

14. *Garanin D. A., Lutovinov V. S.* An aguation of the state of Ising model // *Solid State Com-muns.*— 1984.— 49, N 11.— P. 1049—1054.
15. *Garanin D. A., Lutovinov V. S.* Phase transition in classical vector model // *Ibid.*— 1984.— 50, N 3.— 219—222.
16. *Гаранин Д. А., Лутовинов В. С.* Квазительоровские ряды в теории магнетизма // *ТМФ.*— 1985.— 62, № 2.— С. 263—271.
17. *Opuszkiewicz Z.* On new approach to the Heisenberg ferromagnet // *Phys. Lett.*— 1976.— 57A, N 5.— P. 480—482.
18. *Стасюк И. В.* Уравнения для спиновых корреляторов в модели Изинга // *ФММ.*— 1971.— 7, № 4.— С. 669—704.
19. *Церковников Ю. А.* Вычисление корреляционных функций в модели Изинга с дально-действием // *ТМФ.*— 1972.— 11, № 1.— С. 385—402.
20. *Смарт Дж.* Эффективное поле в теории магнетизма.— М.: Мир, 1968.— 271 с.
21. *Юхновский И. Р.* Применение коллективных переменных и учет короткодействующих сил в теории заряженных частиц // *ЖЭТФ.*— 1958.— 34, вып. 2.— С. 379—389.
22. *Юхновский И. Р.* К статистической теории конденсированных систем с дальнедействую-щими и короткодействующими взаимодействиями.— Киев, 1979.— 34 с.— (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-79-133Р).
23. *Юхновский И. Р., Головкин М. Ф.* Статистическая теория классических равновесных систем.— Киев: Наук. думка, 1980.— 372 с.
24. *Golovko M. F., Yukhnovskiy I. R.* Approaches to the many-body theory of the dense ion-dipole plasma. Application to ionic solvation // *Chemical Physics of Solvation.* Vol. 1.— Amsterdam: Elsevier, 1985.— P. 138—183.
25. *Юхновский И. Р.* Метод смещений и коллективных переменных.— Киев, 1971.— 82 с.— (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-71-26Р).
26. *Ваврух М. В.* n -Частичные корреляционные функции взаимодействующего электронного газа // *ТМФ.*— 1987.— 50, № 3.— С. 430—432.
27. *Ваврух М. В., Крохмальский Т. Е.* Эффективные многочастичные взаимодействия ионов в металлах // *Там же.*— 1987.— 51, № 3.— С. 130—141.
28. *Ваврух М. В.* Базисный учет короткодействующих корреляций в многочастичных элек-тронных системах.— Киев, 1987.— 36 с.— (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики, ИТФ-87-56Р).
29. *Юхновский И. Р., Левицкий Р. Р., Сороков С. И.* Теория квазиспиновых систем с базисным учетом короткодействующих взаимодействий. Разложение по обратному радиусу дальнедействующего взаимодействия.— Киев, 1986.— 48 с.— (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-86-132Р).
30. *Юхновский И. Р., Сороков С. И., Левицкий Р. Р.* Теория квазиспиновых систем с базисным учетом короткодействующих взаимодействий. Суммирование приводи-мых диаграмм.— Киев, 1986.— 48 с.— (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-86-154Р).
31. *Юхновский И. Р., Левицкий Р. Р., Сороков С. И.* Теория квазиспиновых систем с ба-зисным учетом короткодействующих взаимодействий // *Современные проблемы ста-тистической физики. Тр. Всесоюз. конф. Т. 1.*— Киев: Наук. думка, 1989.— С. 392—398.
32. *Юхновский И. Р., Левицкий Р. Р., Сороков С. И., Дерзко О. В.* Теория квазиспиновых систем, описываемых квазиодномерной моделью Изинга в поперечном поле, с базисным учетом короткодействующих взаимодействий // *Изв. АН СССР. Сер. физ.*— 1991.— 55, № 3.— С. 481—490.
33. *Silva P. R., Sa Barreto F. C.* Transition temperature for effective field Ising model // *Phys. status solidi (b).*— 1982.— 113, N 1.— P. 67—72.
34. *Попов М. А.* Гауссово приближение в модели Изинга с дальнедействием // *ТМФ.*— 1990.— 83, № 3.— С. 455—461.
35. *Рюэль Д.* Статистическая механика. Строгие результаты.— М.: Мир, 1971.— 367 с.

Інститут фізики конденсованих систем
АН України, Львів

Одержано 9.07.92

УДК 538.945

І. В. СТАСЮК, А. М. ШВАЙКА

ЕЛЕКТРОННИЙ СПЕКТР ТА ЕФЕКТИВНА ОБМІННА ВЗАГОДІЯ В МОДЕЛІ МЮЛЛЕРА У ТЕОРІЇ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОЇ НАДПРОВІДНОСТІ

Для моделі Хаббарда при врахуванні взаємодії з локальними ангармонічними ко-ливаннями (так звана модель Мюллера) проведено самоузгоджений розрахунок спектра одноелектронних збуджень у лабілженні Хаббард-I і дослідження ефективної обмінної взаємодії між електронами. Використано підхід, що ґрунтується на точному розв'язку

© І. В. Стасюк, А. М. Швайка, 1993

одновузлової задачі. Одержаний спектр містить додаткові, порівняно з моделлю Хаббарда, підзони; взаємодія з коливною підсистемою (що описується псевдоспіновими змінними) приводить до порушення електрон-діркової симетрії і появи діркової провідності при половинному заповненні. Ефективна обмінна взаємодія між електронами на відміну від $t - J$ -моделі не є сталою і в залежності від стану псевдоспінової підсистеми може мати як антиферомагнітний, так і феромагнітний характер. При нерівноважності (безпорядку) коливної підсистеми має місце фрустрація обмінної взаємодії між електронами.

1. Вступ

Останнім часом у зв'язку з пошуком можливих механізмів явища високо-температурної надпровідності приділяється увага дослідженню різних теоретичних моделей, які в дусі моделі Хаббарда описують сильні електронні кореляції на одному вузлі кристалічної ґратки і доповнені, разом з тим, врахуванням тих чи інших особливостей електронних станів або динаміки ґратки досліджуваних кристалів. Серед них можна відзначити модель, у якій до гамільтоніана Хаббарда додається взаємодія електронів з модою ґраткових коливань, яка володіє значним локальним ангармонізмом. Таку властивість мають коливання вершинного кисню (O_{IV}) в мідно-оксидних надпровідниках [1]. Важлива роль вершинного кисню при фазовому переході в надпровідний стан відзначалась у працях [2, 3]. Установлена, зокрема, кореляція між енергетичним станом кисню і температурою T_c [4]. У праці [5] (див. [6]) показано, що взаємодія електронів з локальними ангармонічними коливаннями може привести до надпровідності. Для опису ангармонічних коливань у випадку локального потенціалу з двома мінімумами, розділеними досить високим бар'єром, може бути застосований псевдоспіновий формалізм [6, 7]. У цьому наближенні в [8] було розглянуто модель, де враховувалась взаємодія електронів з локальними коливаннями іонів (що характеризуються псевдоспіновими змінними S_i , $S_i^z = \pm 1/2$) у цій же комірці:

$$H' = \sum_i g(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) S_i^z,$$

при цьому $gn_i = g \sum_{\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ визначає зміну енергії електронного стану на i -му вузлі при переході кисню з одного мінімуму потенціалу в інший. В повний гамільтоніан моделі (яку називають ще моделлю Мюллера) входить також і член $-\Omega \sum_i S_i^z$, який описує так зване тунельне розщеплення двох найнижчих коливних рівнів кисню. Електронна підсистема описується при цьому гамільтоніаном Хаббарда. Подібний гамільтоніан може бути отриманий при розгляді так званого екситонного механізму [9]; він також був запропонований в [10] як модель для опису орбітальної релаксаційної моди кисневих орбіталей площини CuO .

Дослідження даної моделі проводилося здебільшого з використанням канонічного перетворення, яке дозволяє нехтувати взаємодією з локальними коливаннями, що приводить до гамільтоніана з ефективною електрон-електронною взаємодією. Виконувалися також кластерні розрахунки [10] і чисельне моделювання методом Монте-Карло [11].

Сильна одновузлова електронна кореляція приводить, як відомо, в моделі Хаббарда до розщеплення електронного спектра на дві підзони. Вплив однієї підзони на іншу може бути врахований за допомогою теорії збурень за параметром t/U (де t — інтеграл переносу; U — енергія одновузлового електронного відштовхування). При розгляді нижньої підзони це приводить до ефективного гамільтоніана так званої $t - J$ -моделі, де вплив верхньої підзони проявляється в появі обмінної взаємодії між електронами $J_{ij}^{\text{ef}} = -2t_{ij}^2/U$, яка при $U > 0$ має антиферомагнітний характер. Саме $t - J$ -модель знаходить протягом останнього часу широке застосування при розгляді електронного спектра шарів CuO в надпровідниках, вивченні його особливостей при наявності антиферомагнітного обміну [12]. У рамках $t - J$ -моделі можна описати і перехід у надпровідний стан [13].

Метою даної праці є аналіз спектра одноелектронних збуджень при різних концентраціях електронів і дослідження ефективної обмінної взаємодії між електронами у рамках моделі Мюллера, вивчення тих можливих особливостей електронного обміну, які можуть бути зумовлені наявністю та впливом псевдоспінової підсистеми (ангармонічних коливань ґратки). При цьому буде враховано складний характер одноелектронного спектра моделі, який від випадку моделі Хаббарда відрізняється наявністю значно більшого числа підзон [14]. Отримані результати дадуть можливість розглянути крім безпосереднього впливу псевдоспінової підсистеми на взаємодію між електронами також роль нестехіометрії за киснем та пов'язаної з цим дефектності структури у формуванні антиферомагнітного стану (чи, можливо, впорядкувань іншого типу) у площинах CuO .

