) - t_2 (A_{n-1,m}^{1,1} + A_{n-1,m}^{3,1}) &= 0, \quad m, n = 1, \dots, L; \quad m \neq n, n-1, \end{aligned} \right. \quad (\text{П.8})$$

$$\varepsilon A_{n,m}^{1,2} = 0, \quad m, n = 1, \dots, L; \quad m \neq n, n+1. \quad (\text{П.9})$$

Компоненты антисимметричной волновой функции, входящие в уравнения (П.8) и (П.9), связаны только через граничные условия:

$$\begin{aligned} \varepsilon A_{n,n}^{1,2} - t_1 A_{n,n}^{2,1} &= 0, \quad n = 1, \dots, L; \\ \varepsilon A_{n,n+1}^{1,2} - t_2 A_{n+1,n}^{2,1} &= 0, \quad n = 1, \dots, L; \\ \varepsilon A_{n,n}^{2,1} - t_1 (A_{n,n}^{1,2} + A_{n,n}^{3,1}) - t_2 (A_{n-1,n}^{1,1} + A_{n-1,n}^{3,1}) &= 0, \quad n = 1, \dots, L; \\ \varepsilon A_{n,n-1}^{2,1} - t_1 (A_{n,n-1}^{1,1} + A_{n,n-1}^{3,1}) - t_2 (A_{n-1,n-1}^{1,2} + A_{n-1,n-1}^{3,1}) &= 0, \quad n = 1, \dots, L. \end{aligned} \quad (\text{П.10})$$

Симметричные волновые функции (П.7) удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$\left\{ \begin{aligned} \varepsilon A_{n,m}^{1,1} - t_1 A_{n,m}^{2,1} - t_2 A_{n+1,m}^{2,1} &= 0, \quad n \neq m = 1, \dots, L; \\ \varepsilon A_{n,m}^{3,1} - t_1 A_{n,m}^{2,1} - t_2 A_{n+1,m}^{2,1} &= 0, \quad n, m = 1, \dots, L; \\ \varepsilon A_{n,m}^{2,1} - t_1 (A_{n,m}^{1,1} + A_{n,m}^{3,1}) - t_2 (A_{n-1,m}^{1,1} + A_{n-1,m}^{3,1}) &= 0, \quad m, n = 1, \dots, L; \quad m \neq n, n-1; \end{aligned} \right. \quad (\text{П.11})$$

$$\left\{ \begin{aligned} \varepsilon A_{n,m}^{1,2} - t_1 A_{n,m}^{2,2} - t_2 A_{n+1,m}^{2,2} &= 0, \quad m, n = 1, \dots, L; \quad m \neq n, n+1; \\ \varepsilon A_{n,m}^{2,2} - 2t_1 A_{n,m}^{1,2} - 2t_2 A_{n+1,m}^{1,2} &= 0, \quad n \neq m = 1, \dots, L. \end{aligned} \right. \quad (\text{П.12})$$

Компоненты симметричной волновой функции, входящие в уравнения (П.11) и (П.12), также связаны только через граничные условия:

$$\begin{aligned} \varepsilon A_{n,n}^{1,2} - t_1 A_{n,n}^{2,2} - t_2 A_{n+1,n}^{2,2} &= 0, \quad n = 1, \dots, L; \\ \varepsilon A_{n,n+1}^{1,2} - t_1 A_{n,n+1}^{2,2} - t_2 A_{n+1,n}^{1,2} &= 0, \quad n = 1, \dots, L; \end{aligned}$$

$$\varepsilon A_{n,n}^{2,1} - t_1 (A_{n,n}^{1,2} + A_{n,n}^{3,1}) - t_2 (A_{n-1,n}^{1,1} + A_{n-1,n}^{3,1}) = 0, \quad n = 1, \dots, L; \quad (\text{П.13})$$

$$\varepsilon A_{n,n-1}^{2,1} - t_1 (A_{n,n-1}^{1,1} + A_{n,n-1}^{3,1}) - t_2 (A_{n-1,n-1}^{1,2} + A_{n-1,n-1}^{3,1}) = 0, \quad n = 1, \dots, L.$$

В обоих случаях (П.8)–(П.10) и (П.11)–(П.13) существуют решения $A_{n,m}^{3,1} = -A_{n,m}^{1,1}$, $n \neq m$, отвечающие плоской зоне с нулевой энергией

$$\varepsilon_{\text{flat band}} = 0. \quad (\text{П.14})$$

Решения $A_{n,m}^{3,1} = A_{n,m}^{1,1}$, $n \neq m$ отвечают двум зонам

$$\varepsilon_{\pm}(k) = \pm \sqrt{2(t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos q)}, \quad (\text{П.15})$$

где

$$4 \sin q (L+1) = \sin q (L-1) \quad (\text{П.16})$$

для антисимметричных волновых функций и

$$\sin q (L-1) [\cos k - \cos q (L-1)] + 2 \sin q L (1 - \cos q L) = 0 \quad (\text{П.17})$$

для симметричных волновых функций соответственно. Для симметричных волновых функций, в частности, есть «ферромагнитные» решения: $q = \pm k$. Интересно отметить, что дисперсионные уравнения (П.16), (П.17) не содержат зависимости от параметра анизотропии $\alpha = t_2/t_1$, а в (П.16) нет также и зависимости от квази-волнового вектора k .

