

# 一维 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一维 Hubbard-Hirsch 模型的铁磁性, 无论单中心积分常数  $U$  多大, 只有双中心的交换积分常数  $J'' > 0$ , 才可能有铁磁性. 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** O482.5, O481.3

Hubbard 哈密顿量是研究固体中狭能带电子的强关联作用的重要模型, 已广泛应用于讨论金属磁性<sup>[1~3]</sup>. 80 年代后期又被应用于讨论高  $T_c$  氧化物超导体的性质<sup>[4,5]</sup>. 近来, Hirsch 提出<sup>[6,7]</sup>必须在 Hubbard 哈密顿量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

$$H = -t \sum_{(ij)} (C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} + C_{j\sigma}^+ C_{i\sigma}) + U \sum_i C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma} C_{i\beta}^+ C_{i\beta} - \mu \sum_{i,\sigma} C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma} + J'' \sum_{(ij)} C_{i\sigma}^+ C_{j\beta}^+ C_{i\beta} C_{j\sigma} \quad (1)$$

式中  $\sigma, \rho$  代表电子自旋第三分量, 在交换项中, 自旋反向作用项 (如  $C_{i\sigma}^+ C_{j\beta}^+ C_{i\beta} C_{j\sigma}$ ) 是重要的交换作用.  $J''$  是双中心积分常数简称为交换作用常数. 这个哈密顿量描述的系统就称之为 Hubbard-Hirsch 模型. 显然  $J'' = 0$  时, 此模型就还原为 Hubbard 模型.

Tang 和 Hirsch 具体研究了此模型在一维半满条件下的铁磁性<sup>[7]</sup>. 指出在该条件下只有  $J'' > 0$  才可能有铁磁性, 虽然  $U$  愈大进入铁磁性区域所需的  $J''$  值愈小, 但  $J'' = 0$  时就没有铁磁性. 本文将此研究推广到非半满条件, 即有掺杂的一维 Hubbard-Hirsch 模型. 本文的计算表明, 只有  $J'' > 0$  时才可能有铁磁性, 与 Hirsch 用其他方法所得结论<sup>[6,7]</sup>一致. 掺杂不利于铁磁性, 掺杂愈多, 铁磁相的区域愈小.

## 1 大 $U$ 条件下的等效哈密顿量

对 Hubbard 哈密顿量 (1) 式 ( $J'' = 0$ ) 作平均场近似, 可以得到 Stoner 巡游电子铁磁性理论结果, 即模型具有铁磁性的 Stoner 判据

$$Ug(\epsilon_F) > 1 \quad (2)$$

式中  $\epsilon_F$  为费米能级,  $g(\epsilon_F)$  为电子在费米能级上的能级密度. 由 (2) 知, 只要  $U$  足够大,  $g(\epsilon_F) \neq 0$ , 就可能出现铁磁性. 但许多研究指出<sup>[3,6~8]</sup>, 这种平均场理论过高估计  $U$  的作

\* 国家教委博士点科研基金资助项目

收稿日期: 1995-05-05 姜涛, 男, 41 岁, 讲师, 番禺师范学校访问学者

用, 完全不考虑两个自旋相反的电子间的排斥作用, 因此铁磁性序参量的涨落很大, 大  $U$  条件下该平均场理论失效. Tang 和 Hirsch 对一维半满条件下的研究指出<sup>[7]</sup>, 平均场近似仅在小  $U$  时, 即

$$U \leq 2t \quad (3)$$

时成立. 但  $U$  太小, Hubbard 模型是不会出现铁磁性的. 关键问题是  $U$  多大时可能出现铁磁性. 他们建议用等效的  $U_{\text{eff}}$

$$U_{\text{eff}} = 4t(1 - t/U), \quad U > 2t \quad (4)$$

来代替  $U$ , 以得到与小晶格 (格点总数  $N=6, 8, 10$ ) 的结果自洽. 本文采用另一种方法, 即大  $U$  条件下, 么正变换微扰论<sup>[5,8]</sup>, 只取一级近似, 并忽略一切双占据态过程的贡献, 得到等效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = -\delta t \sum_{i\sigma} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma} - \frac{1}{2} J'' \sum_{ij\sigma} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma} C_{j\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} - \frac{1}{2} (J - 2J'') \sum_{ij} C_{i\alpha}^{\dagger} C_{j\beta}^{\dagger} (C_{i\beta} C_{j\alpha} + C_{j\beta} C_{i\alpha}) \quad (5)$$

式中  $\delta$  是掺杂量, 即偏离半满填充的空穴数.  $J = 4t^2/U$  代表反铁磁性交换作用. 我们进一步作傅里叶变换

$$C_{i\alpha}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} C_{\vec{k}\alpha}^{\dagger} \quad (6)$$

$$C_{i\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} C_{\vec{k}\alpha} \quad (7)$$