2. Гамільтоніан

Гамільтоніан моделі Мюллера має вигляд

$$H = \sum_i \mathcal{H}_i + \sum_{ij} t_{ij} (a_{i\uparrow}^\dagger a_{j\uparrow} + a_{i\downarrow}^\dagger a_{j\downarrow}), \quad (2.1)$$

тут

$$\mathcal{H}_i = E_0 (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + gn_i S_i^z + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \Omega S_i^x. \quad (2.2)$$

Одноузловий гамільтоніан можна привести до діагонального вигляду [14]. Для цього спочатку зобразимо його за допомогою операторів Хаббарда, які діють на базисі, одночастинкових станів $|n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}, S_i^z\rangle$:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \left|0, 0, \frac{1}{2}\right\rangle, & |\bar{1}\rangle &= \left|0, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle, \\ |2\rangle &= \left|1, 1, \frac{1}{2}\right\rangle, & |\bar{2}\rangle &= \left|1, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle, \\ |3\rangle &= \left|0, 1, \frac{1}{2}\right\rangle, & |\bar{3}\rangle &= \left|0, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle, \\ |4\rangle &= \left|1, 0, \frac{1}{2}\right\rangle, & |\bar{4}\rangle &= \left|1, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle. \end{aligned} \quad (2.3)$$

У цьому випадку

$$\begin{aligned} a_{i\uparrow} &= X_i^{14} + X_i^{32} + X_i^{\bar{1}\bar{4}} + X_i^{\bar{3}\bar{2}}, & a_{i\downarrow} &= X_i^{13} - X_i^{42} + X_i^{\bar{1}\bar{3}} - X_i^{\bar{4}\bar{2}}, \\ n_{i\uparrow} &= X_i^{22} + X_i^{44} + X_i^{\bar{2}\bar{2}} + X_i^{\bar{3}\bar{3}}, & n_{i\downarrow} &= X_i^{22} + X_i^{33} + X_i^{\bar{2}\bar{2}} + X_i^{\bar{3}\bar{3}}, \\ S_i^z &= \frac{1}{2} \sum_{p=1}^4 (X_i^{pp} - X_i^{\bar{p}\bar{p}}), & S_i^x &= \frac{1}{2} \sum_{p=1}^4 (X_i^{p\bar{p}} + X_i^{\bar{p}p}). \end{aligned} \quad (2.4)$$

В результаті маємо

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_i &= \left(E_0 + \frac{1}{2}g\right) (X_i^{33} + X_i^{44}) + \left(E_0 - \frac{1}{2}g\right) (X_i^{\bar{3}\bar{3}} + X_i^{\bar{4}\bar{4}}) + \\ &+ (2E_0 + U + g) X_i^{22} + (2E_0 + U - g) X_i^{\bar{2}\bar{2}} - \frac{1}{2}\Omega \sum_{p=1}^4 (X_i^{p\bar{p}} + X_i^{\bar{p}p}). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Здійснимо над гамільтоніаном (2.5) унітарне перетворення

$$\mathcal{H}_i \rightarrow \tilde{\mathcal{H}}_i = \hat{u} \mathcal{H}_i \hat{u}^{-1}, \quad (2.6)$$

яке приводить його до діагонального вигляду. Запишемо оператор \hat{u} :

$$\hat{u} = \prod_{p=1}^4 (\cos \varphi_p (X^{pp} + X^{\bar{p}\bar{p}}) - \sin \varphi_p (X^{p\bar{p}} - X^{\bar{p}p})), \quad (2.7)$$

тут

$$\begin{aligned}\varphi_1 &= \pi/4; \quad \varphi_2 = \arcsin \left[\frac{1}{2} - \frac{g}{\sqrt{(2g)^2 + \Omega^2}} \right]; \\ \varphi_3 &= \varphi_4 = \arcsin \left[\frac{1}{2} - \frac{g}{2\sqrt{g^2 + \Omega^2}} \right].\end{aligned}\quad (2.8)$$

Після перетворення отримаємо

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}_i &= \frac{\Omega}{2} (\tilde{X}_i^{11} - \tilde{X}_i^{\tilde{1}\tilde{1}}) + \left(U + 2E_0 + \frac{1}{2} \sqrt{(2g)^2 + \Omega^2} \right) \tilde{X}_i^{22} + \\ &+ \left(U + 2E_0 - \frac{1}{2} \sqrt{(2g)^2 + \Omega^2} \right) \tilde{X}_i^{\tilde{2}\tilde{2}} + \left(E_0 + \frac{1}{2} \sqrt{g^2 + \Omega^2} \right) (\tilde{X}_i^{33} + \tilde{X}_i^{44}) + \\ &+ \left(E_0 - \frac{1}{2} \sqrt{g^2 + \Omega^2} \right) (\tilde{X}_i^{\tilde{3}\tilde{3}} + \tilde{X}_i^{\tilde{4}\tilde{4}}) \equiv \sum_p \varepsilon_p \tilde{X}_i^{pp},\end{aligned}\quad (2.9)$$

де

$$\tilde{X}_i^{pq} = \hat{u}^{-1} X^{pq} \hat{u}. \quad (2.10)$$

Гамільтоніан (2.9) одновузлової задачі має діагональний вигляд і дає точний розв'язок для моделі Мюллера при відсутності переносу. Взаємодія з псевдоспіном приводить до розщеплення кожного з енергетичних рівнів: $0, E_0, 2E_0 + U$, які є в моделі Хаббарда при $t = 0$, на два підрівні, відповідно $0 \pm \Omega/2, E_0 \pm \frac{1}{2} \sqrt{g^2 + \Omega^2}, 2E_0 + U \pm \frac{1}{2} \sqrt{(2g)^2 + \Omega^2}$. При наявності тунельного розщеплення коливних рівнів ($\Omega \neq 0$) стани, що відповідають цим підрівням, є лінійною комбінацією станів (2.3) з однаковою електронною конфігурацією, але протилежними напрямками z -компоненти псевдоспіна. Оператори \tilde{X}^{pq} діють на базисі цих «змішаних» одновузлових станів. При цьому

$$\begin{aligned}\tilde{a}_{i\uparrow} &= \hat{u} a_{i\uparrow} \hat{u}^+ = \cos(\varphi_4 - \varphi_1) (\tilde{X}_i^{14} + \tilde{X}_i^{\tilde{1}\tilde{4}}) + \cos(\varphi_2 - \varphi_3) (\tilde{X}_i^{32} + \tilde{X}_i^{\tilde{3}\tilde{2}}) + \\ &+ \sin(\varphi_4 - \varphi_1) (\tilde{X}_i^{\tilde{1}\tilde{4}} - \tilde{X}_i^{14}) + \sin(\varphi_2 - \varphi_3) (\tilde{X}_i^{\tilde{3}\tilde{2}} - \tilde{X}_i^{32}),\end{aligned}\quad (2.11)$$

$$\begin{aligned}\tilde{a}_{i\downarrow} &= \hat{u} a_{i\downarrow} \hat{u}^+ = \cos(\varphi_3 - \varphi_1) (\tilde{X}_i^{13} + \tilde{X}_i^{\tilde{1}\tilde{3}}) - \cos(\varphi_2 - \varphi_4) (\tilde{X}_i^{42} + \tilde{X}_i^{\tilde{4}\tilde{2}}) + \\ &+ \sin(\varphi_3 - \varphi_1) (\tilde{X}_i^{\tilde{1}\tilde{3}} - \tilde{X}_i^{13}) - \sin(\varphi_2 - \varphi_4) (\tilde{X}_i^{\tilde{4}\tilde{2}} - \tilde{X}_i^{42}),\end{aligned}\quad (2.12)$$

або скорочено

$$\tilde{a}_{i\uparrow} = \sum_{mn} A_{mn}^\uparrow \tilde{X}_i^{nm}, \quad \tilde{a}_{i\downarrow} = \sum_{mn} A_{mn}^\downarrow \tilde{X}_i^{nm}, \quad (2.13)$$

де $m, n = 1 \dots 4, \tilde{1} \dots \tilde{4}$;

$$\tilde{a}_{i\uparrow}^\dagger = \sum_{mn} A_{mn}^\uparrow \tilde{X}_i^{mn}, \quad \tilde{a}_{i\downarrow}^\dagger = \sum_{mn} A_{mn}^\downarrow \tilde{X}_i^{mn}. \quad (2.14)$$

Очевидно,

$$\begin{aligned}A_{41}^\uparrow &= A_{4\tilde{1}}^\uparrow = \cos(\varphi_4 - \varphi_1), & A_{23}^\uparrow &= A_{\tilde{2}\tilde{3}}^\uparrow = \cos(\varphi_2 - \varphi_3), \\ A_{41}^\downarrow &= -A_{4\tilde{1}}^\downarrow = \sin(\varphi_4 - \varphi_1), & A_{23}^\downarrow &= -A_{\tilde{2}\tilde{3}}^\downarrow = \sin(\varphi_2 - \varphi_3), \\ A_{31}^\downarrow &= A_{\tilde{3}\tilde{1}}^\downarrow = \cos(\varphi_3 - \varphi_1), & A_{24}^\downarrow &= A_{\tilde{2}\tilde{4}}^\downarrow = -\cos(\varphi_2 - \varphi_4), \\ A_{31}^\uparrow &= -A_{\tilde{3}\tilde{1}}^\uparrow = \sin(\varphi_3 - \varphi_1), & A_{24}^\uparrow &= -A_{\tilde{2}\tilde{4}}^\uparrow = -\sin(\varphi_2 - \varphi_4),\end{aligned}\quad (2.15)$$

інші коефіцієнти A_{mn}^σ дорівнюють нулеві.

3. Спектр одноелектронних збуджень в наближенні Хаббард-І

3.1. Рівняння для функції Гріна. З рівнянь для одноелектронних функцій Гріна типу $\langle\langle \tilde{X} | \tilde{X} \rangle\rangle$, виконуючи розщеплення функцій Гріна вищих порядків у дусі наближення Хаббард-І [15], після простих перетворень одержуємо

$$\langle\langle \tilde{a}_\sigma | \tilde{X}^{mn} \rangle\rangle_{q,\omega} = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{A_{mn}^\sigma}{1 - t_q g_\sigma(\omega)} \frac{\langle \tilde{X}^{mm} + \tilde{X}^{nn} \rangle}{\hbar\omega - (\epsilon_m - \epsilon_n)}, \quad (3.1)$$

$$\langle\langle \tilde{a}_\sigma | \tilde{a}_\sigma^+ \rangle\rangle_{q,\omega} = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{1}{g_\sigma^{-1}(\omega) - t_q}, \quad (3.2)$$

де t_q — фур'є-образ інтеграла переносу;

$$g_\sigma(\omega) = \sum_{mn} \frac{(A_{mn}^\sigma)^2 \langle \tilde{X}^{mm} + \tilde{X}^{nn} \rangle}{\hbar\omega - (\epsilon_m - \epsilon_n)} \equiv \sum_v \frac{A_v}{\hbar\omega - \epsilon_v} \quad (3.3)$$

— функція Гріна (3.2) за відсутності переносу ($t_q = 0$).

Тут розглядається однорідний випадок ($\langle \tilde{X}^{mm} \rangle$ не залежить від номера комірки). У подальшому розглядатимемо випадок парамагнітного стану $\langle n_\uparrow \rangle = \langle n_\downarrow \rangle = n/2$; $\langle \tilde{X}^{44} \rangle = \langle \tilde{X}^{33} \rangle$; $\langle \tilde{X}^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle = \langle \tilde{X}^{\tilde{3}\tilde{3}} \rangle$; $g_\uparrow(\omega) = g_\downarrow(\omega) = g(\omega)$.

