

УДК 539.21

ИССЛЕДОВАНИЕ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХАБДАРДА С СИЛЬНЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ КВАНТОВЫМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

С. Н. Молотков, И. А. Рыжкин, В. В. Татарский

Квантовым методом Монте-Карло при конечной температуре и различных концентрациях носителей исследована одномерная модель Хаббарда с сильным внутриузельным отталкиванием. Вычислена зависимость энергии системы, корреляторов плотность—плотность, спин—спин от концентрации электронов. Показано, что с отклонением заполнения от половинного ближний антиферромагнитный порядок нарушается и система переходит в жидкость из коррелированных пар.

В последнее время значительно возрос интерес к электронным системам с сильными корреляционными эффектами, которые описываются моделями типа модели Хаббарда [1]. Интерес объясняется прежде всего высказанной в работе Андерсона [2] гипотезой о возможности реализации в таких системах сверхпроводящего состояния, обусловленного электронными корреляциями и описания, таким образом, явления высокотемпературной сверхпроводимости [3, 4]. При развитии этого направления был получен ряд фундаментальных результатов о природе основного состояния, возбуждениях, механизме сверхпроводимости в системах с сильными корреляционными эффектами [5-7]. К сожалению, почти все эти результаты были либо высказаны в виде гипотез, либо получены в рамках простых приближений типа самосогласованного поля. Специфика моделей с сильными корреляциями заключается в том, что подтвердить или оценить область их применимости с помощью аналитических методов очень трудно. Практически единственным более или менее надежным способом решения этих задач является метод численного моделирования.

Цель настоящей работы — исследование одномерной модели Хаббарда с сильными корреляциями квантовым методом Монте-Карло. Ниже мы будем пользоваться методом, развиваемым в работах Хирша и др. [8, 9], который состоит в сведении d -мерной квантовой задачи к $d+1$ -мерной классической. Формально этот метод применим при произвольных константах взаимодействия. Однако предел сильного взаимодействия, а именно эта область представляет интерес, требует очень больших затрат машинного времени. Даже для одномерной модели Хаббарда сложно продвинуться в область больших констант связи, не говоря уже о двумерном и трехмерном случаях [9]. Этих трудностей можно избежать, если использовать условие сильных корреляций и привести гамильтониан Хаббарда к редуцированной форме.

Использование одномерной модели также позволяет провести сравнение с точными решениями [10-12], где это возможно, и оценить точность метода Монте-Карло. При этом основное внимание будем уделять проверке качественных результатов, высказанных в работах [2, 5-7]. Конечно, в одномерной модели не следует ожидать наличия сверхпроводимости. Тем не менее свойства основного состояния представляют интерес, поскольку одномерная модель послужила в большой степени источником идей в этой области [13].

Модель Хаббарда в однозонном приближении описывается гамильтонианом [1]

$$\hat{H} = -t \sum_{i,j} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

где t — матричный элемент перекрытия между ближайшими соседями i, j ; U — константа внутриузельного кулоновского отталкивания; $c_{i,\sigma}^{\dagger}$, $c_{j,\sigma}$; $n_{i\uparrow}$, $n_{j\downarrow}$ — операторы рождения, уничтожения и числа частиц. Дополнительным параметром модели является коэффициент заполнения $\nu = n_e/N$, где n_e — число электронов, N — число узлов в системе. Для определенности полагаем $\nu > 1/2$.

Случаю сильных корреляций соответствует $t/U \ll 1$. При этом, рассматривая кинетическую энергию как возмущение, с точностью до членов второго порядка по t/U можно привести гамильтониан к редуцированной форме [14, 15], справедливой в подпространстве без пустых узлов

$$\hat{H} = -t \sum_{ij} n_{i-\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} n_{j-\sigma} - 2t^2/U \sum_{ij} [n_{i\sigma} (1 - n_{i-\sigma}) n_{j-\sigma} (1 - n_{j\sigma}) - c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i-\sigma} c_{j-\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}] \quad (2)$$

Использование редуцированной формы означает учет состояний, возникающих только из вырожденного основного состояния в пределе $t=0$, что заметно сокращает время вычислений.

