

## Спонтанное появление анизотропии взаимодействия в квазиодномерной сильно коррелированной системе электронов

Д. М. Апальков<sup>1,2</sup>, А. А. Звягин<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины  
Украина, 61164, г. Харьков, пр. Ленина, 47  
E-mail: zvyagin@ilt.kharkov.ua

<sup>2</sup> Харьковский государственный университет, Украина, 61077, г. Харьков, пл. Свободы, 4  
E-mail: dmitry@almor.kharkov.ua

<sup>3</sup> Max Planck Institut für Physik Komplexer Systeme, Nöthnitzer Str., 38, Dresden, D-01187, Deutschland

Статья поступила в редакцию 11 ноября 1999 г.

Предсказана неустойчивость квазиодномерной сильно коррелированной электронной системы в реальном трехмерном кристалле при возникновении анизотропии межэлектронного взаимодействия. Исследовано влияние внешнего магнитного поля, заполнения зоны электронов и малых ненулевых температур на предсказанную неустойчивость.

Передбачено нестійкість квазіодновимірної сильно корельованої системи електронів у реальному тривимірному кристалі відносно появи анізотропії міжелектронної взаємодії. Досліджено вплив зовнішнього магнітного поля, заповнення зони електронів та малих ненульових температур на передбачену нестійкість.

PACS: 71.27.+a, 71.70.Ch

В последние годы возрос интерес к исследованию, как теоретическому, так и экспериментальному, низкоразмерных электронных и магнитных систем. В частности, были синтезированы кристаллы, в которых ширина зоны электронов (следовательно, и скорость Ферми), так же как и взаимодействие между электронами, вдоль одного из кристаллографических направлений оказалась в десятки раз больше, чем вдоль других [1]. Именно в таких электронных квазиодномерных системах вследствие наличия одномерной особенности в плотности состояний усилены квантовые флуктуации по сравнению со стандартными трехмерными электронными системами. Поэтому пертурбативные теоретические методы типа теории возмущений или теорий среднего поля в их различных модификациях неприменимы, так как могут приводить к качественно неверным результатам. Сильно коррелированными электронными системами обычно называют такие, в которых энергия коллективизированных электронов (ки-

нетическая) сравнима по величине с энергией межэлектронного взаимодействия (обычно кулоновского). Последнее может существовать в сильно коррелированных электронных системах как в виде скалярного взаимодействия между зарядами электронов, так и в виде обменного взаимодействия между спинами электронов, поэтому в этих системах очень важны как зарядовые (токовые), так и магнитные характеристики. Обычно для строгого учета межэлектронных корреляций в таких одномерных системах применяют строгие методы, например анзац Бете (или его алгебраический вариант — квантовый метод обратной задачи рассеяния) [2].

Целью настоящей работы является исследование устойчивости квазиодномерной сильно коррелированной электронной системы относительно спонтанного появления анизотропии в межэлектронных взаимодействиях. Мы покажем, что вследствие воздействия кристаллического поля лигандов (трехмерного окружения выделенной

одномерной взаимодействующей электронной цепочки в кристалле) изотропное (кулоновское) взаимодействие между электронами цепочки оказывается неустойчивым при появлении анизотропии (как магнитной, так и зарядовой), и проанализируем влияние на такую неустойчивость величины электрон-решеточной связи, приложенного внешнего напряжения, числа электронов в цепочке, малых температур и внешнего магнитного поля.

Недавно стало ясно, что в поведении целого ряда сильно коррелированных электронных систем могут играть принципиальную роль орбитальные степени свободы. В стандартном подходе именно орбитальные степени свободы электронов реагируют на электрическое кристаллическое поле ионов, формирующих решетку кристалла. Симметрия этого кристаллического поля определяется симметрией кристаллической решетки. Даже если ионы, окружающие магнитный ион (лиганды), сами немагнитны, то электрическое поле лигандов влияет на спиновое поведение магнитных ионов вследствие спин-орбитального взаимодействия (обычно слабого). Именно учет в нижайшем приближении электрического поля кристалла приводит к появлению магнитной анизотропии: спин-спиновое взаимодействие между электронами оказывается различным в зависимости от его ориентации относительно кристаллических осей. Анизотропным может быть и скалярное межзарядовое взаимодействие электронов, также вызванное влиянием электрического поля ионов кристалла. Магнитная анизотропия может быть как одноионной, так и межионной. Для электронов со спином  $1/2$ , естественно, одноионная анизотропия отсутствует, поэтому в настоящей работе мы исследуем лишь эффекты межионной магнитной анизотропии.

Ранее уже рассматривались неустойчивости диэлектрических магнитных цепочек относительно появления магнитной анизотропии [3,4]. Так, в работе [3] было предсказано спонтанное появление магнитной двухосной анизотропии в сильно анизотропной спиновой XY-цепочке (преимуществом этой системы с точки зрения теоретического описания свойств является то, что с помощью нелокального преобразования Иордана–Вигнера [5] ее гамильтониан строго сводится к гамильтониану невзаимодействующего решеточного газа бесспиновых фермионов, что позволяет точно получить ряд статических термодинамических характеристик такой системы). Эта неустойчивость аналогична неустойчивости XY-спиновой цепочки относительно спин-пайерлсовского удвоения пе-