式中  $N$  为格点总数,  $\vec{k}$  为波矢, 得到在  $\vec{k}$  表象中的等效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = H_0 + H_1 + H_2 + H_3 \quad (8)$$

$$H_0 = \sum_{\vec{k}\alpha} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) C_{\vec{k}\alpha}^{\dagger} C_{\vec{k}\alpha}$$

$$H_1 = -\frac{ZJ_1}{2N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} \gamma_{\vec{q}} C_{\vec{k}_1\alpha}^{\dagger} C_{\vec{k}_2\beta}^{\dagger} C_{\vec{k}_2 - \vec{q}\beta} C_{\vec{k}_1 + \vec{q}\alpha}$$

$$H_2 = -\frac{ZJ_2}{2N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} \gamma_{\vec{q}} C_{\vec{k}_1\alpha}^{\dagger} C_{\vec{k}_2\alpha}^{\dagger} C_{\vec{k}_2 - \vec{q}\alpha} C_{\vec{k}_1 + \vec{q}\alpha}$$

$$H_3 = \frac{ZJ_3}{2N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} \gamma_{\vec{q}} C_{\vec{k}_1\alpha}^{\dagger} C_{\vec{k}_2\beta}^{\dagger} C_{\vec{k}_2 - \vec{q}\alpha} C_{\vec{k}_1 + \vec{q}\beta}$$

$$\text{式中} \quad \begin{cases} \epsilon_{\vec{k}} = -Z\delta + \gamma_{\vec{k}}, \quad \gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{a}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \\ J_1 = J = 4t^2/U, \quad J_2 = J'', \quad J_3 = J_1 - 2J_2 \end{cases} \quad (9)$$

$Z$  为格点的配位数,  $a$  为晶格常数. 在一维情况下,  $Z=2, \gamma_{\vec{k}} = \cos ka$ .

## 2 平均场近似

在哈密顿量 (8) 式中, 已经消去了一切双占据态的过程, 两个电子不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处理 (8) 式, 本文只讨论一维情况, 平均场近似的哈密顿量为

$$H = \sum_{\vec{k}} (E_{k\alpha} C_{k\alpha}^{\dagger} C_{k\alpha} + E_{k\beta} C_{k\beta}^{\dagger} C_{k\beta}) \quad (10)$$

$$\text{式中} \quad E_{k\alpha} = -2(\delta t - J_2 I_1^\alpha + \frac{1}{2} J_3 I_1^\beta) \gamma_k - \mu - J_1 n_\beta - 2J_2 n_\alpha \quad (11)$$

$$E_{k\beta} = -2(\delta t - J_2 I_1^\beta + \frac{1}{2} J_3 I_1^\alpha) \gamma_k - \mu - J_1 n_\alpha - 2J_2 n_\beta \quad (12)$$

$$\text{其中} \quad n_\alpha = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (C_{k\alpha}^\dagger C_{k\alpha}) \quad (13)$$

是平均每格点上电子自旋向上的电子数.

$$n_\beta = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (C_{k\beta}^\dagger C_{k\beta}) \quad (14)$$

是平均每格点上电子自旋向下的电子数.

$$\begin{cases} I_1^\alpha = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} (C_{k\alpha}^\dagger C_{k\alpha}) \\ I_1^\beta = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} (C_{k\beta}^\dagger C_{k\beta}) \\ I_1 = I_1^\alpha + I_1^\beta \end{cases} \quad (15)$$

是决定重整化能带宽度的参数. 引进平均每格点上电子数  $n$  和平均每格点上的相对磁化  $m$

$$\begin{cases} n = n_\alpha + n_\beta = 1 - \delta \\ m = n_\alpha - n_\beta \end{cases} \quad (16)$$

系统的磁化强度  $M$  为

$$M = (N/V) \mu_B m \quad (17)$$

式中  $V$  为晶体体积,  $\mu_B$  为 Bhor 磁矩. 若系统的相对磁化  $m \neq 0$ , 则系统具有自发磁化强度  $M$ , 代表铁磁相. 下面我们寻求  $m \neq 0$  的条件, 为方便, 我们以  $t$  为能量单位, 引进

$$j_1 = J_1/t, \quad j_2 = J_2/t, \quad u = U/t \quad (18)$$

并定义电子自旋向上, 向下的重整化能带半宽度  $D_{re\alpha}$ ,  $D_{re\beta}$  和重整化化学势  $\tilde{\mu}_\alpha$ ,  $\tilde{\mu}_\beta$  分别为

$$\begin{cases} D_{re\alpha} = 2t (\delta - j_2 I_1 + \frac{1}{2} j_1 I_1^\beta) \\ D_{re\beta} = 2t (\delta - j_2 I_1 + \frac{1}{2} j_1 I_1^\alpha) \end{cases} \quad \begin{cases} \tilde{\mu}_\alpha = \mu + J_1 n_\beta + 2J_2 n_\alpha \\ \tilde{\mu}_\beta = \mu + J_1 n_\alpha + 2J_2 n_\beta \end{cases} \quad (19)$$