Використовуючи спектральну теорему, з (3.1) знаходимо систему рівнянь для середніх

$$I_{mn}^{(-)} \langle \tilde{X}^{mm} \rangle = I_{mn}^{(+)} \langle \tilde{X}^{nn} \rangle, \quad (3.4)$$

де

$$I_{mn}^{(\pm)} = \frac{\hbar}{\pi N} \sum_q \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{e^{\pm\beta(\hbar\omega - \mu)} + 1} \text{Im} \left[\frac{1}{(1 - t_q g(\omega - i\delta)) (\hbar(\omega - i\delta) - (\epsilon_m - \epsilon_n))} \right], \quad (3.5)$$

яку слід доповнити умовою нормування

$$\sum_m \langle \tilde{X}^{mm} \rangle = 1 \quad (3.6)$$

і рівнянням для хімічного потенціалу μ

$$\langle \hat{n} \rangle = \langle 2(\tilde{X}^{22} + \tilde{X}^{\tilde{2}\tilde{2}}) + \tilde{X}^{33} + \tilde{X}^{\tilde{3}\tilde{3}} + \tilde{X}^{44} + \tilde{X}^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle = n. \quad (3.7)$$

У подальшому суму за q в (3.5) замінимо інтегралом за t з прямокутною густиною станів $\rho(t) = 1/2W$ при $t \in [-W, W]$ і 0 в іншому випадку.

Рівняння (3.4) — (3.7) дають самоузгоджену систему рівнянь для розрахунку середніх $\langle \tilde{X}^{mm} \rangle$, знаючи які, з рівняння

$$g^{-1}(\omega) - t_q = 0 \quad (3.8)$$

можна отримати спектр одноелектронних збуджень.

3.2. Одноузлове наближення. У випадку відсутності переносу ($t_q = 0$) з (3.5) одержуємо

$$I_{mn}^{(\pm)} = \frac{1}{e^{\pm\beta(\epsilon_m - \epsilon_n - \mu)} + 1}, \quad (3.9)$$

що дає для середніх розподіл Больцмана

$$\langle \tilde{X}^{mm} \rangle = \frac{e^{-\beta\epsilon_m}}{\sum_n e^{-\beta\epsilon_n}}, \quad (3.10)$$

де $E_0 = -\mu$.

Підставляючи (3.10) в (3.7), одержуємо рівняння для хімічного потенціалу μ , розв'язок якого у границі $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow +\infty$) суттєво залежить від знака величини

$$U_{\text{eff}} = (\varepsilon_{\tilde{2}} - \varepsilon_{\tilde{3}}) - (\varepsilon_{\tilde{4}} - \varepsilon_{\tilde{1}}) = U - \left(\frac{1}{2} \Omega + \frac{1}{2} \sqrt{(2g)^2 + \Omega^2} - \sqrt{g^2 + \Omega^2} \right). \quad (3.11)$$

У разі додатного U_{eff} отримуємо

$$\mu = \varepsilon_{\tilde{4}} - \varepsilon_{\tilde{1}},$$

$$\langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle = 1 - n, \quad \langle \tilde{X}^{\tilde{3}\tilde{3}} \rangle = \langle \tilde{X}^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle = \frac{n}{2} \quad (3.12a)$$

для $0 < n < 1$ і

$$\mu = \varepsilon_{\tilde{2}} - \varepsilon_{\tilde{3}},$$

$$\langle \tilde{X}^{\tilde{2}\tilde{2}} \rangle = n - 1, \quad \langle \tilde{X}^{\tilde{3}\tilde{3}} \rangle = \langle \tilde{X}^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle = 1 - \frac{n}{2} \quad (3.12b)$$

для $1 < n < 2$.

При від'ємному U_{eff} для всіх значень концентрації електронів $n \in [0, 2]$ маємо

$$\mu = \frac{1}{2} (\varepsilon_{\tilde{2}} - \varepsilon_{\tilde{1}}), \quad \langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle = 1 - \frac{n}{2}, \quad \langle \tilde{X}^{\tilde{2}\tilde{2}} \rangle = \frac{n}{2}. \quad (3.13)$$

Залежності, подібні до (3.12), (3.13), можуть бути одержані і в звичайній моделі Хаббарда при $t_q = 0$ у випадку відповідно електрон-електронного відштовхування ($U > 0$) і притягання ($U < 0$). Параметр U_{eff} відіграє, таким чином, роль ефективної енергії одновузлової кореляції електронів, які взаємодіють з псевдоспіном.

У цьому можна перекопатися, перейшовши в одновузловому гамільтоніані (2.9) за допомогою виразів типу (2.4) від операторів \tilde{X}_i^{mn} до нових операторів числа частинок $\tilde{n}_{i\sigma}$ і псевдоспіна \tilde{S}_i^z

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_i = & \Omega \tilde{S}_i^z + [E_0 + (\sqrt{g^2 + \Omega^2} - \\ & - \Omega) \tilde{S}_i^z] (\tilde{n}_{i\uparrow} + \tilde{n}_{i\downarrow}) + \\ & + [U + (\sqrt{(2g)^2 + \Omega^2} - 2\sqrt{g^2 + \Omega^2} + \\ & + \Omega) \tilde{S}_i^z] \tilde{n}_{i\uparrow} \tilde{n}_{i\downarrow}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

З цього виразу в основному стані ($\tilde{S}_i^z = -1/2$) для енергії одновузлової взаємодії електронів впливає (3.11).

Спектр одноелектронних переходів за рахунок впливу псевдоспінової підсистеми складається з підрівнів $\varepsilon_v = \varepsilon_m - \varepsilon_n$, де $v = (mn) = \{(\tilde{4}\tilde{1}) (\tilde{4}\tilde{1}) (\tilde{4}\tilde{1}) (\tilde{4}\tilde{1}) (\tilde{2}\tilde{3}) (\tilde{2}\tilde{3}) (\tilde{2}\tilde{3}) (\tilde{2}\tilde{3})\}$.

Зміну спектра одноелектронних переходів при зміні g і Ω зображено на рис. 1.

3.3. Наближення незалежних підзон. При розгляді задачі з $t_q \neq 0$ обмежимося спочатку випадком, коли t набагато менше відстані між енергіями одноелектронних переходів. Тоді, враховуючи $\varepsilon_v(t_q) - \varepsilon_v \sim t_q$, де

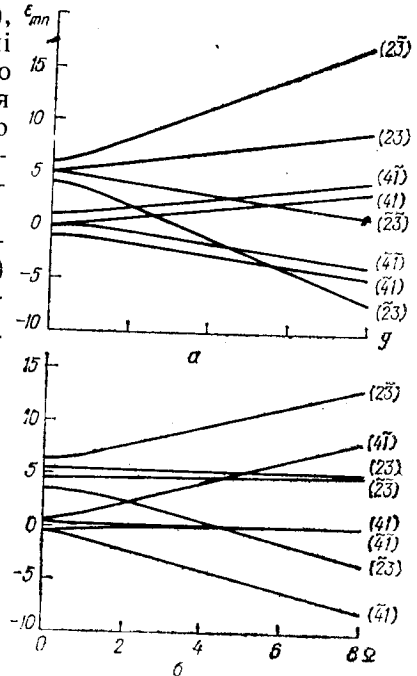


Рис. 1. Енергії одноелектронних переходів ε_{mn} при $U = 5$ як функції g при $\Omega = 1$ (а) і Ω при $g = 1$ (б)

$\varepsilon_v(t_g) = \hbar\omega(t_g)$ — розв'язки (3.8), одержуємо

$$\varepsilon_v(t) = \varepsilon_v + tA_v, I_v^{(\pm)} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2\beta W A_v} \ln \frac{\text{ch} \frac{\beta}{2} (\varepsilon_v + W A_v - \mu)}{\text{ch} \frac{\beta}{2} (\varepsilon_v - W A_v - \mu)} \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{1}{2} \mp \frac{1}{4W A_v} (|\varepsilon_v + W A_v - \mu| - |\varepsilon_v - W A_v - \mu|). \quad (3.15)$$

Підставляючи (3.15) в систему рівнянь (3.4), для підзони $v = (mn)$ дістаємо

$$|\varepsilon_m - \varepsilon_n + W (A_{mn}^\sigma)^2 \langle \tilde{X}^{nn} + \tilde{X}^{mm} \rangle - \mu| - |\varepsilon_m - \varepsilon_n - W (A_{mn}^\sigma)^2 \langle \tilde{X}^{nn} + \tilde{X}^{mm} \rangle - \mu| = 2W (A_{mn}^\sigma)^2 \langle \tilde{X}^{nn} - \tilde{X}^{mm} \rangle. \quad (3.16)$$

У залежності від положення хімічного потенціалу відносно підзони рівняння (3.16) має вигляд

$$\begin{aligned} \langle \tilde{X}^{nn} \rangle &= 0, & \text{коли } \mu > \varepsilon_{mn} (+W), \\ \mu &= \varepsilon_m + W (A_{mn}^\sigma)^2 \langle \tilde{X}^{mm} \rangle - (\varepsilon_n + W (A_{mn}^\sigma)^2 \langle \tilde{X}^{nn} \rangle), & \text{коли } \varepsilon_{mn} (-W) < \mu < \varepsilon_{mn} (+W), \\ \langle \tilde{X}^{mm} \rangle &= 0, & \text{коли } \mu < \varepsilon_{mn} (-W). \end{aligned} \quad (3.17)$$

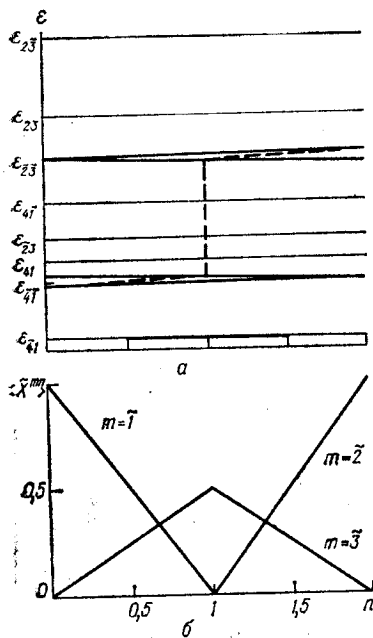


Рис. 2. Концентраційні залежності границь зон $\varepsilon_v (\pm W)$ (суцільна крива) і хімічного потенціалу μ (штрихова) (а); середніх заповнення $\langle \tilde{X}^{mn} \rangle$ (б) для наближення незалежних підзон ($U = 2,5$, $g = 1$, $\Omega = 1,1$, $W = 0,1$)

