

# 三维 Hubbard-Hirsch 模型的铁磁性\*

姜 涛 刘金明

(中山大学物理学系, 广州 510275)

**摘 要** 应用么正变换微扰论和平均场近似研究了三维 Hubbard-Hirsch 模型的铁磁性. 发现单中心积分常数  $U$  太小或太大时, 只有双中心的交换积分常数  $J'' > J''_c > 0$ , 才可能有铁磁性. 而  $U$  为中间值时,  $J'' = 0$  需要用其他方法进一步研究. 掺杂结果不利于铁磁性, 使铁磁相的区域比无掺杂的半满情况减少.

**关键词** 铁磁性, Hubbard-Hirsch 模型

**分类号** O 482. 5, O 481. 3

Hubbard 模型是被广泛研究的重要模型. 但是, 除了一维情况外, 至今尚未能求出准确解. 各种近似方法所得出的结果还不能成为定论. 对于三维情况, 问题比较复杂, 早期的研究工作认为有铁磁性<sup>[1, 2]</sup>, 后来则倾向于没有铁磁性<sup>[3, 4]</sup>. 近来, Hirsch 提出必须加上电子间库仑作用的双中心积分中的交换作用项, 才能正确描述金属铁磁性. 其哈密顿量为<sup>[4]</sup>

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} (c_i^\dagger c_{j\uparrow} + c_j^\dagger c_{i\uparrow}) + U \sum_i c_i^\dagger c_i c_i^\dagger c_i - \sum_{i,e} c_i^\dagger c_{i+e} + J \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j^\dagger c_j c_i \quad (1)$$

这个哈密顿量描述的系统称为 Hubbard-Hirsch 模型. 对此模型, Hirsch 用平均场近似并且采用电子态密度等于常数的简化方法讨论了三维情况的性质, 得到出现铁磁性的条件, 并得出  $J''$  愈大, 铁磁性的区域愈大. 本文研究了三维 Hubbard-Hirsch 模型, 得到类似的铁磁性的条件. 但平均场近似只在  $U$  比较小时才适用. 大  $U$  条件下, 采用么正变换微扰论和平均场近似, 得到出现铁磁性的条件与小  $U$  情况不一样. 特别是  $J'' = 0$  时, 没有铁磁性. 同时讨论了偏离半满有掺杂的情况, 计算表明掺杂结果不利于铁磁性, 掺杂愈多, 铁磁性的区域愈少.

## 1 小 $U$ 条件下的平均场理论

先作傅里叶变换

$$c_{i\uparrow} = \frac{1}{N} \sum_k e^{-ik \cdot R_j} \tilde{a}_k^\uparrow, \quad c_{i\downarrow} = \frac{1}{N} \sum_k e^{ik \cdot R_j} \tilde{a}_k^\downarrow \quad (2)$$

(1) 式便化为如下形式:

$$H = \sum_{k,e} (X_k - U) \tilde{a}_k^\dagger c_{k+e}^\dagger + \frac{U}{N} \sum_{k_1, k_2, q} \tilde{a}_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger U c_{k_2-q}^\dagger c_{k_1+q}^\dagger - \frac{3J}{N} \sum_{k, k_2, q} V_q c_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger c_{k_2-q}^\dagger c_{k+q}^\dagger e^{-i(k-k_2-q) \cdot R_j}$$

\* 国家教委博士点专项科研基金 (9355801) 资助项目

收稿日期: 1995-11-27 姜涛, 男, 41 岁, 讲师, 番禺师范学校访问学者

$$\frac{6J}{N} \sum_{k_1, k_2, q} V_{q, k_1}^+ \hat{c}_{k_1}^+ U_{k_2} \hat{c}_{k_2} - \hat{q}^T \hat{c}_{k_1}^+ \hat{c}_{k_2} \quad (3)$$

式中  $X_k = -6V_k = -DV_k$ ,  $D = 6\alpha$  为电子的能带半宽度.  $V_k = (1/6) \sum_{\pm e} \exp(-ik \cdot e)$  ( $e$  为三个方向上的单位矢量),  $N$  为格点总数.