Для численного моделирования используется метод сведения d -мерной квантовой задачи к $d+1$ -мерной классической [8, 9]. Приведем основные формулы на примере вычисления статистической суммы

$$Z = \text{tr} (e^{-\beta \hat{H}}). \quad (3)$$

Представим гамильтониан в виде суммы членов, относящихся к четным и нечетным связям

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \quad \hat{H}_1 = \sum_{\text{неч}} \hat{H}_{i+1}, \quad \hat{H}_2 = \sum_{\text{чет}} \hat{H}_{i+1}, \quad (4)$$

и разобьем интервал $[0, \beta]$ на L интервалов величиной $\Delta \tau = \beta/L$. При $L \rightarrow \infty$, $\Delta \tau \rightarrow 0$ можно разбить экспоненту от суммы в уравнении (3) на произведение экспонент, поскольку в этом пределе поправки из-за некоммутативности операторов $\sim \Delta \tau^2$ имеем

$$Z = \text{tr} [(\hat{U}_1 \hat{U}_2)^L], \quad (5)$$

где $\hat{U}_{1,2} = \exp(-\Delta \tau \hat{H}_{1,2})$. Далее запишем след в формуле (5) в явном виде, вставляя полную систему функций на каждом временном срезе

$$Z = \sum \langle k_1 | \hat{U}_1 | k_2 \rangle \langle k_2 | \hat{U}_2 | k_3 \rangle \dots \langle k_{2L} | \hat{U}_2 | k_1 \rangle, \quad (6)$$

где состояние $|k\rangle$ имеет вид

$$|k_j\rangle = \left| \begin{matrix} n_{1j\uparrow} n_{2j\uparrow} \dots n_{Nj\uparrow} \\ n_{1j\downarrow} n_{2j\downarrow} \dots n_{Nj\downarrow} \end{matrix} \right\rangle, \quad (7)$$

$n_{ij\uparrow}$, $n_{ij\downarrow}$ — числа заполнения узла i электронами со спинами \uparrow и \downarrow в j срезе по мнимому времени из интервала $[0, \beta]$.

Выражение (6) представляет собой след от произведения матриц, который удобно представить графически следующим образом. Рассмотрим две квадратные решетки размером $N \times 2L$, расположенные друг над другом. Верхняя отвечает электронам со спинами \uparrow , нижняя со спинами \downarrow (рис. 1). Узлам решеток соответствуют числа заполнения $n_{i\uparrow}$, $n_{j\downarrow}$, равные 0 или 1. Горизонтальные сечения отвечают $2L$ состояниям типа (7) в выражении (6). Переход от одного сечения к другому, к следующему, определяется матричными элементами оператора эволюции $\langle i | \hat{U}_{1,2} | i' \rangle$. Используя со-

отношения (4), (5), можно представить матрицы эволюции в виде произведения матриц размером 4×4 типа

$$\left\langle \begin{array}{c} n_{ij} \uparrow n_{i+1j} \uparrow \\ n_{ij} \downarrow n_{i+1j} \downarrow \end{array} \right| e^{-\Delta\tau \hat{H}_{i, i+1}} \left| \begin{array}{c} n_{ij+1} \uparrow n_{i+1j+1} \uparrow \\ n_{ij+1} \downarrow n_{i+1j+1} \downarrow \end{array} \right\rangle. \quad (8)$$

Этим матрицам соответствуют кубы с заштрихованными верхними и нижними гранями, причем вершинам кубов приписываются числа заполнения электронов, соединим — занятые вершины на передней и задней гранях. В результате на полной двухслойной решетке получается набор непересекающихся периодических по мнимому времени фермионных траекторий. Отсутствие пересечений является следствием принципа Паули.

Суммирование в формуле (6) означает суммирование по всем допустимым траекториям. Отметим, что траектории являются непрерывными. Для разорванных траекторий вклад в статистическую сумму обращается в нуль.

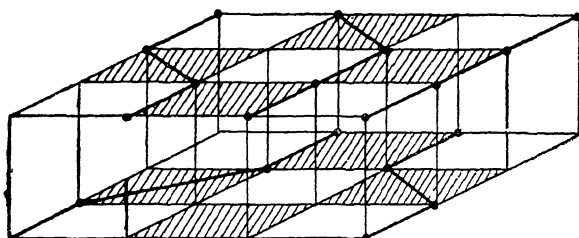


Рис. 1. Элемент двухслойной шахматной доски.

Верхний и нижний слои соответствуют электронам со спинами \uparrow, \downarrow . Заштрихованным квадратам соответствуют операторы эволюции \hat{U}_1, \hat{U}_2 . Жирные линии изображают электронные мировые линии.

