

## О ТОЧНОСТИ "SLAVE-BOSON"-МЕТОДА В РАСЧЕТАХ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ

*С.Н.Молотков, С.С.Назин, И.А.Рыжкин*

*Институт физики твердого тела РАН  
142432 Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 11 мая 1994 г.

Найдено конкретное представление эффективного гамильтониана в "slave-boson"-методе и связей на фермионные и бозонные переменные дающих наилучшее приближение для точного решения в многозонном случае.

В ряде систем сильное межэлектронное взаимодействие является определяющим для их физических свойств. К таким системам относятся системы с тяжелыми фермионами [1], высокотемпературные сверхпроводники [2], а также магнитные полупроводники на основе халькогенидов переходных металлов с  $f$ -оболочками ( $\text{EuX}$ ,  $\text{GdX}$ ,  $\text{DyX}$ ;  $\text{X}=\text{O}$ ,  $\text{S}$ ,  $\text{Se}$ ,  $\text{Te}$ ) [3]. Основными моделями для описания сильнокоррелированных систем являются модель Хаббарда [4], модель Андерсона с бесконечным отталкиванием [5] и их различные варианты. Для этого класса решеточных моделей эффективным методом их исследования оказался так называемый "slave-boson"-метод, развитый в различных вариантах в работах [6-9]. Наиболее общим является вариант, предложенный в работе [9] (Kotliar, Ruckenstein) для однозонной модели Хаббарда.

"Slave-boson"-метод в комбинации с методом сильной связи использовался в ряде работ для расчета электронного спектра сильнокоррелированных систем (особенно часто для высокотемпературных сверхпроводников). Во всех таких расчетах используется приближение седловой точки, в котором бозонные поля заменяются их средними. При этом параметризация для бозонных полей, введенная в работе [9] для однозонной схемы, используется прямо для многозонных моделей.

Проблема заключается в том, что введение вспомогательных бозонов на уровне операторов не является однозначным. Требуется лишь точная на операторном уровне эквивалентность нового эффективного гамильтониана исходному. Поскольку введение бозонов расширяет пространство состояний, то для соблюдения точной эквивалентности на бозонные и фермионные операторы накладываются связи. Переход же к приближению седловой точки, грубо говоря, сводится к замене бозонных операторов их средними, при этом точная эквивалентность неконтролируемым образом нарушается. Общего правила выбора того или иного представления нет. Единственным критерием выбора является наилучшее совпадение с точным решением.

В данной работе путем сравнения результатов по "slave-boson" методу и точной диагонализации устанавливается параметризация бозонных полей в седловой точке, дающая наилучшее согласие для многозонного случая.

Метод точной диагонализации позволяет работать с небольшими кластерами, поэтому для определенности (а также имея ввиду дальнейшие приложения для реалистических расчетов соединений  $\text{EuX}$ ,  $\text{GdX}$  и  $\text{DyX}$ , кристаллизующихся в

решетку NaCl) будем рассматривать плоский квадратный кластер из атомов двух сортов. Гамильтониан запишем в виде

$$H = \sum_{i=\sigma} \epsilon_i f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} + \sum_{NN\sigma} t_{ij} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} + \sum_i U_i f_{i\uparrow}^{\dagger} f_{i\uparrow} f_{i\downarrow}^{\dagger} f_{i\downarrow}, \quad (1)$$

где  $\epsilon_i$  – узельная энергия ( $i = 1, 2$ ,  $t$  – интеграл перескока между ближайшими соседями). Считаем, что кулоновское отталкивание существенно только на узлах одного сорта. Например, для  $\text{CuO}_2$  только на атомах меди, для случая  $\text{EuX}$  – на атомах  $\text{Eu}$ . Полное число электронов в кластере равно 6, что отвечает ситуации для  $\text{EuX}$  (зона халькогена заполнена полностью, а переходного металла в  $f$ -оболочках – наполовину). Спектр гамильтониана для данного числа электронов получается диагонализацией матрицы  $16 \times 16$ .