риода [6], которое в последние годы наблюдалось для некоторых неорганических соединений [7]. Подобная неустойчивость в случае спин-пайерлсовского удвоения периода возникает вследствие взаимодействия с продольным фононом (продольным смещением спинов вдоль одномерной цепочки), тогда как появление спонтанной магнитной анизотропии обусловлено взаимодействием (непрямым) спинов цепочки с поперечным фононом (поперечным смещением ионов) трехмерной кристаллической решетки. В работе [4] предсказано спонтанное появление магнитной анизотропии типа «легкая плоскость» в диэлектрическом кристалле с квазиодномерным изотропным гейзенберговским антиферромагнитным взаимодействием между локализованными спинами  $1/2$ . В этом случае одномерная система спинов является существенно взаимодействующей, поэтому задача нахождения уровней энергии для такой системы (существенно неэквидистантных) значительно сложнее, чем для XY-цепочки. В настоящей работе мы будем решать более сложную задачу, когда электроны в цепочке обладают как спиновыми, так и зарядовыми степенями свободы, т.е. узлы цепочки могут быть как занятыми, так и свободными (дырка) и число электронов зависит от приложенного внешнего напряжения. Это, в отличие от предыдущего случая [4], соответствует проводящей электронной подсистеме. Естественно, при половинном электронном заполнении (одномерной) зоны, т.е. когда в каждом узле находится один электрон, задача сводится к предыдущей. Зарядовое (скалярное) и обменное взаимодействие между электронами, находящимися на соседних узлах цепочки (выделенного кристаллического направления), приводят к существенно неэквидистантному спектру. При этом даже в низкотемпературном поведении электронов существенную роль играют связанные электронные состояния, отсутствующие в системе без электрон-электронного взаимодействия, что существенно усложняет задачу.

Предположим, что в трехмерном кристалле (с квазиодномерными электронными свойствами, т.е. в котором характерные энергии электронных перескоков и взаимодействий в одном из направлений велики по сравнению с другими направлениями) изменилась симметрия решетки из-за малого смещения ионов кристалла. Тогда, естественно, возросла энергия его упругой подсистемы. Мы будем учитывать только однородные деформации решетки, которые создают однородную вдоль всей квазиодномерной системы электронов анизотропию ее электронных свойств. Другими

словами, фонон, который снимает вырождение энергии одномерной электронной подсистемы по орбитальным степеням свободы, имеет соизмеримый волновой вектор (квазиимпульс) и нестабильность электронной сильно коррелированной цепочки определяется взаимодействием именно с этим фононом.

Однако изменилось и кристаллическое поле лигандов, окружающих квазиодномерную электронную систему. Вследствие этого взаимодействие между электронами цепочки стало существенно анизотропным. Поэтому энергия квазиодномерных сильно коррелированных электронов может уменьшиться, и в целом минимуму суммарной энергии решетки и одномерных электронов может отвечать ненулевое смещение ионов решетки (понижение ее симметрии) и, соответственно, ненулевое значение анизотропии скалярного и магнитного взаимодействия электронов вдоль выделенного направления. Таким образом, квазиодномерная цепочка сильно коррелированных электронов оказывается неустойчивой относительно появления существенной анизотропии электрон-электронного взаимодействия.

Мы проведем изучение влияния магнитной анизотропии на устойчивость квазиодномерных систем сильно коррелированных электронов на примере одномерной суперсимметричной  $t$ - $J$ -модели — одной из наиболее фундаментальных моделей сильно коррелированных электронных систем. Она получила широкое распространение в предыдущие годы главным образом в связи с проблемой высокотемпературной сверхпроводимости [8]. Эта модель описывает поведение электронов с обменным взаимодействием между спинами электронов на ближайших узлах, причем в любом узле решетки может находиться лишь один электрон, т.е. в каждом узле одномерной решетки разрешены три электронные конфигурации: электрон с проекциями спина вверх и вниз и дырка (состояние без электронов). Ранее было показано, что одномерная изотропная  $t$ - $J$ -модель имеет решение в суперсимметричной точке (в ней константа перескока электронов между соседними узлами, связанная с шириной зоны свободных электронов, равна половине константы антиферромагнитного обмена между спинами электронов, находящихся на соседних узлах), которое было получено с помощью анзаца Бете [9–11]. Доказано (см., например, [12]), что симметрию  $t$ - $J$ -модели характеризует наличие четырех фермионных и пяти бозонных мод (обобщенных токов), отвечающих генераторам соответствующей груп-

пы симметрии  $SU(1|2)$ . Суперсимметричной модель является потому, что в суперсимметричной ( $SU(1|2)$ ) точке характерные скорости этих фермионных и бозонных обобщенных токов одинаковы [12].

В настоящей работе исследуются свойства одномерной суперсимметричной  $t$ - $J$ -модели с анизотропией магнитного и скалярного (зарядового) взаимодействия между электронами на соседних узлах, гамильтониан которой в фермионном представлении имеет вид [13]

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - \sum_{\sigma, j} \mathcal{P} (c_{j, \sigma}^+ c_{j+1, \sigma} + c_{j+1, \sigma}^+ c_{j, \sigma}) \mathcal{P} + \\ & + \sum_j (c_{j, \downarrow}^+ c_{j, \uparrow} c_{j+1, \uparrow} c_{j+1, \downarrow} + c_{j, \uparrow}^+ c_{j, \downarrow} c_{j+1, \downarrow} c_{j+1, \uparrow}) - \\ & - \sum_j (e^\eta n_{j, \uparrow} n_{j+1, \downarrow} + e^{-\eta} n_{j, \downarrow} n_{j+1, \uparrow}) - \\ & - \frac{1}{2} H \sum_j (c_{j, \uparrow}^+ c_{j, \uparrow} - c_{j, \downarrow}^+ c_{j, \downarrow}) + \frac{1}{2} C \delta^2, \quad (1) \end{aligned}$$