(3) 式中的最后一项代表电子自旋反向的相互作用, 是形成铁磁性的重要相互作用. 当  $U$  较小时, 我们可作平均场近似得

$$H = \sum_{k^e} (X_{k^e}^-) \hat{c}_{k^e}^+ \hat{c}_{k^e} \quad (4)$$

其中,  $X_{k^e}^- = X_{k^e}^- t(6j_n'' n^U - u n^U)$ ,  $X_{k^e}^- = X_{k^e}^- t(6j_n'' U - u n^U)$ ,  $X_{k^e}^- = D_{se} V_k$ ,  $D_{se} = 6(1 - j'' I_1)$ ,  $I_1 = I_{1\uparrow} + I_{1\downarrow}$ ,  $I_{1\uparrow} = \frac{1}{6N} \sum_{k, \pm e} \langle n_{k^e}^- \rangle$ ,  $n_{k^e}^- = \langle \hat{c}_{k^e}^+ \hat{c}_{k^e} \rangle$ ,  $I_{1\downarrow} = \frac{1}{6N} \sum_{k, \pm e} \langle n_{k^e}^+ \rangle$ ,  $n_{k^e}^+ = \langle \hat{c}_{k^e} \hat{c}_{k^e}^+ \rangle$ ,  $n^U = \frac{1}{N} \sum_k n_{k^e}^-$ ,  $n^U = \frac{1}{N} \sum_k n_{k^e}^+$

$j'' = J''/t$ ,  $u = U/t$ .  $D_{se}$  是电子的重整化能带半宽度. 可见, 平均场近似下, 波矢为  $k$  的电子的重整化能量  $X_k$  与自旋有关, 而且其重整化的能带宽度变狭了 ( $j'' \neq 0$  时).  $X_k$  与  $n^U$ ,  $n^U$  和  $I_1$  有关. 在有限温度时, 这些量只能用数值积分方法给出. 而在绝对温度  $T = 0$  K 时, 可以给出这些量的解析表达式. 这时, 自旋向上的电子从最低能级填充到它的费米能级  $X_{k^e}^-$ , 自旋向下的电子填充到它的费米能级  $X_{k^e}^+$ . 费米波矢  $k_{F^e}$  和  $k_{E^e}$  由达到热平衡时, 它们的费米能级等于化学势来确定, 即

$$X_{k^e}^- = X_{k^e}^+ = \mu \quad (5)$$

引进符号  $a_{\uparrow} = V_{k^e}^-$ ,  $a_{\downarrow} = V_{k^e}^+$ , 以及电子数密度  $n$ , 掺杂密度  $W$  和电子磁化密度  $m$ , 定义为

$$n = n^U + n^D = 1 - W, \quad m = n^U - n^D \quad (6)$$

利用电子态的态密度

$$g(X) = \left( \frac{2}{c D_{se}^2} \right) \overline{D_{se}^2 - X^2} \quad (7)$$

可将  $k$  的求和化为对  $X$  的积分, 得

$$n^U = \frac{-D_{se} a_{\uparrow}}{-D_{se}} \left( \frac{2}{c D_{se}^2} \right) \overline{D_{se}^2 - X dX}, \quad n^D = \frac{-D_{se} a_{\downarrow}}{-D_{se}} \left( \frac{2}{c D_{se}^2} \right) \overline{D_{se}^2 - X dX} \quad (8)$$

$$I_{1\uparrow} = \frac{-D_{se} a_{\uparrow}}{-D_{se}} \left( -\frac{X}{D_{se}} \right) \frac{2}{c D_{se}^2} \overline{D_{se}^2 - X dX}, \quad I_{1\downarrow} = \frac{-D_{se} a_{\downarrow}}{-D_{se}} \left( -\frac{X}{D_{se}} \right) \frac{2}{c D_{se}^2} \overline{D_{se}^2 - X dX} \quad (9)$$

对式 (8), (9) 求积分得

$$a_{\uparrow} = \cos \left[ \frac{c}{2} (n + m) + a_{\uparrow} \right] \overline{1 - a_{\uparrow}^2} \\ a_{\downarrow} = \cos \left[ \frac{c}{2} (n - m) + a_{\downarrow} \right] \overline{1 - a_{\downarrow}^2} \quad (10)$$

$$I_{1\uparrow} = \frac{2}{3c} (1 - a_{\uparrow}^2)^{3/2}, \quad I_{1\downarrow} = \frac{2}{3c} (1 - a_{\downarrow}^2)^{3/2}$$