于是我们得到

$$\begin{cases} E_{k\alpha} = \tilde{\epsilon}_{k\alpha} - \tilde{\mu}_\alpha \\ E_{k\beta} = \tilde{\epsilon}_{k\beta} - \tilde{\mu}_\beta \end{cases} \quad (20)$$

$$\text{式中} \quad \begin{cases} \tilde{\epsilon}_{k\alpha} = -D_{re\alpha} \gamma_{\mathbf{k}} \\ \tilde{\epsilon}_{k\beta} = -D_{re\beta} \gamma_{\mathbf{k}} \end{cases} \quad (21)$$

分别是电子自旋向上、向下的重整化能量和重整化化学势. 由该式可见, 单电子的能量仍是紧束缚形式的电子的能量, 只是能带半宽度要用重整化能带半宽度代之. 为简单起见, 本文只讨论绝对零度情况 ( $T=0\text{K}$ ), 化学势  $\mu$  由热平衡条件

$$\tilde{\epsilon}_{F\alpha} - \tilde{\mu}_\alpha = \tilde{\epsilon}_{F\beta} - \tilde{\mu}_\beta = 0 \quad (22)$$

确定. 由此可得系统  $m \neq 0$  的条件为

$$(\bar{\epsilon}_{F\alpha} - \bar{\epsilon}_{F\beta}) / 2mt = j_2 - \frac{1}{2} j_1 \tag{23}$$

式中  $\bar{\epsilon}_{F\alpha}$ 、 $\bar{\epsilon}_{F\beta}$  分别为电子自旋向上、向下的重整化费米能级。应用一维紧束缚电子的能级密度公式

$$g(\epsilon) = 1 / (\pi \sqrt{D^2 - \epsilon^2}) \tag{24}$$

式中  $D$  为能带半宽度，可以得到

$$\begin{cases} \bar{\epsilon}_{F\alpha} = -D_{re\alpha} \cos n_a \pi \\ \bar{\epsilon}_{F\beta} = -D_{re\beta} \cos n_\beta \pi \end{cases} \tag{25}$$

$$\begin{cases} I_1^\alpha = \frac{1}{\pi} \sin n_a \pi \\ I_1^\beta = \frac{1}{\pi} \sin n_\beta \pi \end{cases} \tag{26}$$

代入 (23) 式使得  $m \neq 0$  的条件为

$$j_1 = 2 \left\{ \left( 1 + 2 \cos^2 \frac{\delta\pi}{2} \cdot \frac{\sin m\pi}{m\pi} \right) j_2 - \frac{2\delta}{m} \cos \frac{\delta\pi}{2} \sin \frac{m\pi}{2} \right\} / \left( 1 + \frac{\sin m\pi}{m\pi} \right) \tag{27}$$

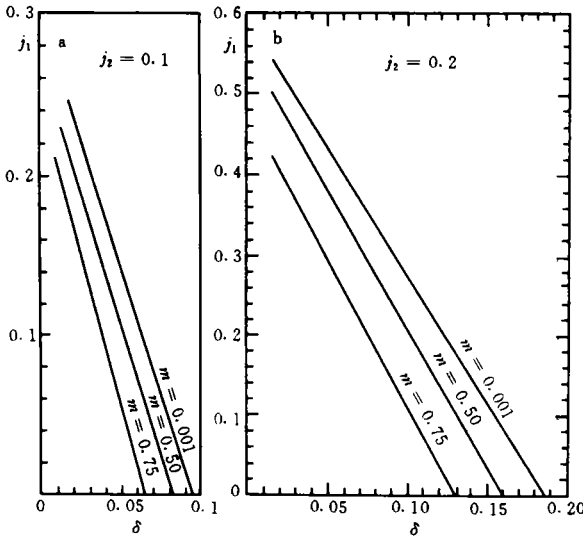


图 1  $T=0$  K 时，在  $j_1$ - $\delta$  平面上的等磁化线

Fig. 1 Lines of constant magnetization in  $j_1$ - $\delta$  plane at  $T=0$  K

在图 1 中我们给出了  $m=0.001, 0.50$  和  $0.75$  以及  $j_2=0.1, 0.2$  的  $j_1$ - $\delta$  曲线，从图中可见，对于弱铁磁性 ( $m=0.001 \sim 0.5$ )， $j_1$  比较大，而对于强铁磁性 ( $m=0.5 \sim 0.75$ )， $j_1$  比较小，在  $m=0.75$  曲线以下的区域是  $j_1$  更小的区域，属于铁磁性；而在  $m=0.001$  曲线以上， $j_1$  更大，属于反铁磁性区域。掺杂  $\delta$  愈大，则要求  $j_1$  更小，因而铁磁性区域缩小。 $\delta$  再增大时，铁磁性区域将消失。在一定的  $\delta$  值时，对应不同的  $j_1$ ， $m \neq 0$  的解，由 (27) 式可得