где  $c_{j, \sigma}$ ,  $c_{j, \sigma}^+$  — ферми-операторы уничтожения и рождения электронов в узле  $j$  с проекцией спина  $\sigma$ ;  $n_{j, \sigma} = c_{j, \sigma}^+ c_{j, \sigma}$  — оператор числа частиц на узле  $j$  с проекцией спина  $\sigma$ ;  $\mathcal{P} = (1 - n_{j, -\sigma})(1 - n_{j+1, -\sigma})$  — проекционный оператор, не допускающий присутствия двух электронов на одном узле;  $\eta \equiv x\delta$  — параметр анизотропии межэлектронного взаимодействия (отметим, что в спиновом секторе она соответствует разноионной магнитной анизотропии типа «легкая ось» и  $\eta = 0$  соответствует изотропной  $SU(1|2)$ -симметричной суперсимметричной  $t$ - $J$ -модели);  $x$  — постоянная электрон-решеточного взаимодействия (в дальнейшем мы полагаем  $x = 1$ );  $H$  — внешнее магнитное поле;  $\frac{1}{2} C \delta^2$  — изменение энергии упругой подсистемы лигандов (немагнитных ионов, которые окружают одномерную цепочку электронов) в ближайшем по смещению  $\delta$ -приближении,  $C$  — упругая константа. Таким образом, параметр  $\delta$  определяет искажение симметричной конфигурации немагнитных ионов для данной симметрии кристаллической (трехмерной) решетки.

С учетом периодических граничных условий проблема диагонализации гамильтониана, т.е. нахождение его собственных функций и собственных значений, сводится к решению системы уравнений Бете [13]

$$\left[ \frac{\sin(v_j + i(\eta/2))}{\sin(v_j - i(\eta/2))} \right]^{N_a} = \prod_{\alpha=1}^M \frac{\sin(v_j - \Lambda_\alpha + i(\eta/2))}{\sin(v_j - \Lambda_\alpha - i(\eta/2))}$$

$$j = 1, \dots, N, \quad (2)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{\sin(\Lambda_\alpha - v_j + i(\eta/2))}{\sin(\Lambda_\alpha - v_j - i(\eta/2))} = - \prod_{\beta=1}^M \frac{\sin(\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta + i\eta)}{\sin(\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta - i\eta)},$$

$$\alpha = 1, \dots, M,$$

где  $M$  — число электронов, спины которых обращены вниз;  $N_a$  — число узлов (одномерной) решетки;  $N$  — полное число электронов в этой решетке;  $v_j, j = 1, \dots, N$  — электронные (зарядовые) «быстроты»;  $\Lambda_\alpha, \alpha = 1, \dots, M$  — «быстроты», характеризующие спиновые степени свободы электронов в цепочке. «Быстрогами» в таких задачах принято называть наборы квантовых чисел (параметров), которые параметризуют волновые функции и собственные значения гамильтониана (1). Энергия системы выражается следующим образом через «быстроты»:

$$E = \mu N - \frac{1}{2} H (N - 2M) -$$

$$- \sum_{j=1}^N \left[ \frac{\sin(v_j + i(\eta/2))}{\sin(v_j - i(\eta/2))} + \frac{\sin(v_j - i(\eta/2))}{\sin(v_j + i(\eta/2))} \right] + \frac{1}{2} C \delta^2, \quad (3)$$

$\mu$  — множитель Лагранжа, эквивалентный химическому потенциалу электронной подсистемы. Этот множитель также может учитывать приложенное к системе внешнее электростатическое напряжение (скалярный потенциал).

Основное состояние одномерной системы коррелированных электронов характеризуется наличием  $N - 2M$  несвязанных электронных возбуждений (зарядовые «быстроты»  $v_j$  вещественные) и  $2M$  синглетных, подобных куперовским пар (связанных состояний пар электронов с нулевым суммарным спином; зарядовые «быстроты» таких пар комплексные) [13]. Как следует из уравнений Бете (2), существует  $\Lambda_\beta$ , для которого с экспоненциальной точностью до множителя  $\exp(-N_a)$  выполняется равенство

$$v_\alpha^\pm = \Lambda_\beta \pm i \frac{\eta}{2}. \quad (4)$$

Тогда уравнения анзаца Бете переписываются для зарядовых «быстрот»  $v_j$ , которые характеризуют несвязанные электронные состояния и для

спиновых «быстрот»  $\Lambda_\alpha$ , которые характеризуют состояния электронов в синглетных парах. Заметим, что теперь зарядовые «быстроты» характеризуют поведение квазичастиц, несущих спин  $1/2$ , тогда как спиновые «быстроты» — поведение синглетных пар электронов, т.е. они как бы поменялись своими функциями. Переходя к «быстрогам» пар, мы имеем вместо (2) следующую систему уравнений:

$$\left[ \frac{\sin(v_j + i(\eta/2))}{\sin(v_j - i(\eta/2))} \right]^{N_a} = \prod_{\alpha=1}^M \frac{\sin(v_j - \Lambda_\alpha + i(\eta/2))}{\sin(v_j - \Lambda_\alpha - i(\eta/2))},$$

$$j = 1, \dots, N - 2M, \quad (5)$$

$$\left[ \frac{\sin(\Lambda_\alpha + i\eta)}{\sin(\Lambda_\alpha - i\eta)} \right]^{N_a} = - \prod_{j=1}^{N-2M} \frac{\sin(\Lambda_\alpha - v_j + i(\eta/2))}{\sin(\Lambda_\alpha - v_j - i(\eta/2))} \times$$

$$\times \prod_{\beta=1}^M \frac{\sin(\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta + i\eta)}{\sin(\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta - i\eta)}, \quad \alpha = 1, \dots, M.$$