дію між двома підзонами можна врахувати, зберігаючи відповідні члени в (3.3):

$$g(\omega) = \frac{A_v}{\hbar\omega - \varepsilon_v} + \frac{A_\lambda}{\hbar\omega - \varepsilon_\lambda}. \quad (3.18)$$

Розв'язки (3.8) дають наступні вирази для спектра:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\lambda, \nu}(t) &= a(t) \pm b(t) = \frac{1}{2} (\varepsilon_{\lambda} + tA_{\lambda} + \varepsilon_{\nu} + tA_{\nu}) \pm \\ &\pm \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_{\lambda} + tA_{\lambda} - \varepsilon_{\nu} - tA_{\nu})^2 + 4t^2 A_{\lambda} A_{\nu}}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Інтеграли (3.5) у цьому наближенні такі:

$$\begin{aligned} I_{\nu}^{(\pm)}(\mu) &= \frac{1}{2} \mp I_1(\mu) \pm A_{\lambda} I_2(\mu), \\ I_{\lambda}^{(\pm)}(\mu) &= \frac{1}{2} \mp I_1(\mu) \mp A_{\nu} I_2(\mu), \end{aligned} \quad (3.20)$$

де

$$\begin{aligned} I_1(\mu) &= \frac{1}{2\beta W (A_{\nu} + A_{\lambda})} \ln \frac{\text{ch } \beta (a(W) - \mu) + \text{ch } \beta b(W)}{\text{ch } \beta (a(-W) - \mu) + \text{ch } \beta b(-W)}; \\ I_2(\mu) &= \frac{1}{4W (A_{\nu} + A_{\lambda})} \int_{-W}^W \frac{dt}{b(t)} \frac{\text{sh } \beta b(t)}{\text{ch } \beta (a(t) - \mu) + \text{ch } \beta b(t)}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Тут $E_0 = 0$.

Взаємодія підзон $(\tilde{1}\tilde{4})$ і $(\tilde{1}\tilde{4})$. Взаємодія між підзонами $(\tilde{1}\tilde{4})$ і $(\tilde{1}\tilde{4})$ стає важливою при малих значеннях параметра тунелювання ($\Omega \ll W$). У цьому випадку в (3.18) слід покласти

$$\begin{aligned} A_{\tilde{1}\tilde{4}} &= \cos^2(\varphi_4 - \varphi_1) \langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} + \tilde{X}^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle, \\ A_{\tilde{1}\tilde{4}} &= \sin^2(\varphi_4 - \varphi_1) \langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} + \tilde{X}^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Якщо врахувати, що дана взаємодія є суттєвою, коли хімічний потенціал знаходиться в зоні $(\tilde{1}\tilde{4})$, тобто, коли $n < 1$, то

$$\begin{aligned} \langle \tilde{X}^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle &= \frac{n}{2}, \quad \langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} + \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle = 1 - n, \\ \langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle &= \frac{I_{41}^{(-)}}{I_{41}^{(+)}} \frac{n}{2}, \quad \langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle = \frac{I_{41}^{(-)}}{I_{41}^{(+)}} \frac{n}{2}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

що дає рівняння для хімічного потенціалу

$$(I_{41}^{(+)} + I_{41}^{(-)}) \frac{n}{2} = I_{41}^{(+)} I_{41}^{(-)}. \quad (3.24)$$

Результати чисельних розрахунків наведені на рис. 3. При концентрації електронів, при якій заповнена нижня підзона і хімічний потенціал перестрибує у верхню, спостерігається особлива поведінка енергетичного спектра і середніх заповнень $\langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle$ і $\langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle$, зумовлена внесками від $\langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle = \langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle \neq 0$, які визначають середнє значення x -компоненти псевдоспіна.

Взаємодія підзон $(\tilde{1}\tilde{4})$ і $(\tilde{3}\tilde{2})$. Взаємодію між підзонами $(\tilde{1}\tilde{4})$ і $(\tilde{3}\tilde{2})$ можна врахувати, якщо для A_{λ} і A_{ν} в (3.18) покласти

$$\begin{aligned} A_{\tilde{1}\tilde{4}} &= \cos^2(\varphi_4 - \varphi_1) \langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} + \tilde{X}^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle, \\ A_{\tilde{3}\tilde{2}} &= \cos^2(\varphi_2 - \varphi_3) \langle \tilde{X}^{\tilde{3}\tilde{3}} + \tilde{X}^{\tilde{2}\tilde{2}} \rangle \end{aligned} \quad (3.25)$$

і для основного стану (коли $\Omega \gg W$) використати

$$\langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} + \tilde{X}^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle = 1 - \frac{n}{2}, \quad \langle \tilde{X}^{\tilde{3}\tilde{3}} + \tilde{X}^{\tilde{2}\tilde{2}} \rangle = \frac{n}{2}. \quad (3.26)$$

Таке наближення аналогічне моделі Хаббарда з ефективним кулонівським

відштовхуванням (3.11), але з різними інтегралами переносу для підзон

$$t_{\tilde{1}\tilde{4}} = t \cos^2(\varphi_4 - \varphi_1), \quad t_{\tilde{3}\tilde{2}} = t \cos^2(\varphi_2 - \varphi_3), \quad (3.27)$$

що є результатом ефективного звуження зон за рахунок взаємодії з ангармонічною модою [10].

Підставляючи (3.25) в (3.19), для середніх одержуємо

$$\begin{aligned} \langle \tilde{X}^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle &= \left(\frac{1}{2} + I_1 - A_{\tilde{3}\tilde{2}} I_2 \right) \left(1 - \frac{n}{2} \right), \\ \langle \tilde{X}^{\tilde{2}\tilde{3}} \rangle &= \left(\frac{1}{2} - I_1 - A_{\tilde{1}\tilde{4}} I_2 \right) \frac{n}{2}, \\ \langle \tilde{X}^{\tilde{3}\tilde{3}} \rangle &= \langle \tilde{X}^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle = \left(\frac{1}{2} - I_1 + A_{\tilde{3}\tilde{2}} I_2 \right) \left(1 - \frac{n}{2} \right) = \\ &= \left(\frac{1}{2} + I_1 + A_{\tilde{1}\tilde{4}} I_2 \right) \frac{n}{2}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

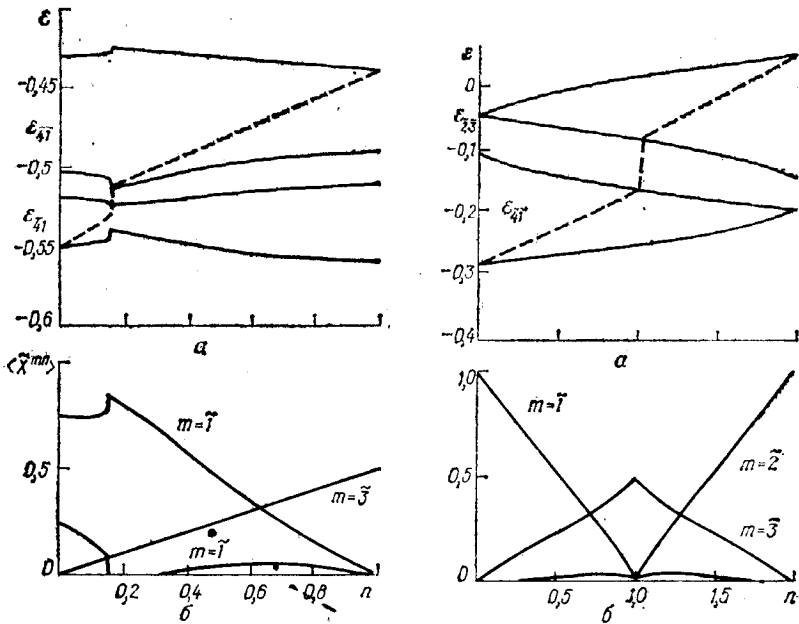


Рис. 3. Те саме, що на рис. 2, для двозонного наближення $(\tilde{1}\tilde{4}) + (\tilde{1}\tilde{4})$ ($U = 2,5, g = 1, \Omega = 0,05, W = 0,1$)

Рис. 4. Те саме, що на рис. 2, для двозонного наближення $(\tilde{1}\tilde{4}) + (\tilde{3}\tilde{2})$ у випадку ефективного електрон-електронного відштовхування ($U = 0,35, g = 1, \Omega = 1,1, W = 0,1, U_{\text{eff}} = 0,145$)

Рівняння для хімічного потенціалу має вигляд

$$\frac{1-n}{2} - I_1(\mu) = I_2(\mu) \frac{n}{2} \left(1 - \frac{n}{2} \right) (\cos^2(\varphi_4 - \varphi_1) - \cos^2(\varphi_2 - \varphi_3)). \quad (3.29)$$

Основна відмінність від моделі Хаббарда полягає в існуванні факторів $\cos^2(\varphi_4 - \varphi_1)$ і $\cos^2(\varphi_2 - \varphi_3)$, які приводять до ефективного звуження зон (даний ефект, зумовлений взаємодією з псевдоспіном, вперше відзначено у праці [10]). При відсутності взаємодії з псевдоспіном ($g = 0$) маємо $\cos^2(\varphi_2 - \varphi_3) = \cos^2(\varphi_4 - \varphi_1) = 1$ і вираз в правій частині (3.29) дорівнює нулеві.

Результати чисельних розрахунків наведені на рис. 4 і 5. Для додатного U_{eff} (рис. 4) результати якісно співпадають з результатами для моделі Хаббарда з тією відмінністю, що внаслідок ефективного звуження зон стрибок хімічного потенціалу з нижньої зони у верхню відбувається при

концентрації $n_0 \neq 1$, яка у випадку $W \ll U_{\text{eff}}$ дорівнює

$$n_0 = 1 + \frac{1}{6} \left(\frac{W}{U_{\text{eff}}} \right)^2 (\cos^4(\varphi_2 - \varphi_3) - \cos^4(\varphi_4 - \varphi_1)) + \dots \quad (3.30)$$

При зменшенні U_{eff} відбувається зближення зон до повного їх злиття при $U_{\text{eff}} = 0$.

При від'ємному U_{eff} (рис. 5), у випадку вузьких зон $W \ll |U_{\text{eff}}|$, рівні (14) і (32) міняються місцями, а в поведінці хімічного потенціалу проявляються особливості. А саме, при зміні концентрації електронів хімічний потенціал спочатку знаходиться біля верхнього краю нижньої зони, після «заповнення» нижньої зони при концентрації $n_0 \neq 1$, яка в границі $W/U_{\text{eff}} \ll 1$ дорівнює

$$n_0 = 1 - \frac{\cos^4(\varphi_2 - \varphi_3) - \cos^4(\varphi_4 - \varphi_1)}{\cos^4(\varphi_2 - \varphi_3) + 4 \cos^2(\varphi_2 - \varphi_3) \cos^2(\varphi_4 - \varphi_1) + \cos^4(\varphi_4 - \varphi_1)}, \quad (3.31)$$

має місце стрибок хімічного потенціалу у верхню підзону, де він знаходиться біля її нижнього краю. Зміна концентрації відбувається за рахунок заповнення двійкових станів $|\tilde{2}\rangle$, тоді як заселеності одноелектронних станів $|\tilde{3}\rangle$ і $|\tilde{4}\rangle$ порядку $(W/U_{\text{eff}})^2$.