当电子磁化密度  $m \neq 0$  时, 就相应于铁磁相. 从 (6) 式可见  $|m|$  的最大值 =  $1 - W$ , 相应于电子的自旋都朝着一个方向, 叫做完全极化, 否则叫做部分极化. 为了便于与大  $U$  条件下的结果比较, 引进参数  $j_1 = 4hu$ , 从 (10) 式可得  $m \neq 0$  的条件为

$$j_1 = \frac{2}{3} m \{ (a_{\downarrow} - a_{\uparrow}) - j'' [I_1 (a_{\downarrow} - a_{\uparrow}) + m] \} \quad (11)$$

给定  $W, m$  和  $j''$ , 可由 (11) 式得到存在铁磁性相的最大  $j_1$  值 (最小  $U$  值), 如图 1 中虚线所示. 必须指出, 相应于  $j'' = 0$  的  $j_1 \approx 0.4$ , 相应于  $U_{\min} \approx 10t$ . 正如许多作者已经指出<sup>[3,4]</sup>, 平均场近

似过高估计  $U$  的作用, 完全不考虑两个自旋相反的电子间的排斥作用. 所以平均场近似仅在小  $U$  时适用<sup>[5]</sup>, 我们将适用条件推广到三维情况为

$$U \ll \alpha \tag{12}$$

在如此小的  $U$  值, Hubbard 模型不会出现铁磁性. 值得指出, 即使  $U$  较小, 只要  $J''$  较大, 也会出现铁磁性, 例如  $U=10t, J'' \geq 0.2t$  时. 所以 Hubbard-Hirsch 模型总是有铁磁性.

## 2 大 $U$ 条件下的等效哈密顿量

在大  $U$  条件下, 双占据态的几率很小, 可以应用么正变换微扰论, 将含有双占据态的过程都忽略掉, 只取一级近似, 得到在  $k$  表象的等效哈密顿量为<sup>[6,7]</sup>

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k,e} (-6W_k - \_) \hat{c}_{ke}^{\dagger} c_{k\bar{e}} + \frac{3J_1}{N} \sum_{k,k',g} r_{gk_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_2}^{\dagger} c_{k_2} c_{k_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_1} + \frac{3J_2}{N} \sum_{k,k_1,k_2,g} g_{gk_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_2}^{\dagger} c_{k_2} c_{k_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_1} + \frac{3J_3}{N} \sum_{k,k',g} r_{gk_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_2}^{\dagger} c_{k_2} c_{k_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_1} \tag{13}$$

式中,  $J_1 = 4t^2/U, J_2 = J'', J_3 = J_1 - 2J_2$ .

在等效哈密顿量 (13) 式中, 已经消去了一切双占据态的过程, 两个电子无论它们的自旋方向相同或相反, 都不能同时占据同一格点, 因此可以用平均场近似的处理, 得

$$\bar{H}_{\text{eff}} = \sum_{k,e} (E_{k\bar{e}} - \_) \hat{c}_{ke}^{\dagger} c_{k\bar{e}} \tag{14}$$

其中,  $E_{k\bar{e}} = \frac{3}{2}(J_1 + 2J_2)n + \frac{3}{2}(J_1 - 2J_2)m, E_{k\bar{e}} = \frac{3}{2}(J_1 + 2J_2)n - \frac{3}{2}(J_1 - 2J_2)m, \chi_{k\bar{e}} = D_{se,T}, V_{k\bar{e}} = D_{se,U}, V_{k\bar{e}} = 6t(W - j_2 I_1 + \frac{1}{2} j_1 I_1^U), D_{se,U} = 6t(W - j_2 I_1 + \frac{1}{2} j_1 I_1^T), j_1 = J_1 / T, j_2 = J_2 / t$ .

由上式可见, 不但电子的重整化能量, 而且电子的重整化能带宽度都与自旋有关. 热平衡时, 电子自旋向上、向下的费米能级  $E_{kF\uparrow}$  和  $E_{kF\downarrow}$  等于化学势  $\mu$ , 即

$$E_{kF\uparrow} = E_{kF\downarrow} = \mu \tag{15}$$

与上节的处理方法一样, 只要在 (8), (9) 求积分中, 用相应的  $D_{se,T}$  和  $D_{se,U}$  代替  $D_{se}$ , 便得  $\alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow}, I_1^{\uparrow}$  和  $I_1^{\downarrow}$  结果与 (10) 式完全相同. 由 (15) 式可得  $m \neq 0$  的条件为

$$j_1 = 2[j_2 + \frac{1}{m}(W - j_2 I_1)(\alpha_{\uparrow} - \alpha_{\downarrow})] / [1 + \frac{1}{m}(I_1^{\uparrow} \alpha_{\downarrow} - I_1^{\downarrow} \alpha_{\uparrow})] \tag{16}$$