Энергия теперь выражается через энергии несвязанных электронов и синглетных пар:

$$E = \mu N - \sum_{j=1}^{N-2M} \left[ \frac{\sin(v_j + i(\eta/2))}{\sin(v_j - i(\eta/2))} + \frac{\sin(v_j - i(\eta/2))}{\sin(v_j + i(\eta/2))} \right] -$$

$$- \sum_{\alpha=1}^M 2 \cosh \eta \left( 1 + \frac{\sin^2 \Lambda_\alpha}{\sin^2 \Lambda_\alpha + \sinh^2 \eta} \right) -$$

$$- \frac{1}{2} (N - 2M) H + \frac{1}{2} C \delta^2. \quad (6)$$

Логарифмирование полученной системы уравнений Бете (5) дает

$$\Theta(v_j, \eta/2) = \frac{1}{N_a} \sum_{\alpha=1}^M \Theta(v_j - \Lambda_\alpha, \eta/2) + \frac{2\pi}{N_a} I_j,$$

$$j = 1, \dots, N - 2M, \quad (7)$$

$$\Theta(\Lambda_\alpha, \eta) = \frac{1}{N_a} \sum_{j=1}^{N-2M} \Theta(\Lambda_\alpha - v_j, \eta/2) +$$

$$+ \frac{1}{N_a} \sum_{\beta=1}^M \Theta(\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta, \eta) + \frac{2\pi}{N_a} J_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, M,$$

где  $\Theta(v, \eta) = 2 \operatorname{arctg}(\operatorname{tg} v \operatorname{cth} \eta)$ , а квантовые числа  $I_j, J_\alpha$ , параметризующие решение системы, возникают вследствие многозначности аргументов логарифмов.

После перехода к термодинамическому пределу (в котором числа узлов, электронов и электронов с определенной проекцией спина, соответственно  $N_a, N$  и  $M$ , стремятся к бесконечности, но их плотности  $N/N_a$  и  $M/N_a$  остаются конечными) уравнения Бете для плотностей зарядовых и спиновых «быстрот» принимают вид

$$\begin{aligned} \Theta'(v, \eta/2) = \\ = \int d\Lambda \Theta'(v - \Lambda, \eta/2) \sigma(\Lambda) + 2\pi[\rho(v) + \rho_h(v)], \\ \Theta'(\Lambda, \eta) = \int dv \Theta'(\Lambda - v, \eta/2) \rho(v) + \\ + \int dz \Theta'(\Lambda - z, \eta) \sigma(z) + 2\pi[\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda)], \end{aligned} \quad (8)$$

где  $\rho(v)$  и  $\rho_h(v)$  — функции распределения (плотности) зарядовых «быстрот» для «квазичастиц» и «квазидырок» соответственно, а  $\sigma(\Lambda)$  и  $\sigma_h(\Lambda)$  — функции распределения спиновых «быстрот»; штрихом, как обычно, обозначена частная производная. Запишем внутреннюю энергию системы в термодинамическом пределе:

$$\begin{aligned} E = \mu N - \\ - \int \rho(v) \left[ \frac{\sin(v + i(\eta/2))}{\sin(v - i(\eta/2))} + \frac{\sin(v - i(\eta/2))}{\sin(v + i(\eta/2))} \right] dv - \\ - 2 \int \sigma(\Lambda) \operatorname{cosh} \eta \left( 1 + \frac{\sin^2 \Lambda}{\sin^2 \Lambda + \sinh^2 \eta} \right) d\Lambda - \\ - \frac{1}{2} (N - 2M)H + \frac{1}{2} C\delta^2. \end{aligned} \quad (9)$$

Основному состоянию одномерных коррелированных электронов соответствует собственное состояние системы, в котором все состояния несвязанных электронных возбуждений и электронов, связанных в локальные пары, обладающие отрицательной энергией, заполнены (т.е. заполнены соответствующие ферми-моря), а состояния, обладающие положительной энергией, пусты. Рассмотрим случай, когда внешнее магнитное поле отсутствует ( $H = 0$ ). Тогда основное состояние будет представлено только синглетными парами электронов ( $2M = N$ ) [13], поэтому система уравнений Бете существенно упрощается:

$$\begin{aligned} \Theta(\Lambda_\alpha, \eta) = \frac{1}{N_a} \sum_{\beta=1}^M \Theta(\Lambda_\alpha - \Lambda_{\beta, \eta}) + \frac{2\pi}{N_a} J_\alpha, \\ \alpha = 1, \dots, M, \end{aligned} \quad (10)$$

$J_\beta$  — целые (полуцелые) числа при нечетном (четном) числе  $M + 1$ , ограниченные  $J_{\max}$  [14]:

$$|J_\alpha| \leq \frac{N_a - M - 1}{2} = J_{\max}. \quad (11)$$

Основному состоянию соответствует набор таких квантовых чисел  $J_\alpha$ , что заполнение интервала  $[-J_{\max}, J_{\max}]$  начинается от границ интервала. После перехода к термодинамическому пределу получаем

$$\begin{aligned} \Theta(\Lambda, \eta) = \left[ \int_{-\Lambda_0}^{-\pi} + \int_{\Lambda_0}^{\pi} \right] dz \Theta'(\Lambda - z, \eta) \sigma(z) + \\ + 2\pi[\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda)]. \end{aligned} \quad (12)$$

Величины  $\Lambda_0$  имеют смысл точек Ферми (поверхности Ферми для одномерной системы), так как в основном состоянии наблюдаются только состояния электронов с  $\Lambda \in [-\pi, -\Lambda_0] \cup [\Lambda_0, \pi]$ . Отметим, что, как обычно в точно решаемых с помощью анзаца Бете задачах, волновая функция электронных пар симметрична (что естественно, так как невзаимодействующие пары — бозоны), но эти бозоны непроницаемы (обладают «жестким кором»), что соответствует поведению систем фермионов. Именно вследствие этого пары электронов имеют ферми-море. Отметим также, что взаимодействующие между собой пары электронов в этой системе характеризуются энионной статистикой. Параметр  $\Lambda_0$  должен соответствовать наименьшему значению полной энергии электронной подсистемы:

$$\begin{aligned} \frac{E}{N_a} = \\ = \left[ \int_{-\pi}^{-\Lambda_0} + \int_{\Lambda_0}^{\pi} \right] \left[ 2\mu - 2 \operatorname{cosh} \eta \left( 1 + \frac{\sin^2 \Lambda}{\sin^2 \Lambda + \sinh^2 \eta} \right) \right] \times \\ \times \sigma(\Lambda) d\Lambda + \frac{1}{2} C\delta^2, \end{aligned} \quad (13)$$