Перейдем к "slave-boson"-представлению. Следуя работе [9], определим эффективный гамильтониан как

$$H_{eff} = \sum_{i\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + \sum_{NN\sigma} t_{ij} z_{i\sigma}^{\dagger} z_{j\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_i U_i d_i^{\dagger} d_i, \quad (2)$$

где  $z_{i\sigma} = (d_i^{\dagger} d_i + p_{i\sigma}^{\dagger} p_{i\sigma})^{-1/2} (p_{i\sigma}^{\dagger} e_i + d_i^{\dagger} p_{i-\sigma}) (e_i^{\dagger} e_i + p_{i-\sigma}^{\dagger} p_{i-\sigma})^{-1/2}$ ,  $c_{i\sigma}^{\dagger}$ ,  $c_{i\sigma}$  – фермионные операторы рождения,  $e_i^{\dagger}$ ,  $p_{i\sigma}^{\dagger}$ ,  $d_i^{\dagger}$  – операторы рождения вспомогательных бозонов. Гамильтониан (2) действует в расширенном пространстве состояний, являющемся тензорным произведением фермионного и бозонного подпространств. В этом расширенном пространстве можно выделить подпространство, определяемое связями

$$e_i^{\dagger} e_i + p_{i\uparrow}^{\dagger} p_{i\uparrow} + p_{i\downarrow}^{\dagger} p_{i\downarrow} + d_i^{\dagger} d_i = 1, \quad (3)$$

$$c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} = p_{i\sigma}^{\dagger} p_{i\sigma} + d_i^{\dagger} d_i, \quad (4)$$

в котором  $H_{eff}$  совпадает с  $H$ .

Отметим, что представление (2) не единственно. Очевидно, что в  $z_{i\sigma}$  могут быть добавлены в качестве правых и левых множителей любые операторные выражения, удовлетворяющие следующим условиям: 1) множители равны единице для всех состояний, для которых  $(p_{i\sigma}^{\dagger} e_i + d_i^{\dagger} p_{i-\sigma}) \neq 0$ ; 2) имеют произвольное значение для состояний, для которых  $(p_{i\sigma}^{\dagger} e_i + d_i^{\dagger} p_{i-\sigma}) = 0$ . В работе [9] этот произвол был использован для введения множителей  $(d_i^{\dagger} d_i + p_{i\sigma}^{\dagger} p_{i\sigma})^{-1/2}$  и  $(e_i^{\dagger} e_i + p_{i-\sigma}^{\dagger} p_{i-\sigma})^{-1/2}$ . Основным соображением было совпадение результатов в "slave-boson"-методе для однозонной модели Хаббарда в приближении седловой точки для изолированного центра и при  $U = 0$ .

В многозонной модели аналогичная неоднозначность возникает при выборе формы уже первого слагаемого в формуле (2). Наряду с использованными, те же матричные элементы дают выражения

$$\sum_{i\sigma} \epsilon_i z_{i\sigma}^{\dagger} z_{i\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}, \quad (5)$$

$$\sum_{i\sigma} \epsilon_i (p_{i\sigma}^{\dagger} p_{i\sigma} + d_i^{\dagger} d_i). \quad (6)$$

В однозонной схеме с узельными членами нет неоднозначности, все  $\epsilon_i$  одинаковы и всегда можно выбрать  $\epsilon_i = 0$ . Заметим, что указанная неоднозначность

имеет место и для связей (4), но не для (3). Например, можно было бы заменить связи (4) на следующие

$$c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} = (p_{i\sigma}^+ p_{i\sigma} + d_i^+ d_i)^{-1/2}, \quad (7)$$

которые выполняются на том же пространстве состояний, что и связи (4).

При точном решении задачи указанные неоднозначности не имеют никакого значения, все представления должны приводить к одинаковому ответу. Однако практическая ценность "slave-boson"-метода заключается в возможности использовать приближение седловой точки при вычислении функциональных интегралов по бозонным полям. На операторном языке это, по-существу, означает замену бозонных операторов  $c$ -числовыми средними и поиск минимума энергии при выполнении связей (3), (4). Такой способ решения является приближенным, и ответ зависит от конкретного выбора  $H_{eff}$ .