Для суммирования по всевозможным траекториям использовался метод Монте-Карло. Генерация различных конфигураций траекторий осуществлялась посредством алгоритма Метрополиса [16]. Применительно к нашей задаче он заключается в следующем. На каждом шагу делается попытка локального изменения минимально возможного числа траекторий. Наименьшее локальное изменение состоит в переключении траектории без ее разрыва в пределах одного незаштрихованного куба. Все допустимые конфигурации кубов, допускающие локальное переключение, изображены на рис. 2.

Для вычисления вероятностей перехода необходимо знать матричные элементы оператора эволюции, которые можно найти, зная действие $\hat{U}_{1, 2}$ на состояние пары узлов

$$\hat{C}_i \left| \begin{array}{c} 10 \\ 01 \end{array} \right\rangle = e^{\Delta\tau V/2} \left\{ \text{ch}(\Delta\tau V/2) \left| \begin{array}{c} 10 \\ 01 \end{array} \right\rangle - \text{sh}(\Delta\tau V/2) \left| \begin{array}{c} 01 \\ 10 \end{array} \right\rangle \right\},$$

$$\hat{C}_i \left| \begin{array}{c} 01 \\ 10 \end{array} \right\rangle = e^{\Delta\tau V/2} \left\{ \text{ch}(\Delta\tau V/2) \left| \begin{array}{c} 01 \\ 10 \end{array} \right\rangle - \text{sh}(\Delta\tau V/2) \left| \begin{array}{c} 10 \\ 01 \end{array} \right\rangle \right\},$$

$$\hat{C}_i \left| \begin{array}{c} 01 \\ 11 \end{array} \right\rangle = \text{ch}(\Delta\tau V) \left| \begin{array}{c} 01 \\ 11 \end{array} \right\rangle + \text{sh}(\Delta\tau V) \left| \begin{array}{c} 10 \\ 11 \end{array} \right\rangle,$$

$$\hat{C}_i \left| \begin{array}{c} 10 \\ 11 \end{array} \right\rangle = \text{ch}(\Delta\tau V) \left| \begin{array}{c} 10 \\ 11 \end{array} \right\rangle + \text{sh}(\Delta\tau V) \left| \begin{array}{c} 01 \\ 11 \end{array} \right\rangle,$$

$$\hat{U}_i \left| \begin{array}{c} 11 \\ 10 \end{array} \right\rangle = \text{ch}(\Delta\tau V) \left| \begin{array}{c} 11 \\ 10 \end{array} \right\rangle + \text{sh}(\Delta\tau V) \left| \begin{array}{c} 11 \\ 01 \end{array} \right\rangle,$$

$$\hat{U}_i \left| \begin{array}{c} 11 \\ 01 \end{array} \right\rangle = \text{ch}(\Delta\tau V) \left| \begin{array}{c} 11 \\ 01 \end{array} \right\rangle + \text{sh}(\Delta\tau V) \left| \begin{array}{c} 11 \\ 10 \end{array} \right\rangle,$$

$$V = 2t^2/U.$$

(9)

Для оставшихся состояний действие оператора \hat{U}_1 эквивалентно умножению на единичную матрицу.

Вероятность элементарного переключения траектории определяется отношением произведения матричных элементов

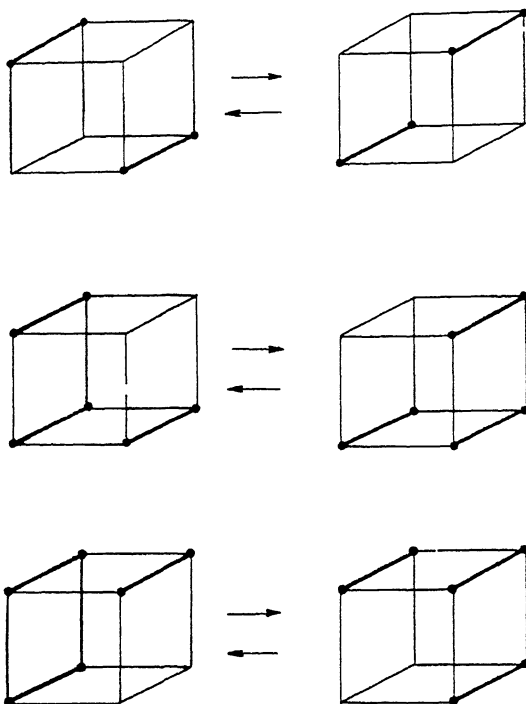


Рис. 2. Конфигурации кубов со светлыми горизонтальными гранями, допускающие элементарные изменения траекторий, и типы изменений траекторий.