причем

$$\left[ \int_{-\Lambda_0}^{-\Lambda_0} + \int_{\Lambda_0}^{\pi} \right] \sigma(\Lambda) d\Lambda = \frac{M}{N_a} \quad (14)$$

Энергию основного состояния можно выразить через так называемые «одетые» энергии элементарных низколежащих возбуждений (в данном случае — синглетных куперовских пар):

$$E = \int \sigma(\Lambda) \epsilon_0(\Lambda) d\Lambda \equiv \int \sigma_0(\Lambda) \epsilon(\Lambda) d\Lambda = \frac{N_a}{2\pi} \left[ \int_{-\Lambda_0}^{-\Lambda_0} + \int_{\Lambda_0}^{\pi} \right] \epsilon(\Lambda) \Theta(\Lambda, \eta) d\Lambda + \frac{1}{2} C \delta^2, \quad (15)$$

где  $\sigma_0$  — так называемая «голая» плотность пар электронов, которая определяется левой частью интегрального уравнения (12).

«Одетые» энергии пар определяются из интегрального уравнения

$$\epsilon(\Lambda) = 2\mu - 2 \cosh \eta \left( 1 + \frac{\sin^2 \Lambda}{\sin^2 \Lambda + \sinh^2 \eta} \right) - \frac{1}{2\pi} \left[ \int_{-\Lambda_0}^{-\Lambda_0} + \int_{\Lambda_0}^{\pi} \right] \Theta(\Lambda - z, \eta) \epsilon(z) dz, \quad (16)$$

где первые два слагаемых правой части интегрального уравнения определяют  $\epsilon_0$  из (15); обычно ее называют «голой» энергией возбуждений, а взаимодействие, как обычно, «одевает» ее, так же как и плотность возбуждений (функцию распределения) [2].

Уменьшение энергии подсистемы одномерных коррелированных электронов, обусловленное влиянием анизотропии электрон-электронного скалярного и магнитного взаимодействий, сопровождается увеличением энергии упругой (трехмерной) подсистемы. Основному состоянию полной системы (одномерные электроны и трехмерное упругое окружение) будет соответствовать минимальное значение полной энергии.

На рис. 1 представлена зависимость энергии основного состояния одномерной подсистемы сильно коррелированных электронов и упругой подсистемы лигандов (в трехмерной кристаллической решетке) как функция заполнения зоны электронов ( $N/N_a$ ) и смещения  $\delta$ , которое определяет параметр магнитной и скалярной анизотропии элек-

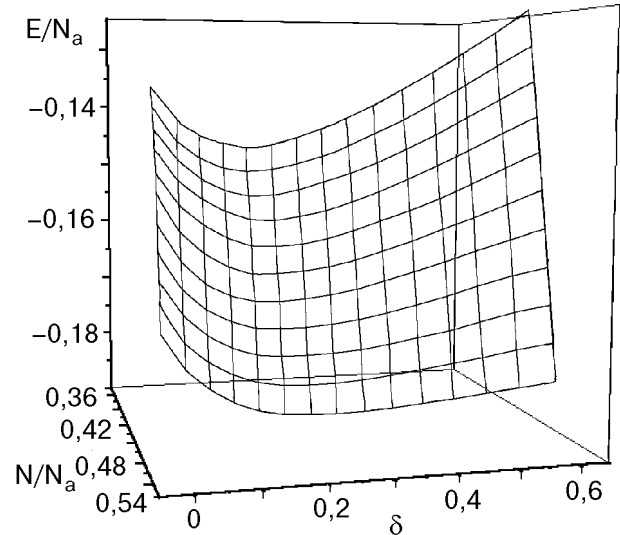


Рис. 1. Полная энергия основного состояния электронной (одномерной) и упругой подсистем  $E$  как функция смещения  $\delta$  положений ионов лигандов в кристаллической решетке (трехмерной) и заполнения зоны электронов.

трон-электронного взаимодействия в одномерной электронной подсистеме. Видно, что при всех приведенных заполнениях зоны электронов (фактически речь идет о заполнении ферми-моря пар, так как в нулевом магнитном поле ферми-море несвязанных электронных возбуждений отсутствует) имеется минимум в зависимости полной энергии основного состояния от дисторсии лигандов (иными словами, как функции параметра анизотропии электрон-электронного взаимодействия). Значение параметра  $\delta$ , соответствующее минимуму энергии, оказывается ненулевым. Это означает, что в основном состоянии в одномерной системе коррелированных электронов оказывается энергетически выгодным появление анизотропии электрон-электронного взаимодействия. Заметим, что указанная анизотропия проявляется как в магнитных, так и в скалярных (зарядовых) взаимодействиях электронов, находящихся на соседних узлах одномерной решетки.