$$j_2 = \left[ \frac{1}{2} j_1 \left( 1 + \frac{\sin m\pi}{m\pi} \right) + \frac{2\delta}{m} \cos \frac{\delta\pi}{2} \sin \frac{m\pi}{2} \right] / \left[ 1 + 2\cos^2 \left( \frac{\delta\pi}{2} \right) \frac{\sin m\pi}{m\pi} \right] \quad (28)$$

分别取  $\delta=0.1, 0.2$  及  $m=0.001, 0.50, 0.75$ , 画出  $j_2-j_1$  的曲线. 从图 2 (a), (b) 中可见,  $\delta$  值较大时, 需要  $j_2$  较大才能进入铁磁性. 值得指出的是, 当  $j_2=0$  时, 铁磁性区域就消失, 说明一维有掺杂的 Hubbard 模型不具有铁磁性, 该结论与 Hirsch<sup>[8]</sup> 用其他方法所得的结论一致.

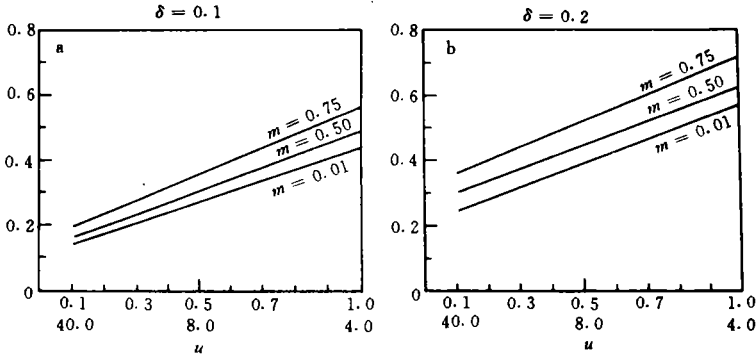


图 2  $T=0$  K 时, 在  $j_2-j_1$  平面上的等磁化线

Fig. 2 Lines of constant magnetization in  $j_2-j_1$  plane at  $T=0$  K

### 3 讨论

$T \neq 0$  K 时, 由于热运动, 电子自旋向上与向下的数目趋于相同, 因此, 铁磁性区域和反铁磁性区域都将随温度升高而缩小, 将出现顺磁性区域, 而且随着温度升高顺磁性区域不断扩大, 相变边界, 条件仍由 (23) 式决定, 但  $n_\alpha, n_\beta, \tilde{\epsilon}_{F\alpha}, \tilde{\epsilon}_{F\beta}, I_1^\alpha$  和  $I_1^\beta$  均与温度  $T$  有关, 并且由联立的含费米型积分的非线性方程决定. 一般不能解析地表示为温度  $T$ , 掺杂  $\delta$ , 反铁磁性作用常数  $j_1$  和交换作用常数  $j_2$  的明显函数. 关于这部分工作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
- 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 Baskaran G, Zou Z, Anderson P W. The resonating valence bond state and high- $T_c$  superconductivity a mean field theory. Solid State Commun, 1987, 63: 973
- 5 Zou Z, Anderson P W. Neutral fermion, charge-e boson excitations in the resonating-valence-bond state and superconductivity in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ -based compounds. Phys Rev, 1988, B37: 627
- 6 Hirsch J E. Metallic ferromagnetism in a single-band model. Phys Rev, 1989, B 40: 2354

- 7 Tang S, Hirsch J E. Metallic ferromagnetism in a single-band model. I. one-dimensional half-filled band. Phys Rev, 1990, B42: 771
- 8 Gros C, Joynt R, Rice T M. Antiferromagnetic correlations in almost-localised Fermi liquids. Phys Rev, 1987, B36: 381

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

*Jiang Tao* \* *Liu Jinming*

**Abstract** By using a perturbative canonical transformation and mean field theory, the parameter regimes that give rise to ferromagnetism are determined in the one-dimensional Hubbard-Hirsch model. The model describes a tight-binding band with on-site repulsion  $U$ , nearest-neighbor Coulomb exchange matrix element  $J''$  and doping parameter  $\delta$ . Ferromagnetism only occurs for  $J'' > 0$ , with the required value of  $J''$  decreasing as  $U$  increases and increasing as  $\delta$  increases. 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