3.5. Аналіз особливостей одноелектронного спектра. Проведені розрахунки енергетичної структури основного стану моделі Мюллера виявили наступні особливості. Взаємодія з локальними ангармонічними коливаннями приводить до розщеплення кожної із зон одноелектронних переходів моделі Хаббарда на чотири підзони. Найбільш суттєву роль відіграють при $g > 0$, зони, що формуються електронними переходами $\tilde{1} \leftrightarrow \tilde{4}$ і $\tilde{3} \leftrightarrow \tilde{2}$. Різниця енергій цих переходів визначає ефективну електрон-електронну взаємодію на одному вузлі (3.11). Існують такі значення параметрів g і Ω , при яких ефективна взаємодія стає від'ємною (притягання), що сприяє утворенню локальних електронних пар. Якщо величина тунельного розщеплення коливних рівнів Ω менша ширини зони W , хімічний потенціал фіксується крім підзон (14) і (32) також в підзоні (14), яка від-

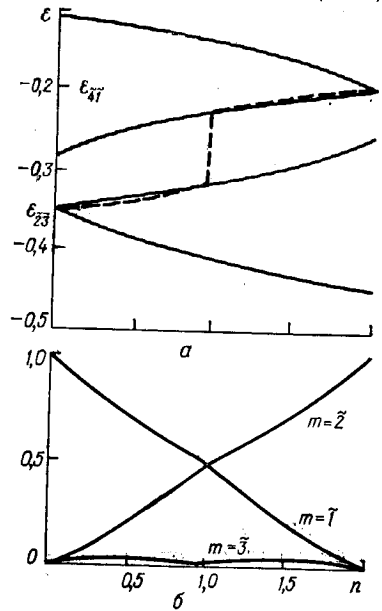


Рис. 5. Те саме, що на рис. 2 для двозонного наближення (14) + (32) у випадку ефективного електрон-електронного притягання ($U = 0,05$, $g = 1$, $\Omega = 1,1$, $W = 0,1$, $U_{\text{eff}} = -0,155$)

щеплюється від підзони (14) на відстань, що визначається параметром Ω .

Важливим результатом взаємодії електронів з псевдоспіном є порушення електрон-діркової симетрії. У моделі Хаббарда при нульовому інтегралі переносу ($t_q = 0$) спектр одноелектронних збуджень містить два рівні (14) і (32), які віддалені за енергією на енергію кулонівського відштовхування. При концентраціях, менших за половинне заповнення ($n < 1$), не існує двійкових станів, а при концентраціях, більших за половинне заповнення ($n > 1$), не існує пустих (діркових) станів. Запровадження переносу ($t_q \neq 0$) приводить до появи двійкових станів нижче за половинне заповнення ($n = 1 - \delta$) і пустих станів — вище за половинне заповнення ($n = 1 + \delta$), і їхні концентрації рівні при заданому відхиленні δ від половинного заповнення

$$\langle X^{22} \rangle_{|n=1-\delta} = \langle X^{11} \rangle_{|n=1+\delta} \sim \left(\frac{t}{U} \right)^2, \quad (3.32)$$

що і відображає електрон-діркову симетрію.

Якщо тепер запровадити взаємодію з псевдоєпінами, то одноелектронні зони моделі Хаббарда розщеплюються на підзони. Кількість станів у кожній з підзон визначається факторами $\cos^2(\varphi_r - \varphi_s)$ і $\sin^2(\varphi_r - \varphi_s)$. Як наслідок кількість двійкових станів нижче і пустих станів вище за половинне заповнення є різні при тому ж відхиленні δ :

$$\begin{aligned} \langle \tilde{X}^2 \tilde{2} \rangle |_{n=1-\delta} &\sim \left(\frac{t}{U_{\text{eff}}} \right)^2 \cos^4(\varphi_4 - \varphi_1), \\ \langle \tilde{X}^1 \tilde{1} \rangle |_{n=1+\delta} &\sim \left(\frac{t}{U_{\text{eff}}} \right)^2 \cos^4(\varphi_2 - \varphi_3). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Отже, має місце порушення електрон-діркової симетрії і система при положинному заповненні може проявляти діркову провідність, коли $\cos^2(\varphi_2 - \varphi_3) > \cos^2(\varphi_4 - \varphi_1)$, і електронну у протилежному випадку.

Наявність додаткових підзон у спектрі одноелектронних переходів так само, як і можливості діркової провідності, слід брати до уваги в усіх наступних дослідженнях можливості застосування моделі Мюллера у теорії високотемпературної надпровідності.

4. Ефективна обмінна взаємодія між електронами

4.1. Побудова ефективного гамільтоніана. Тепер переписемо гамільтоніан (2.1) у вигляді (нехтуючи надалі значками „ \sim ” над операторами)

$$H = \sum_{ip} \varepsilon_p X_i^{pp} + \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} \sum_{\substack{mn \\ m'n'}} A_{mn}^{\sigma} A_{m'n'}^{\sigma} X_i^{mn} X_j^{n'm'} \equiv \sum_{ip} \varepsilon_p X_i^{pp} + H_1. \quad (4.1)$$

Другий доданок у даній формулі може бути перетворений таким чином:

$$H_1 = \sum_{ij} t_{ij} \sum_{mn} a_{mn} X_i^{mn} X_j^{nm} + \sum_{ij} t_{ij} \sum'_{\substack{mn \\ m'n'}} b_{mn,m'n'} X_i^{mn} X_j^{n'm'}, \quad (4.2)$$

де

$$a_{mn} = \sum_{\sigma} (A_{mn}^{\sigma})^2; \quad b_{mn,m'n'} = \sum_{\sigma} A_{mn}^{\sigma} A_{m'n'}^{\sigma}. \quad (4.3)$$

Використовуючи фермієвський характер операторів X_i^{mn} , що входять в вираз (4.2), зобразимо коефіцієнти a , b в антисиметризованій формі

$$a_{mn} \rightarrow \frac{1}{2} (a_{mn} - a_{nm}) \equiv \bar{a}_{mn}, \quad (4.4)$$

$$b_{mn,m'n'} \rightarrow \frac{1}{2} (b_{mn,m'n'} - b_{n'm',nm}) \equiv \bar{b}_{mn,m'n'}.$$

Два члени, що виділені в (4.2), мають ненульові матричні елементи між одноузловими станами відповідно з однаковими та різними енергіями. Маючи на увазі випадок, коли інтеграл переносу малий у порівнянні з різницями між енергіями одноелектронних переходів ($(\varepsilon_m - \varepsilon_n) - (\varepsilon_{m'} - \varepsilon_{n'})$), розвинемо відповідну теорію збурень, враховуючи у незбурену частину гамільтоніана поруч з одноузловим оператором $\sum_i \mathcal{H}_i$ перший доданок з (4.2):

$$\begin{aligned} \hat{H} &= (\hat{H}_0 + \hat{H}_d) + \hat{H}', \quad (\hat{H}_0 + \hat{H}_d) = \sum_{ip} \varepsilon_p X_i^{pp} + \\ &+ \sum_{ij} t_{ij} \sum_{mn} a_{mn} X_i^{mn} X_j^{nm}, \quad \hat{H}' = \sum_{ij} t_{ij} \sum'_{\substack{mn \\ m'n'}} b_{mn,m'n'} X_i^{mn} X_j^{n'm'}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Як і при звичайному переході від моделі Хаббарда до $t - J$ -моделі [16, 17], застосуємо теорію збурень в операторній формі. Здійснимо унітарне перетворення

$$\hat{H} \rightarrow \bar{H} = e^{i\hat{S}} \hat{H} e^{-i\hat{S}}, \quad (4.6)$$

підбираючи оператор \hat{S} з умови зникнення в \bar{H} лінійних за t «недіагональних» доданків (типу таких, що входять в \hat{H}'):

$$\hat{H}' + i[\hat{S}, \hat{H}_0] = 0. \quad (4.7)$$

При цьому з точністю до членів другого порядку за t

$$\bar{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_d + i[\hat{S}, \hat{H}_d] + \frac{i}{2}[\hat{S}, \hat{H}']. \quad (4.8)$$

Запишемо оператор \hat{S} у формі

$$i\hat{S} = \sum_{ij} \sum'_{pq, rs} C_{ij}^{pq, rs} X_i^{pq} X_j^{rs}. \quad (4.9)$$

З умови ермітовості $\hat{S}^+ = \hat{S}$ випливає співвідношення

$$C_{ji}^{qp, sr} = C_{ij}^{pq, rs}. \quad (4.10)$$

Після підстановки (4.9) в (4.7) отримуємо

$$C_{ij}^{pq, rs} = -\frac{t_{ij} b_{pq, rs}}{\varepsilon_q - \varepsilon_p + \varepsilon_r - \varepsilon_s}. \quad (4.11)$$

Використовуючи даний результат, знаходимо

$$\frac{1}{2}[i\hat{S}, \hat{H}'] = \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum'_{pq, rs} \sum_{i_1, i_1'} \sum_{m, m'} t_{i, i_1} C_{ij}^{pq, rs} b_{mn, m'n'} [X_i^{pq} X_j^{sr}, X_{i_1}^{mn} X_{i_1'}^{m'n'}]. \quad (4.12)$$

Комутатор, який входить в даний вираз, виражається через суму доданків:

$$\begin{aligned} [X_i^{pq} X_j^{sr}, X_{i_1}^{mn} X_{i_1'}^{m'n'}] = & \delta_{ji_1} X_i^{pq} (X_j^{sn} \delta_{rm} + X_j^{nr} \delta_{ns}) X_{i_1}^{m'n'} - \\ & - \delta_{i_1 i} (X_i^{pn} \delta_{qm} + X_i^{mq} \delta_{np}) X_j^{sr} X_{i_1}^{m'n'} + \delta_{ji_1} X_{i_1}^{mn} X_i^{pq} (X_j^{sm'} \delta_{rn'} + X_j^{n'r} \delta_{m's}) - \\ & - \delta_{i_1 i} X_{i_1}^{mn} (X_i^{pm'} \delta_{qn'} + X_i^{n'q} \delta_{m'p}) X_j^{sr}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

кожен з яких залежить від трьох вузлових індексів; два можуть співпадати. Виділимо такі члени і запишемо окремо відповідні внески в (4.12):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}[i\hat{S}, \hat{H}'] \rightarrow & \sum_{ij} t_{ij}^2 \sum'_{pq} \sum_{q_1, r_1} b_{pq, rs} b_{q_1, r_1} \left[\frac{1}{\varepsilon_q - \varepsilon_p + \varepsilon_r - \varepsilon_s} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{\varepsilon_{q_1} - \varepsilon_q + \varepsilon_{r_1} - \varepsilon_r} \right] X_i^{pq_1} X_j^{sr_1}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Даний вираз описує ефективну взаємодію другого порядку за t між електронами на різних вузлах. Серед інших тут є доданки, які відповідають ефективному обміну. Їх і слід вважати основними у наближенні, що відповідає $t - J$ -моделі. Члени третього порядку за X -операторами в (4.13), які охоплюють три різні вузли, описують так звані корельованийі перенос електронів [18] та інші йому подібні процеси. При звичайному формуванні $t - J$ -моделі такі члени не враховуються.