Эквивалентно зависимости энергии системы от заполнения зоны низколежащих электронных возбуждений удобно рассмотреть зависимость исследуемого эффекта от параметра  $\mu$ , который может играть роль химического потенциала, или от приложенного к электронной подсистеме внешнего электрического напряжения (скалярного потенциала). Энергия основного состояния системы как функция смещения  $\delta$  немагнитной решетки лигандов для нескольких значений  $C$  и  $\mu$  приведена на рис. 2. Видно, что при достаточно больших

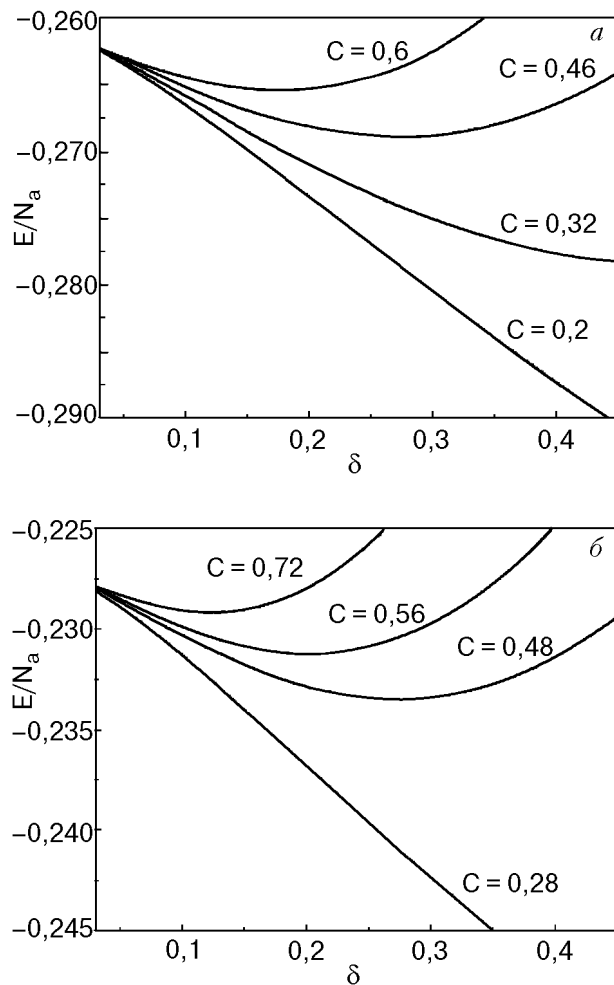


Рис. 2. Полная энергия основного состояния электронной и упругой подсистем  $E$  как функция смещения  $\delta$  положения ионов лигандов в кристаллической (трехмерной) решетке. Химический потенциал электронов  $\mu = 1,1$  (а);  $1,2$  (б).

значениях упругой постоянной ( $C \geq 0,48$  для  $\mu = 1,2$ ) наблюдается минимум энергии основного состояния системы при ненулевой дисторсии решетки немагнитных ионов. Причем экстремальное значение  $\delta$ , соответствующее минимуму энергии основного состояния полной системы, уменьшается при увеличении упругой постоянной  $C$ , а при достаточно малых  $C$  минимум не наблюдается (он смещается к большим значениям  $\delta$ ). Это естественно, так как для того, чтобы обнаружить влияние анизотропии взаимодействия в электронных подсистемах (которая часто очень мала), необходимы достаточно большие упругие смещения: ведь эффект определяется релятивистски малым спин-орбитальным взаимодействием.

Будет ли влиять на устойчивость такой сильно коррелированной электронной подсистемы относительно появления анизотропии межэлектронного взаимодействия внешнее магнитное поле? Рас-

смотрим систему интегральных уравнений (8) для плотностей распределений квантовых чисел синглетных пар и несвязанных электронных возбуждений или «дуальную» ей систему интегральных уравнений для «одетых» энергий этих же низколежащих возбуждений электронной подсистемы, которые имеют ферми-моря, т.е. состояния с отрицательными энергиями:

$$\begin{aligned} \mu + \frac{1}{2} H - \Theta'(v, \eta/2) = \\ = \frac{1}{2\pi} \int d\Lambda \Theta'(v - \Lambda, \eta/2) \epsilon(\Lambda) + \epsilon(v), \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} 2\mu - \Theta'(\Lambda, \eta) = \frac{1}{2\pi} \int dv \Theta'(\Lambda - v, \eta/2) \epsilon(v) + \\ + \frac{1}{2\pi} \int dz \Theta'(\Lambda - z, \eta) \epsilon(z) + \epsilon(\Lambda), \end{aligned}$$

где  $\epsilon(v)$  — «одетая» энергия несвязанных электронных возбуждений (заметим, что заполнение этого ферми-моря также начинается с концов интервала  $[-\pi, \pi]$ ). Очевидно, что во внешнем магнитном поле  $H$ , меньшем критического значения  $H_c$ , которое определяется как

$$H_c = -2\mu + 2\Theta'(\pi, \eta/2) + \frac{1}{\pi} \int d\Lambda \Theta'(\pi - \Lambda, \eta/2) \epsilon(\Lambda), \quad (18)$$

энергии несвязанных электронных возбуждений имеют щель в спектре (иными словами,  $H_c$  — это минимальное внешнее магнитное поле, которое нужно приложить к системе, чтобы «разорвать» синглетную пару). Это значит, что при значениях внешнего магнитного поля  $H \leq H_c$  эффект спонтанного появления анизотропии межэлектронного взаимодействия будет таким же, как и в отсутствие поля. На рис. 3 показана зависимость величины критического поля  $H_c$  от химического потенциала  $\mu$  и параметра анизотропии межэлектронного взаимодействия  $\delta$ .