Для NL с открытыми концами в гамильтониане (П.1) нужно изменить верхний предел в сумме с L на $L-1$ в \mathbf{H}_2 . Симметрия волновой функции и уравнения, определяющие ее, не меняются, но вместо циклических граничных условий (П.3) имеем

$$A_{0,m}^{1,1} + A_{0,m}^{3,1} = 0; \quad A_{0,m}^{3,3} + A_{0,m}^{1,3} = 0;$$

$$A_{0,m}^{1,2} + A_{0,m}^{3,1} = 0; \quad A_{L+1,m}^{2,1} = 0;$$

$$A_{L+1,m}^{2,1} = 0; \quad A_{L+1,m}^{2,3} = 0; \quad A_{L+1,m}^{2,2} = 0. \quad (\text{П.18})$$

NL с открытыми концами не имеет трансляционной симметрии, поэтому мы не можем ввести квазиволновой вектор, и волновая функция зависит от обоих индексов m, n , а не от их $n-m$ разности, как было для замкнутой лестницы. В простом случае $A_{n,m}^{i,j} = A_n^i$ антисимметричные волновые функции дают только решения для плоской зоны (П.14), а симметричные волновые функции удовлетворяют дисперсионному уравнению:

$$x^{2(L+1)} - 1 + \alpha x (x^{2L} - 1) = 0. \quad (\text{П.19})$$

Ему отвечают энергии

$$\varepsilon = \pm \sqrt{2[t_1^2 + t_2^2 + t_1 t_2 (x + 1/x)]}. \quad (\text{П.20})$$

Уравнение (П.19) может иметь решения $x = \exp(iq)$ для квазинепрерывного спектра, аналогичного (П.15), и дополнительные действительные корни для локализованных на концах уровней с экспоненциально убывающей волновой функцией вблизи концов лестницы. При $t_{1,2} > 0$ параметр анизотропии $\alpha > 0$, поэтому уровни появляются при $-1 < x < 0$ для

$$\alpha > \frac{N+1}{N}, \quad (\text{П.21})$$

два уровня находятся между зонами (П.15). При $\alpha \gg 1$ их энергии $\varepsilon \rightarrow 0$ и совпадают с энергией плоской зоны (П.14).

1. H. Akagi and N. Uryû, *Phys. Lett.* **86A**, 248 (1981).
2. G. Sierra, M.A. Martín-Delgado, S.R. White, D.I. Scalapino, and I. Dukelsky, *cond-mat 9806251v1*.
3. H.-J. Mikeska and A.K. Kolezhuk, *Lect. Notes Phys.* **645**, 1 (2004).
4. В.О. Черановский, Е.В. Езерская, *ФHT* **34**, 287 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 223 (2008)].
5. M.H. Oliveira, E.P. Raposo, and M.D. Coutinho-Filho, *Phys. Rev.* **B80**, 205119 (2009).
6. G. Nagaoka, *Phys. Rev.* **147**, 392 (1966).
7. V.Ya. Krivnov, A.A. Ovchinnikov, and V.O. Cheranovskii, *Synth. Metals* **33**, 65 (1989).
8. V.O. Cheranovskii, *Int. J. Quant. Chem.* **41**, 695 (1992).
9. E.H. Lieb and D.J. Mattis, *Math. Phys.* **3**, 749 (1962).
10. V.O. Cheranovskii, O. Esenturk, and H.O. Pamuk, *Phys. Rev.* **B58**, 12260. (1998).
11. E.R. Davidson, *J. Comput. Phys.* **17**, 87 (1975).
12. В.О. Черановский, *Теор. эксп. хим.* **20**, 468 (1984).
13. D.J. Klein and W.A. Seitz, *Phys.Rev.* **B10** 3317 (1974).

On the energy spectrum of t - J model on the distorted necklace ladder

V.O. Cheranovskii, E.V. Ezerskaya, and A.A. Kravchenko

The effective low-energy Hamiltonians for t - J model on distorted necklace ladder formed by weakly interacting unit cells are derived by means of perturbation theory and cyclic spin permutation formalism. It is shown that in contrast of similar rectangular ladder model there are no magnetic polarons in necklace ladder model. For finite necklace ladder fragments with L unit cells and $N = 3L - 1$ electrons nonmonotonic dependence of the ground state spin S_0 as function of exchange parameter J is shown numerically. In

particular, for cyclic fragment formed by 4 unit cells, at $0 < J < 0.02304$ the ground state spin equals to $11/2$. The increase of J leads to jump-wise decreasing of S_0 to minimal value, and then new increase up to the value $S_0 = 3/2$, which in agreement with our qualitative estimation $S_0 = (L - 1)/2$ for big values of J . The exact separation of charge and spin variables for cyclic necklace-ladder fragments for even L and $3L - 1$ electrons in correspondent t - J model is shown.

PACS: 75.10.Jm Quantized spin models, including quantum spin frustration;
75.40.Cx Static properties (order parameter, static susceptibility, heat capacities, critical exponents, etc.)

Keywords: t - J model, energy spectrum, necklace ladder.