由此式可得出出现铁磁性的最大  $j_1$  值 (即最小  $U$  值).  $j_1$  值随不同掺杂密度  $W$  和交换作用常数  $j_2$  而变化的曲线, 如图 1 中实线所示, 实线下方就相应于铁磁相区域. 从图中可见,  $W$  大于某一定值, 就不可能出现铁磁性, 与许多研究者的预言一致, 因为电子数密度太小时, 尽管  $U$  很大, 也不可能形成集体的磁有序状态. 从图中可见  $j_2 = 0$  时,  $j_1 < 0$ , 表示三维 Hubbard 模型 ( $j_1 > 0$ ), 在大  $U$  条件下, 忽略所有双占据态的近似下是没有铁磁性的. 为比较方便, 我们将平均场近似的结果用虚线在图中标出.

最后, 必须指出, 从 (11) 式和 (16) 式分别给出的小  $U$  条件和大  $U$  条件下,  $m \neq 0$  时  $j_1$  的表示式完全不同, 因此不能排除  $U$  为中间值时,  $j_1$  具有另外不同于 (11) 式和 (16) 式的表示式. 我们得出  $j_2 = 0$  时, 是不存在铁磁性的. 也就是说, 在小  $U$  或大  $U$  条件下, 三维 Hubbard 模型没有铁磁性, 但还不能完全排除  $U$  为中间值时, 出现铁磁性的可能性. 关于这部分工作

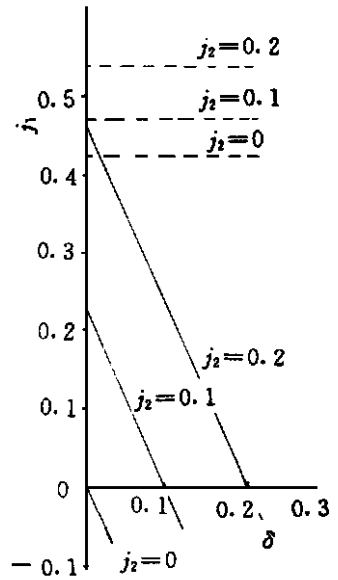


图 1  $T=0$  K 时不同  $j_2$  值的  $j_1$ - $\delta$  曲线  
Fig. 1 The  $j_1$ - $\delta$  cusues of Hubbard-Hirsch model at  $T=0$  K for various  $j_2$

我们将作进一步的研究.

### 参 考 文 献

- 1 Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. Proc Roy Soc London, 1963, A276 238; 1964, A281 401
- 2 Nagaoka Y. Ferromagnetism in a narrow, almost half-filled s band. Phys Rev, 1966, 147 392
- 3 Nolting W, Borgiet W. Band magnetism in the Hubbard model. Phys Rev, 1989, B39 6962
- 4 Hirsch J E. Metallic ferromagnetism in a single-band model. Phys Rev, 1989, B40 2354
- 5 Tang S, Hirsch J E. Metallic ferromagnetism in a single-band model. III. one-dimensional half-filled band. Phys Rev, 1990, B42 771
- 6 Gros C, Juynt R, Rice T M. Antiferromagnetic correlations in almostlocalised Fermi liquids. Phys Rev, 1987, B36 381
- 7 刘金明, 宫蒂, 匡志强. Hubbard-Hirsch 模型的超导性. 中山大学学报(自然科学版), 1995, 34(4): 26

## Ferromagnetism in the 3-Dimensional Hubbard-Hirsch Model

*Jiang Tao*<sup>\*</sup>    *Liu Jinming*

**Abstract** By using mean field theory and a perturbative canonical transformation, the ferromagnetism in the 3-dimensional Hubbard-Hirsch model is investigated. It is shown that ferromagnetism only occurs when  $J'' > 0$  for small  $U$  or large  $U$ . For mediate value of  $U$ , the ferromagnetism may or may not appear in the Hubbard model, and cannot be determined in the theory. The ferromagnetism regions are always smaller than that for half-filling for a fixed  $J''$ .

**Keywords** ferromagnetism, Hubbard-Hirsch model

\* Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275