Если величина внешнего магнитного поля превысит значение  $H_s$ , которое определяется из уравнения

$$H_s = -2\mu + 2\Theta'(\pi, \eta/2), \quad (19)$$

то намагниченность системы электронов принимает максимальное значение (поле насыщения, перехода в ферромагнитное, «спин-поляризованное» состояние, в котором пар нет, а «одетые» спектры энергий несвязанных электронных возбуждений

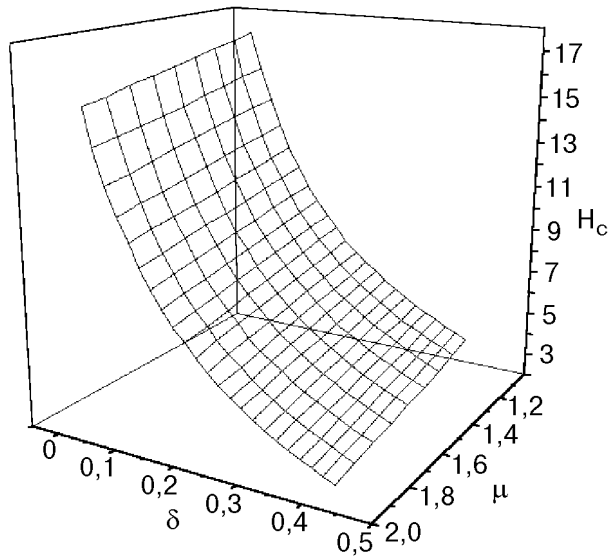


Рис. 3. Зависимости критического магнитного поля  $H_c$  от химического потенциала  $\mu$  и параметра анизотропии  $\delta$ .

становятся активационными, т.е. появляется щель). При этом значения магнитного поля так же, как и при  $H_c$ , в системе происходят фазовые переходы второго рода в основном состоянии. Таким образом, электронная подсистема ведет себя аналогично сверхпроводнику II рода во внешнем поле: при  $H < H_c$  в системе существуют только синглетные пары, а при  $H_c < H < H_s$  есть и пары, и несвязанные электронные возбуждения — аналог эффекта Мейсснера. Отметим, что в одномерной системе, конечно, нет настоящего сверхпроводящего упорядочения (недиагонального дальнего порядка), но в основном состоянии наиболее медленно степенным образом спадают корреляционные функции синглетных пар и/или несвязанных электронных возбуждений в первой — второй фазе. Заметим, что при  $H > H_s$  можно легко найти энергию основного состояния. Она зависит (тривиально) от параметра анизотропии электрон-электронного взаимодействия  $\delta$ :  $E = C\delta^2/2$ . Это означает, что во внешних магнитных полях, больших критического значения перехода в «спин-поляризованную» фазу, эффект спонтанного появления анизотропии электрон-электронного взаимодействия отсутствует. В промежуточной фазе  $H_c < H < H_s$  энергию основного состояния анизотропной суперсимметричной  $t$ - $J$ -цепочки электронов определяют заполнения обоих ферми-морей — для синглетных пар и для несвязанных электронных возбуждений. Эффект спонтанного появления анизотропии межэлектронного взаимодействия присутствует, но для количественного

расчета необходимо совместное решение системы двух интегральных уравнений (17).

Можно оценить, как влияет на исследуемый эффект небольшая температура (при этом мы будем полагать, что температуры настолько малы, что упругая подсистема находится в основном состоянии, т.е. не будем учитывать тепловое движение трехмерной решетки). При низких температурах можно воспользоваться хорошо известным разложением Зоммерфельда (для простоты мы будем изучать лишь случай  $H < H_c$ ). Тогда для свободной энергии  $F$  имеем

$$F = E - N_a \frac{\pi T^2}{6v_F}, \quad (20)$$

где  $v_F$  — фермиевская скорость синглетных пар, которая определяется как

$$v_F = \left. \frac{\varepsilon'(\Lambda)}{2\pi\sigma(\Lambda)} \right|_{\Lambda=\Lambda_0}, \quad (21)$$

а «одетая» энергия и плотность синглетных пар находятся из уравнений (16) и (12) соответственно. На рис. 4 представлена зависимость суммарной свободной энергии электронной и упругой подсистем от температуры  $T$  и параметра  $\delta$ , определяющего анизотропию электрон-электронного взаимодействия. Видно, что включение низких температур (по сравнению с характерной энергией Ферми низколежащих электронных возбуждений — пар) не приводит к исчезновению эффекта, т.е. и при ненулевых (но достаточно

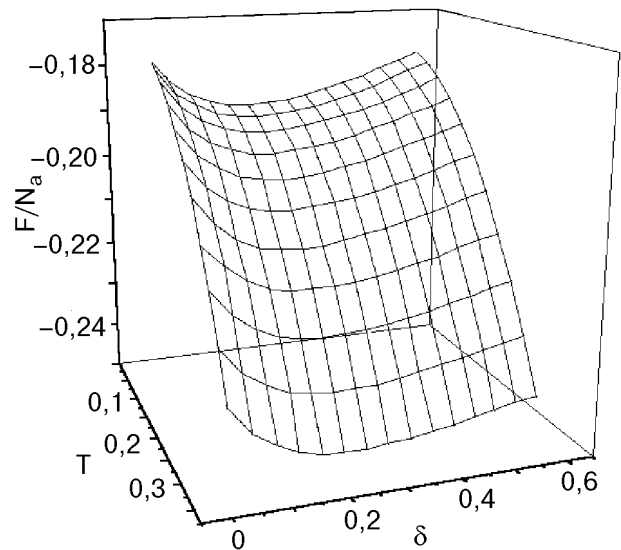


Рис. 4. Полная свободная энергия одномерной электронной и упругой подсистем  $F$  как функция смещения  $\delta$  положения ионов лигандов и температуры. Химический потенциал электронов  $\mu = 1,34$ .



низких) температурах в системе спонтанно появляется анизотропия межэлектронных взаимодействий. Однако при повышении температуры значение  $\delta$  в минимуме энергии смещается в сторону меньших величин.