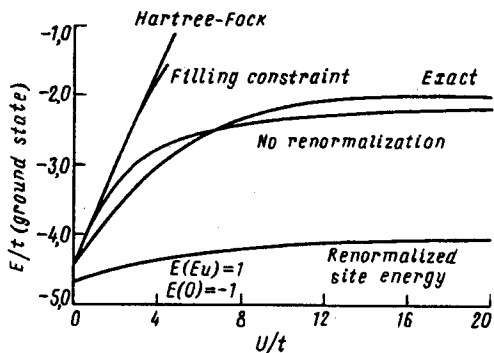


Рис.1

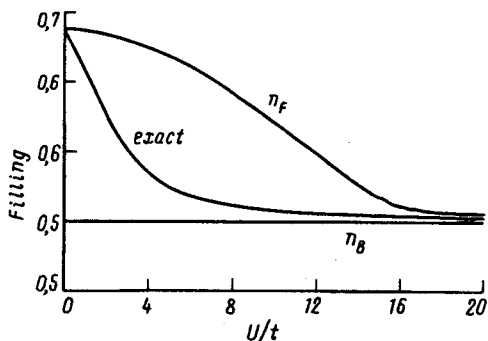


Рис.2

Рис.1. Энергия основного состояния для точного решения, различных типов связей в "slave-boson"-методе и приближении Хартри-Фока.

Рис.2. Среднее число электронов на узле  $\langle c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} \rangle$ . Кривая *Exact* отвечает точному решению,  $n_B$ -для связи (6),  $n_F$  - для связи, фиксирующей полное число электронов. Для всех кривых узельные энергии брались в перенормированном виде (2)

Нами были проделаны расчеты по "slave-boson"-методу с различными типами связей. Связь (3) при этих расчетах учитывалась точно для каждого узла в отдельности (это удобно сделать введя угловые переменные для средних бозонных полей на 4-мерной сфере). Для внутриузельных слагаемых использовались представления (2), (5), (6):

1) представление (6), вместе со связями вида  $\langle c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} \rangle = p_{i\sigma}^* p_{i\sigma} + d_i^* d_i$ , налагаемыми на каждом узле. При этом средние определялись самосогласованным образом. Данное приближение по-существу является приближением Хартри-Фока;

2) представление (5) с перенормированными узельными энергиями, а также с перенормированными (2). При этом фиксировалось лишь полное число электронов в системе  $N = \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}$ .

Наилучшее согласие с точным решением дают: связь (3), фиксация лишь полного числа электронов в системе и выражение с перенормированными узельными энергиями. Результаты расчетов и для упомянутых случаев и точного решения приведены на рис.1. Но даже в этом случае средние числа электронов на узле, рассчитанные через фермионные средние и бозонные

переменные, оказываются различными. Попытка улучшить совпадение узельных средних, то есть самосогласованный учет  $\langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \rangle = p_{i\sigma}^* p_{i\sigma} + d_i^* d_i$  заметно ухудшает совпадение с точным результатом. Качественно это означает, что флуктуации заполнений на узлах не являются слабыми. Поэтому отказ от этого условия и фиксация только полного числа электронов в системе ослабляет ограничения и дает более точные результаты. Результаты расчетов для чисел заполнения по "slave-boson"-методу и результаты точной диагонализации гамильтониана (1) для кластера представлены на рис.2. Таким образом, наилучшее согласие с точным результатом достигается при следующих условиях:

- 1) учет связей (3) выполняется точно ;
- 2) узельные слагаемые используются в неперенормированном виде (2);
- 3) фиксируется лишь полное число электронов в системе, а не на каждом узле отдельно путем самосогласования с фермионными средними.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках проекта 94-02-04843 и Международного научного фонда RE.8000.

- 
1. J.M.Lawrence, P.M.Riseborough, and R.D.Parks, Rep. Prog. Phys. **44**, 1 (1981).
  2. C.A.Balseiro, M.Avignon, A.G.Rojo, and B.Alascio, Phys. Rev. Lett. **62**, 2624 (1989).
  3. Rare Earths, ed. K.A.Gschneidner, Jr, Leo Eyring, S. Hüfner, North-Holland, vol.10 (1987).
  4. J.Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A276**, 238 (1963).
  5. P.W.Anderson, Phys. Rev. **126**, 41 (1961).
  6. E.Barnes, J. Phys. **F6**, 1375 (1976).
  7. P.Coleman, Phys. Rev. **B29**, 3035 (1984).
  8. N.Read and D.Newns, J. Phys. **C16**, 3273 (1983).
  9. G.Kotliar and A.F.Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986).