4.2. Випадок $\Omega = 0$. Запишемо вираз (4.14) у явному вигляді. Спочатку розглянемо випадок $\Omega = 0$. При цьому

$$\begin{aligned} \varphi_1 = \varphi_2 = \varphi_3 = \varphi_4 = 0, \\ \varepsilon_{1, \bar{1}} = \varepsilon_{\bar{1}} = 0, \quad \varepsilon_{2, \bar{2}} = 2E_0 + U \pm g, \\ \varepsilon_{3, \bar{3}} = \varepsilon_{4, \bar{4}} = E_0 \pm \frac{1}{2} g. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Використовуючи співвідношення (2.15), (4.3), (4.4), отримуємо

$$\frac{1}{2}[i\hat{S}, \hat{H}'] \rightarrow \hat{Q} + \hat{R},$$

$$\hat{Q} = -2 \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(1)} X_i^{21} X_j^{12} + \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(2)} \left((X_i^{44} + X_i^{33}) X_j^{\bar{1}\bar{1}} - (X_j^{\bar{4}\bar{4}} + X_j^{\bar{3}\bar{3}}) X_i^{11} \right) - \\ - \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(3)} (X_i^{21} X_j^{\bar{1}\bar{2}} + X_i^{12} X_j^{\bar{2}\bar{1}}) + \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(4)} (X_i^{21} X_j^{\bar{1}\bar{2}} + X_i^{12} X_j^{\bar{2}\bar{1}}) + \\ + \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(5)} (X_i^{22} (X_j^{\bar{3}\bar{3}} + X_j^{\bar{4}\bar{4}}) - X_j^{\bar{2}\bar{2}} (X_i^{33} + X_i^{44})) - 2 \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(6)} X_i^{\bar{2}\bar{1}} X_j^{\bar{1}\bar{2}}, \quad (4.16)$$

$$\hat{R} = 2 \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(1)} (X_i^{44} X_j^{33} - X_i^{11} X_j^{22} - X_i^{43} X_j^{34}) + \\ + \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(3)} (X_i^{44} X_j^{\bar{3}\bar{3}} - X_i^{11} X_j^{\bar{2}\bar{2}} - X_i^{43} X_j^{\bar{3}\bar{4}} - X_i^{34} X_j^{\bar{4}\bar{3}} + X_i^{33} X_j^{\bar{4}\bar{4}} - \\ - X_i^{11} X_j^{\bar{2}\bar{2}}) + \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(4)} (X_i^{22} X_j^{\bar{1}\bar{1}} - X_i^{33} X_j^{\bar{4}\bar{4}} + X_i^{43} X_j^{\bar{3}\bar{4}} + X_i^{34} X_j^{\bar{4}\bar{3}} + \\ + X_i^{22} X_j^{\bar{1}\bar{1}} - X_i^{44} X_j^{\bar{3}\bar{3}}) + 2 \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(6)} (X_i^{\bar{4}\bar{4}} X_j^{\bar{3}\bar{3}} - X_i^{\bar{1}\bar{1}} X_j^{22} - X_i^{\bar{4}\bar{3}} X_j^{\bar{3}\bar{4}}). \quad (4.17)$$

Тут

$$\Lambda_{ij}^{(1)} = \Lambda_{ij}^{(6)} = -\frac{t_{ij}^2}{U}; \quad \Lambda_{ij}^{(2)} = \Lambda_{ij}^{(5)} = \frac{t_{ij}^2}{g}; \quad \Lambda_{ij}^{(3,4)} = \mp \frac{t_{ij}^2}{U \mp g}. \quad (4.18)$$

Доданки, які входять в оператор \hat{Q} , описують перенос двійок, а також взаємодії за участю двійок та дірок. При заповненнях, близьких до половинного ($n = \langle n_i \rangle = 1$; $n_i = \sum_{\sigma} n_{i\sigma}$), роль таких членів незначна.

Оператор \hat{R} перетворимо, використовуючи зв'язки (2.4) між операторами Хаббарда X_i^{mn} та фермі-операторами і операторами псевдоспіна. Введемо спінові оператори σ_i^{α} для опису електронного спінового моменту на вузлі:

$$\sigma_i^{\dagger} = \sigma_i^x + i\sigma_i^y = a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\uparrow}, \quad \sigma_i^{-} = \sigma_i^x - i\sigma_i^y = a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\uparrow}, \quad \sigma_i^z = \frac{1}{2} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}). \quad (4.19)$$

Враховуючи

$$X_i^{43} = \sigma_i^{\dagger} \left(\frac{1}{2} + S_i^z \right) \quad X_i^{34} = \sigma_i^{-} \left(\frac{1}{2} + S_i^z \right), \quad (4.20)$$

а також

$$\sum_{ij} f_{ij} \left[\frac{1}{4} (X_i^{44} X_j^{44} + X_i^{33} X_j^{33}) - \frac{1}{2} X_i^{44} X_j^{33} \right] = \\ = \sum_{ij} f_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z \left(\frac{1}{2} + S_i^z \right) \left(\frac{1}{2} + S_j^z \right), \\ \sum_{ij} f_{ij} \left[\frac{1}{4} (X_i^{33} + X_i^{44}) (X_j^{33} + X_j^{44}) - X_j^{11} X_j^{22} \right] = \\ = \sum_{ij} f_{ij} \left[\frac{1}{4} n_i n_j \left(\frac{1}{2} + S_i^z \right) \left(\frac{1}{2} + S_j^z \right) - X_j^{22} \left(\frac{1}{2} + S_j^z \right) \right] \quad (4.21)$$

(при $f_{ij} = f_{ji}$), отримуємо

$$2 \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(1)} (X_i^{44} X_j^{33} - X_i^{11} X_j^{22} - X_i^{43} X_j^{34}) = \\ = 2 \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(1)} \left(\frac{1}{4} n_i n_j - \sigma_i \sigma_j \right) \left(\frac{1}{2} + S_i^z \right) \left(\frac{1}{2} + S_j^z \right) - \\ - 2 \sum_{ij} \Lambda_{ij}^{(1)} X_j^{22} \left(\frac{1}{2} + S_j^z \right). \quad (4.22)$$

Подібним чином можуть бути перетворені інші члени з (4.17). У результаті

$$\hat{R} = -2 \sum_{ij} [\Lambda_{ij}^{(1)} P_i^{\dagger} P_j^{\dagger} + (\Lambda_{ij}^{(3)} - \Lambda_{ij}^{(4)}) P_i^{\dagger} P_j^{-} + \Lambda_{ij}^{(6)} P_i^{-} P_j^{-}] \left(\sigma_i \sigma_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) -$$

$$-2 \sum_{ij} \left[\Lambda_{ij}^{(0)} P_i^+ + \frac{1}{2} (\Lambda_{ij}^{(3)} - \Lambda_{ij}^{(4)}) P_i^- \right] X_j^{22} - 2 \sum_{ij} \left[\Lambda_{ij}^{(6)} P_i^- + \frac{1}{2} (\Lambda_{ij}^{(3)} - \Lambda_{ij}^{(4)}) P_i^+ \right] X_j^{\tilde{2}\tilde{2}} + 2 \sum_{ij} (\Lambda_{ij}^{(3)} + \Lambda_{ij}^{(4)}) (X_i^{22} X_j^{\tilde{1}\tilde{1}} - X_i^{11} X_j^{\tilde{2}\tilde{2}}), \quad (4.23)$$

де $P_i^\pm = 1/2 \pm S_i^z$ — оператори проекції на стани комірки з проекціями псевдоспіна $S_i^z = \pm 1/2$.

Перший доданок в (4.23) описує обмінну взаємодію між електронами. Ефективний обмінний інтеграл дається виразом

$$J_{ij}^{\text{eff}} = 2 [\Lambda_{ij}^{(0)} P_i^+ P_j^+ + (\Lambda_{ij}^{(3)} - \Lambda_{ij}^{(4)}) P_i^+ P_j^- + \Lambda_{ij}^{(6)} P_i^- P_j^-]. \quad (4.24)$$

Його величина залежить від орієнтації псевдоспінів на вузлах; при паралельній орієнтації

$$J_{ij}^{\pm\pm} = -2t_{ij}^2/U, \quad (4.25)$$

а при антипаралельній

$$J_{ij}^{+-} = -\frac{2t_{ij}^2 U}{U^2 - g^2}. \quad (4.26)$$

Звідси видно, що при половинному заповненні ($n \sim 1$) і при $U > |g|$ взаємодія між електронними спінами (4.24), яка має антиферромагнітний характер, є сильнішою в тому випадку, коли псевдоспіни у відповідних комірках мають протилежні значення z -компонент. При $U < |g|$ взаємодія (4.26) стає ферромагнітною.