### Заключение

Исследовано влияние однородных смещений решетки трехмерного кристалла, в котором движение и взаимодействие электронов вдоль одного направления гораздо больше, чем вдоль других кристаллографических направлений. Показано, что вследствие дисторсии изменяются электрические кристаллические поля лигандов. Это, в свою очередь, приводит к изменению влияния кристаллических полей на орбитальные моменты коррелированных электронов в выделенной цепочке, в результате чего возникает спонтанная анизотропия скалярного (зарядового) электрон-электронного взаимодействия и (вследствие наличия спин-орбитальной связи) магнитная анизотропия при взаимодействии спинов электронов. Таким образом, в работе предсказан эффект спонтанного появления зарядовой и магнитной анизотропии в одномерных цепочках сильно коррелированных электронов в трехмерных кристаллах с квазиодномерным характером электронных свойств. Исследовано влияние варьирования внешнего магнитного поля, а также включения малой (по сравнению с характерными энергиями одномерных электронов) температуры на изменение заполнения электронных зон (в зависимости от приложенного внешнего электростатического напряжения). Отметим, что этот эффект обладает интересной особенностью по сравнению с изученным ранее появлением спонтанной магнитной анизотропии в квазиодномерном гейзенберговском антиферромагнитном диэлектрике (в котором все электроны локализованы). А именно, в спиновой цепочке появляется спонтанная магнитная анизотропия типа «легкая плоскость», в то время как в сильно коррелированной электронной цепочке возникает помимо зарядовой и магнитная анизотропия, но легкоосного типа. Причиной такого различия является существование в цепочке коррелированных электронов моря Ферми для (бесщелевых) синглетных пар, т.е. чисто зарядовых возбуждений, не изменяющих полного спина системы. В спиновой же цепочке, где все электроны локализованы, такая зарядовая мода отсутствует, поэтому магнитная анизотропия типа «легкая ось» приводит к появлению щели в спектре спиновых возбуждений. Существование такой щели не позволяет слабому влиянию кристаллического поля лигандов привести к неустойчивости исследуемого типа.

Заметим, что изученный в работе эффект по своей природе близок к хорошо известному кооперативному эффекту типа Яна—Теллера.

1. D. C. Johnston, J. W. Johnston, D. P. Goshorn, and A. P. Jacobson, *Phys. Rev.* **B35**, 219 (1987); Z. Hiroi, M. Azuma, M. Takano, and Y. Bando, *J. Solid State Chem.* **95**, 230 (1990); M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, and Y. Kitaoka, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3463 (1994); Y. Ajiro, T. Asano, T. Inami, H. Aruga-Katori, and T. Goto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **63**, 859 (1994); G. Chamboussant P. A. Crowell, L. P. Levy, O. Piovesana, A. Madouri, and D. Maily, *Phys. Rev.* **B55**, 3046 (1997); S. A. Carter, B. Batlogg, R. J. Cava, J. J. Krajewski, W. F. Peck, Jr., and T. M. Rice, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1378 (1996); G. Chamboussant, Y. Fagot-Revurat, M.-H. Julien, M. E. Hanson, C. Berthier, M. Horvatić, L. P. Levy, and O. Piovesana, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2713 (1998); W. Shiramura, K. Takatsu, B. Kurniawan, H. Tanaka, H. Uekusa, Y. Ohashi, K. Takizawa, H. Mitamura, and T. Goto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 1548 (1998).
2. V. E. Korepin, N. M. Bogoliubov, and A. G. Izergin, *Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions*, Cambridge University press, Cambridge (1993).
3. А. Е. Боровик, А. А. Звягин, *ФТТ* **33**, 1587 (1991).
4. Д. М. Апальков, А. А. Звягин, *ФНТ* **24**, 844 (1998).
5. P. Jordan and E. Wigner, *Z. Phys.* **47**, 631 (1928).
6. P. Pincus, *Solid State Commun.* **22**, 1971 (1971); G. Beni and P. Pincus, *J. Chem. Phys.* **57**, 3531 (1972); A. M. Kosevich and V. I. Khokhlov, *Solid State Commun.* **11**, 461 (1972); J. Y. Dubois and J. P. Carton, *J. de Physique (Paris)* **35**, 371 (1974); Y. Lépine and A. Caillé, *J. Chem. Phys.* **67**, 5598 (1977); C. Tannous and A. Caillé, *Can. J. Phys.* **57**, 508 (1979); Y. Lépine and A. Caillé, *J. Chem. Phys.* **71**, 3728 (1979); Y. Lépine, *Phys. Rev.* **B24**, 5242 (1981).
7. M. Hase, I. Terasaki, and K. Uchinokura, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3651 (1993); M. Isobe and Y. Ueda, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1178 (1996); M. Isobe and Y. Ueda, *Techn. Rept. of ISSP A3253* (1997).
8. F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev.* **B37**, 3759 (1988).
9. C. K. Lai, *J. Math. Phys.* **15**, 167 (1974).
10. P. Shlottmann, *Phys. Rev.* **B36**, 5177 (1987).
11. B. Sutherland, *Phys. Rev.* **B12**, 3795 (1975).
12. F. H. L. Essler and V. E. Korepin, *Phys. Rev.* **B46**, 9147 (1992).
13. R. Z. Bariev, *Phys. Rev.* **B49**, 1474 (1994).
14. P.-A. Bares, G. Blatter, and M. Ogata, *Phys. Rev.* **B44**, 130 (1991).

### Spontaneous appearance of interaction anisotropy in a quasi-one-dimensional strongly correlated electron system

D. M. Apalkov and A. A. Zvyagin

Instability of a quasi-one-dimensional strongly correlated electron system in the real three-dimensional crystal is predicted with the appearance of the anisotropy of inter-electron interaction. The influences of an external magnetic field, electron band filling and low nonzero temperatures on the predicted instability are studied.