4.3. Обмінна взаємодія при $\Omega \neq 0$. Результат, який свідчить про чутливість обмінної взаємодії між електронами до стану псевдоспінової підсистеми, може бути отриманий і при $\Omega \neq 0$. У цьому випадку застосуємо формули (4.14), (4.22) та перетворення

$$\begin{aligned} X_i^{43} &= \tilde{\sigma}_i^+ \left(\frac{1}{2} + \tilde{S}_i^z \right), & X_i^{\tilde{4}3} &= \tilde{\sigma}_i^+ \tilde{S}_i^-, \\ X_i^{\tilde{4}\tilde{3}} &= \tilde{\sigma}_i^+ \left(\frac{1}{2} - \tilde{S}_i^z \right), & X_i^{4\tilde{3}} &= \tilde{\sigma}_i^+ \tilde{S}_i^+ \end{aligned} \quad (4.27)$$

і т. ін., що означає перехід до операторів електронного чи псевдоспінового типу, введених за аналогією до вихідних, але на перетвореному згідно з (2.6) базисі. Для оператора \hat{R} отримаємо

$$\begin{aligned} \hat{R} &= - \sum_{ij} \left\{ J_{ij}^{++} P_i^+ P_j^+ + J_{ij}^{--} P_i^- P_j^- + J_{ij}^{+-} (P_i^+ P_j^- + P_i^- P_j^+) + \right. \\ &+ \frac{1}{2} (J_{ij}^{\uparrow\uparrow} + J_{ij}^{\downarrow\downarrow}) (S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-) + J_{ij}^{\uparrow\downarrow} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + \\ &+ \frac{1}{2} (J_{ij}^{\uparrow\downarrow} + J_{ij}^{\downarrow\uparrow}) [P_i^+ (S_j^+ + S_j^-) + P_j^+ (S_i^+ + S_i^-)] + \\ &+ \left. \frac{1}{2} (J_{ij}^{\downarrow\uparrow} + J_{ij}^{\uparrow\downarrow}) [P_i^- (S_j^+ + S_j^-) + P_j^- (S_i^+ + S_i^-)] \right\} (\vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j - \frac{1}{4} n_i n_j). \quad (4.28) \end{aligned}$$

Тут

$$J_{ij}^{++} = -t_{ij}^2 \sum_{pq} \frac{(A_{4p}^\uparrow)^2 (A_{q3}^\uparrow)^2 + (A_{3p}^\downarrow)^2 (A_{q4}^\downarrow)^2}{\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_3 - \varepsilon_4};$$

$$J_{ij}^{--} = -t_{ij}^2 \sum_{pq} \frac{(A_{4p}^\downarrow)^2 (A_{q3}^\downarrow)^2 + (A_{3p}^\uparrow)^2 (A_{q4}^\uparrow)^2}{\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_3 - \varepsilon_4};$$

$$J_{ij}^{+-} = -t_{ij}^2 \sum_{pq} \frac{(A_{4p}^\uparrow)^2 (A_{q3}^\downarrow)^2 + (A_{3p}^\downarrow)^2 (A_{q4}^\uparrow)^2}{\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_3 - \varepsilon_4};$$

$$\begin{aligned}
J_{ij}^{\uparrow\uparrow} &= \sum_{pq} \frac{t_{ij}^2 S_{pq}}{\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_3 - \varepsilon_4}; & J_{ij}^{\downarrow\downarrow} &= \sum_{pq} \frac{t_{ij}^2 S_{pq}}{\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_{\bar{3}} - \varepsilon_{\bar{4}}}; \\
J_{ij}^{\uparrow\downarrow} &= \sum_{pq} \frac{t_{ij}^2 S_{pq}}{\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_3 - \varepsilon_{\bar{4}}}; \\
J_{ij}^{\downarrow\uparrow} &= t_{ij}^2 \sum_{pq} \frac{(A_{4p}^{\uparrow})^2 A_{q3}^{\uparrow} A_{q\bar{3}}^{\uparrow} + A_{3p}^{\downarrow} A_{3p}^{\downarrow} (A_{q4}^{\downarrow})^2}{\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_3 - \varepsilon_4}; \\
J_{ij}^{\downarrow\downarrow} &= t_{ij}^2 \sum_{pq} \frac{A_{4p}^{\downarrow} A_{4p}^{\downarrow} (A_{q3}^{\downarrow})^2 + (A_{3p}^{\downarrow})^2 A_{q4}^{\downarrow} A_{q4}^{\downarrow}}{\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_3 - \varepsilon_{\bar{4}}}; \\
J_{ij}^{\uparrow\downarrow} &= t_{ij}^2 \sum_{pq} \frac{A_{4p}^{\uparrow} A_{4p}^{\uparrow} (A_{q3}^{\uparrow})^2 + (A_{3p}^{\downarrow})^2 A_{q4}^{\downarrow} A_{q4}^{\downarrow}}{\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_{\bar{3}} - \varepsilon_{\bar{4}}}; \\
J_{ij}^{\downarrow\uparrow} &= t_{ij}^2 \sum_{pq} \frac{(A_{4p}^{\downarrow})^2 A_{q3}^{\downarrow} A_{q\bar{3}}^{\downarrow} + A_{3p}^{\uparrow} A_{3p}^{\uparrow} (A_{q4}^{\uparrow})^2}{\varepsilon_p + \varepsilon_q + \varepsilon_3 - \varepsilon_{\bar{4}}}, \tag{4.29}
\end{aligned}$$

причому

$$S_{pq} = A_{4p}^{\uparrow} A_{4p}^{\uparrow} A_{q3}^{\uparrow} A_{q\bar{3}}^{\uparrow} + A_{3p}^{\downarrow} A_{3p}^{\downarrow} A_{q4}^{\downarrow} A_{q4}^{\downarrow}. \tag{4.30}$$

Вираз у фігурних дужках у формулі (4.28) є ефективним обмінним інтегралом для міжелектронної взаємодії у випадку $\Omega \neq 0$. Він є оператором за псевдоспіновими змінними*. Явні вирази для компонент можуть бути записані за допомогою формул (2.15). Зокрема, при $\Omega \ll |g|$, $\Omega \ll U$ після використання відповідних розкладів маємо

$$\begin{aligned}
J_{ij}^{\pm\pm} &= - \left(\frac{1 + \frac{\Omega}{g} - \frac{\Omega^2}{16g^2}}{U \pm \frac{\Omega}{2}} + \frac{1 - \frac{\Omega}{g} - \frac{\Omega^2}{16g^2}}{U \mp \frac{\Omega}{2}} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\Omega^2}{16g^2} \left[\frac{1}{U \mp 2g + \frac{\Omega}{2}} + \frac{1}{U \mp 2g - \frac{\Omega}{2}} \right] \right) t_{ij}^2, \\
J_{ij}^{\uparrow\downarrow} &= - \left(\frac{\frac{1}{2} - \frac{\Omega}{2g}}{U + g + \frac{\Omega}{2}} + \frac{\frac{1}{2} - \frac{\Omega}{2g}}{U - g - \frac{\Omega}{2}} + \frac{\frac{1}{2} + \frac{\Omega}{2g}}{U + g - \frac{\Omega}{2}} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\frac{1}{2} + \frac{\Omega}{2g}}{U - g + \frac{\Omega}{2}} \right) t_{ij}^2, \\
J_{ij}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)} &= \frac{\Omega}{4g} \left(\frac{1}{U \pm \frac{\Omega}{2}} - \frac{1}{U \mp \frac{\Omega}{2}} + \frac{1}{U \mp 2g \mp \frac{\Omega}{2}} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{U \mp 2g \pm \frac{\Omega}{2}} \right) t_{ij}^2, \\
J_{ij}^{\downarrow\uparrow} &= \frac{\Omega}{4g} \left(\frac{1}{U + g + \frac{\Omega}{2}} + \frac{1}{U - g - \frac{\Omega}{2}} - \frac{1}{U + g - \frac{\Omega}{2}} - \right.
\end{aligned}$$

* У звичайній t - J -моделі інтеграл ефективної обмінної взаємодії є сталою ($J_{ij}^{(0)} = -2t_{ij}^2/U$) і має антиферромагнітний характер.

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{U - g + \frac{\Omega}{2}} \Big) t_{ij}^2, \\
J_{ij}^{\uparrow(\downarrow)} = & - \left(\frac{-\frac{1}{2} \pm \frac{\Omega}{8g} + \frac{13\Omega^2}{32g^2}}{U + \frac{\Omega}{2}} + \frac{\frac{1}{2} \pm \frac{\Omega}{8g} - \frac{13\Omega^2}{32g^2}}{U - \frac{\Omega}{2}} + \right. \\
& \left. + \frac{\mp \frac{\Omega}{8g} + \frac{5\Omega^2}{32g^2}}{U \mp 2g - \frac{\Omega}{2}} + \frac{\mp \frac{\Omega}{8g} - \frac{5\Omega^2}{32g^2}}{U \mp 2g + \frac{\Omega}{2}} \right) t_{ij}^2, \\
J_{ij}^{\uparrow(\uparrow)} = & - \left(\frac{-\frac{1}{2} \pm \frac{\Omega}{8g} + \frac{13\Omega^2}{32g^2}}{U \pm g + \frac{\Omega}{2}} + \frac{\frac{1}{2} \pm \frac{\Omega}{8g} - \frac{13\Omega^2}{32g^2}}{U \pm g - \frac{\Omega}{2}} + \right. \\
& \left. + \frac{\mp \frac{\Omega}{8g} + \frac{5\Omega^2}{32g^2}}{U \mp g - \frac{\Omega}{2}} + \frac{\mp \frac{\Omega}{8g} - \frac{5\Omega^2}{32g^2}}{U \mp g + \frac{\Omega}{2}} \right) t_{ij}^2. \quad (4.31)
\end{aligned}$$

Значення компонент $J_{ij}^{\alpha\beta}$, співвідношення між ними та їх знаки залежать у цілому від величини енергетичних знаменників у формулах (4.29) чи (4.31). Як впливає з проведеного вище аналізу, особливу роль у поведінці хімічного потенціалу системи електронів і у заповненні електронних станів відіграє різниця енергій $U_{\text{eff}} = \varepsilon_2 + \varepsilon_1 - \varepsilon_3 - \varepsilon_4$ (див. (3.11)). При $U_{\text{eff}} < 0$ і $n = 1$ стани вузлів з одним електроном практично незаповнені, є в основному двійки і дірки. Гомеополарність при $n = 1$ є лише для $U_{\text{eff}} > 0$. Зміна знаків інших енергетичних знаменників в (4.29) при зміні співвідношень між параметрами U , g і Ω не впливає (у наближенні взаємодіючих підзон і при достатньо низьких температурах) на середні значення вузлових чисел заповнення $\langle X^{pp} \rangle$.

При малих відношеннях Ω/g , Ω/U коефіцієнти $J_{ij}^{\pm\pm}$ та $J_{ij}^{\pm-}$ залишаються основними складовими виразу (4.28) і є від'ємними при $U > g$; для $U < g$ $J^{\pm-} > 0$. У випадку $U < U^*$ при зростанні Ω і попаданні в область $U_{\text{eff}} < 0$ стає додатним коефіцієнт $J^{\pm-}$; це ж може мати місце при зростанні g для $U < \Omega/2$. Коефіцієнт J^{++} залишається від'ємним у переважній області значень Ω (за винятком безпосереднього околу полюсів, де міняє знак). При зростанні g відбувається збільшення $|J^{++}|$ для $U > \Omega$ (і відповідно зменшення для $U < \Omega$); для $U < \Omega/2$ при певних значеннях g коефіцієнт J^{++} може стати додатним (рис. 6, а).

Поведінка коефіцієнтів $J^{\uparrow\uparrow}$, $J^{\downarrow\downarrow}$, $J^{\uparrow\downarrow}$ і т. ін. при зміні параметрів Ω і g є більш складною. Їх знаки в залежності від співвідношень між Ω ,

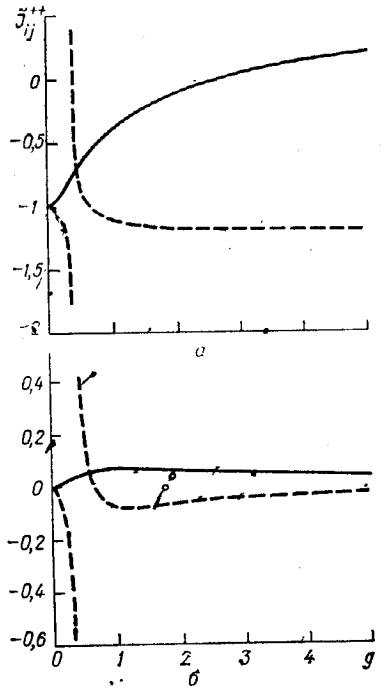


Рис. 6. Коефіцієнти ефективної обмінної взаємодії $\tilde{J}_{ij}^{\alpha\beta} = J_{ij}^{\alpha\beta} / |J_{ij}^{(0)}|$ (де $J_{ij}^{(0)} = -2t_{ij}^2/U$ — ефективна обмінна взаємодія t — J -моделі, $g = 0$) як функції g ($\Omega = 1$, $U = 0,3$ (суцільні криві); $U = 1,2$ (штрихові)): а — $\tilde{J}_{ij}^{\uparrow\uparrow}$; б — $\tilde{J}_{ij}^{\uparrow\downarrow}$

g і U можуть бути як від'ємними, так і додатними, а за абсолютними значеннями вони є менші за коефіцієнти $J^{\pm\pm}$, J^{+-} (рис. 6, б).

Тоді як компоненти $J^{\alpha\beta}$, що належать до першої групи ($J^{\pm\pm}$, J^{+-}), описують обмінну взаємодію між електронами в залежності від орієнтації псевдоспінів на вузлах (точніше, від коливних станів відповідних комірок) компоненти $J^{\alpha\beta}$ з другої групи характеризують складніші процеси, при яких електронний обмін супроводжується перекиданням псевдоспінів (змінною коливних станів).

Вплив коливної підсистеми на електронний обмін повинен проявлятися різним чином у залежності від того, в якому термодинамічному стані (рівноважному чи нерівноважному) перебуває ця підсистема. У випадку рівноваги при $\sqrt{g^2 + \Omega^2} \gg kT$ переважно заселеними є стани з $S_i^z = -1/2$. При цьому ефективний обмінний інтеграл буде мало відрізнятися від J^{--} і в області $U_{\text{eff}} > 0$ матиме антиферомагнітний характер. При $U_{\text{eff}} < 0$ він стає додатним, але це не повинно призвести до феромагнетизму, оскільки в цьому випадку, як зазначалось вище, порушується гомеополарність і електрони на вузлах збираються в пари.

Якщо має місце нерівноважність коливної підсистеми (коли реалізується стан типу «замороженого» безпорядку [19]), відносні частки вузлів, на яких псевдоспіни орієнтовані в цей чи інший бік, можуть бути величинами однакового порядку. Тоді у системі виникає ситуація, при якій обмінні взаємодії між різними вузлами можуть мати в залежності від розподілу псевдоспінів різну величину і навіть різні знаки. Це відповідає обговорюваній у працях [20, 21] можливості фрустрації обмінної взаємодії між електронами в площинах CuO у високотемпературних надпровідниках.

1. Cohen R. E., Pickett W. E., Krakauer H. Theoretical determination of strong electron-phonon coupling in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ // Phys. Rev. Lett.— 1990.— 64, N 21.— P. 2575—2578
2. Kwei G. H., Larson A. C., Hulth W. L., Smith J. L. Temperature dependence of the structure of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$: The role of the axial oxygens // Physica C.— 1990.— 169.— P. 217—226.
3. Couradson S. D., Raistrick I. D., Bishop A. R. Axial oxygen-centered lattice instabilities and high-temperature superconductivity // Science.— 1990.— 248, N 4961.— P. 1394—1398.
4. Ohta Y., Tohyama T., Hasekawa S. Transition temperature in copper oxide superconductors correlated with energy level of apical oxygen // Physica C.— 1990.— 1666, N 2.— P. 385—387.
5. Plakida N. M. Lattice instability and strong electron-phonon coupling for high- T_c superconductivity // Phys. Scr.— 1989.— 29.— P. 77—81.
6. Плакида Н. М. Высокотемпературные сверхпроводники.— Дубна, 1990.— 150 с.— (Препр./ АН УССР, ОИЯИ; 90. 191).
7. Plakida N. M., Aksenov V. L., Drechsler S. L. Anharmonic model for high- T_c superconductors // Europhys. Lett.— 1989.— 4, N 11.— P. 1309—1314.
8. Müller K. A. // Phase Transitions.— 1988.— (Special issue).
9. Bishop A. R., Martin R. L., Müller K. A., Tesanovic Z. Superconductivity in oxides: Toward a unified picture // Z. Phys. B.— 1989.— 76, N 1.— P. 17—24.
10. Hirsch J. E., Tang S. Effective interactions in an oxygen-hole metal // Phys. Rev. B.— 1989.— 40, N 4.— P. 2179—2186.
11. Frick M., Linden W., Morgenstern J., Raedt H. Local anharmonic vibrations, strong correlations and superconductivity: A quantum simulation study // Z. Phys. B.— 1990.— 81, N 2.— P. 327—335.
12. Изюмов Ю. А. Магнетизм и сверхпроводимость в сильно коррелированной системе // УФН.— 1991.— 161, № 11.— С. 1—46.
13. Anderson P. W., Baskaran G., Zou Z. Resonating-valence-bond theory of phase transitions and superconductivity in La_2CuO_4 based compounds // Phys. Rev. Lett.— 1987.— 58, N 36.— P. 2790—2793.
14. Стасюк И. В., Швайка А. М. Об электронном спектре модели Хаббарда при учете взаимодействия с локальными ангармоническими колебаниями.— Киев, 1991.— 25 с.— (Препр./ АН Украины. Ин-т физики конденсированных систем; ИФКС-91-56Р).
15. Hubbard E. Electron correlations on narrow energy bands // Proc. Roy. Soc.— 1963.— A276, N 1.— P. 238—257.
16. Дюдук Л. Д., Стасюк И. В. К теории ферромагнетизма в полярной модели // УФЖ.— 1968.— 13, № 6.— С. 899—904.
17. Asquarone M. Hubbard correlations in single bands / Physics Metals / Eds. E. S. Ginliano and C. Rissuto, World Scientific, 1988.
18. Hirsch J. E. Hole superconductivity: The strong coupling limit // Physica C.— 1989.— 161, N 2.— P. 185—194.

19. *Займан Дж.* Модели беспорядка. — М. : Мир, 1982. — 592 с.
 20. *Lu Y., Patton B. R.* Effects of spin frustration in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 1990. — 2, N 47. — P. 9423—9433.
 21. *Aristov D. N., Maleyev S. V.* Quantum frustration in quasi-2D antiferromagnets // *Z. Phys. B.* — 1990. — 81, N 3. — P. 433—440.

Інститут фізики конденсованих систем
 АН України, Львів

Одержано 9.07.92

УДК 538.9

Г. В. ПОНЕДІЛОК

ФУНКЦІОНАЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ В ТЕОРІЇ ФЕРОМАГНІТНИХ СПЛАВІВ ЗАМІЩЕННЯ

Метод функціонального інтегрування за бозе-полями застосовується для розрахунку термодинамічних властивостей магнітних сплавів заміщення. Детально розглянуто можливі у цьому підході способи виділення самоузгодженого поля. Розроблено схему розрахунку конфігураційно засереднених фізичних величин. Як приклад застосування запропонованого підходу розраховується вільна енергія сплаву. Отримано рівняння для розрахунку намагніченості і температури переходу парамагнетик — феромагнетик.

Вступ. У поданій статті вивчаються магнітні властивості бінарних сплавів заміщення на основі квантової моделі Гейзенберга. Ця модель є однією з найпростіших теорії магнетизму, яка доволі добре описує характерні властивості такого явища. До дослідження моделі Гейзенберга застосовувались різноманітні методи з арсеналу теоретичної фізики: діаграмна техніка [1, 2], кластерні розклади [3, 4], функціональне інтегрування [5—8].

Досить успішно «працює» модель Гейзенберга також в теорії структурно неупорядкованих магнетиків (аморфні системи, сплави заміщення). При дослідженні структурно неупорядкованої моделі Гейзенберга виникають додаткові принципові труднощі і проблеми, пов'язані з необхідністю здійснення конфігураційного засереднення спостережуваних фізичних величин. У працях [7, 8] зазначено, що найбільш зручним і ефективним методом розрахунку термодинамічних і динамічних властивостей з погляду конфігураційного засереднення є метод функціонального інтегрування. Власне, в цій праці і розглядаються деякі технічні деталі методу функціонального інтегрування і його використання до дослідження магнітних сплавів заміщення. Основна мета праці полягає в дослідженні внеску структурних флуктуацій у термодинамічні властивості. Тут, зокрема, обговорюються можливі схеми введення просторово неоднорідних параметрів порядку.

Модель бінарного магнітного сплаву. Розгляньмо правильну кристалічну ґратку, вузли якої $R_1, \dots, R_N \in \mathbb{Z}^3$ цілком хаотично (некорельовано) зайняті магнітними або немагнітними атомами. Фактично розглядається сплав заміщення типу $A_c B_{1-c}$, де c — концентрація магнітних; $(1-c)$ — концентрація немагнітних атомів. Випадку $c = 1$ відповідає ідеальний кристал з магнітних атомів.

Гамільтоніан вихідної моделі такого сплаву запишемо у вигляді

$$\hat{H} = -\mu h \sum_{1 \leq j \leq N} \hat{c}_j S_j^z - \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i < j \leq N} J(|R_i - R_j|) \hat{c}_i S_i \hat{c}_j S_j. \quad (1)$$

Тут μ — магнітний момент сорту A ; S_j — оператор спіна атома сорту A , що знаходиться в j -му вузлі ґратки.

Оператор спіна задовольняє умову $[S_j]^2 = S(S+1)$, де $\frac{1}{2} \leq S \leq \infty$ — величина спіна атома. Зовнішнє магнітне поле h направлене вздовж осі OZ лабораторної системи координат. Формальний оператор

© Г. В. Понеділок, 1993