$$\begin{aligned}
 & \langle \hat{n}_{i,j-1\sigma} \hat{n}_{i+1\sigma} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_{i,i+1}} | \hat{n}_{i,j\sigma} \hat{n}_{i+1,j\sigma} \rangle, \\
 & \langle \hat{n}_{i-1,j\sigma} \hat{n}_{i,j\sigma} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_{i-1,i}} | \hat{n}_{i-1,j+1\sigma} \hat{n}_{i,j+1\sigma} \rangle, \\
 & \langle \hat{n}_{i+1,j\sigma} \hat{n}_{i+2,j\sigma} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_{i+1,i+2}} | \hat{n}_{i+1,j+1\sigma} \hat{n}_{i+2,j+1\sigma} \rangle, \\
 & \langle \hat{n}_{i,j+1\sigma} \hat{n}_{i+1,j+1\sigma} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_{i,i+1}} | \hat{n}_{i,j+2\sigma} \hat{n}_{i+1,j+2\sigma} \rangle, \\
 & | \hat{n}_{i,j\sigma} \hat{n}_{i+1,j\sigma} \rangle = \begin{vmatrix} n_{i,j\uparrow} & n_{i+1,j\uparrow} \\ n_{i,j\downarrow} & n_{i+1,j\downarrow} \end{vmatrix}
 \end{aligned} \quad (10)$$

до и после переключения траекторий.

Результатом таких переключений конфигураций является марковская цепь длины M . Статистическое среднее от некоторого оператора определяется как

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M A_k, \quad (11)$$

где A_k — значение оператора для k -й реализации траекторий.

Вычисления и результаты

В данной работе определены при различных температурах и числа заполнения следующие величины:

спин-спиновая корреляционная функция

$$S(k) = 4(-1)^k \langle s_{i+k}^z s_i^z \rangle = (-1)^k \langle (n_{i+k\uparrow} - n_{i+k\downarrow})(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \rangle, \quad (12)$$

корреляционная функция плотность—плотность

$$\rho(k) = (-1)^k \langle (n_{i+k\uparrow} + n_{i+k\downarrow})(n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}) \rangle, \quad (13)$$

средняя энергия системы

$$\langle E \rangle = \text{tr} (\hat{H} e^{-\beta \hat{H}}) / z. \quad (14)$$

Отметим, что вычисления средних значений по формуле (11) возможно только для операторов диагональных в представлении чисел заполнения. Именно такой случай имеет место при вычислении $S(k)$ и $\rho(k)$. Для среднего значения энергии необходимо вычислять статистическое среднее от гамильтониана, который недиагонален в представлении чисел заполнения. Среднее от такого оператора можно представить в виде

$$\langle A \rangle = \text{tr} \left\{ P(i_1, i_2, \dots, i_{2L}) \frac{\langle i_1 | \hat{A} U | i_2 \rangle}{\langle i_1 | U | i_2 \rangle} \right\}, \quad (15)$$

где $P(i_1, i_2, \dots, i_{2L})$ — вероятность данной конфигурации траекторий. Фактически это означает, что для каждой реализации необходимо вычис-

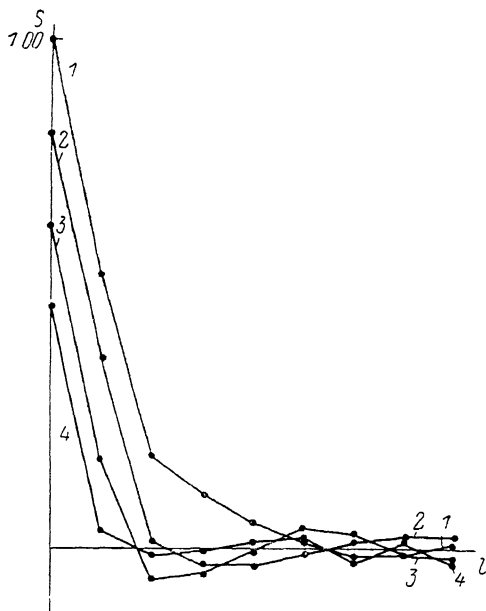


Рис. 3. Спин-спиновые корреляционные функции $S(l)$ при коэффициентах заполнения $\nu=0.0$ (1), 0.2 (2), 0.4 (3), 0.5 (4). $L=512$, $T/V=0.02$.

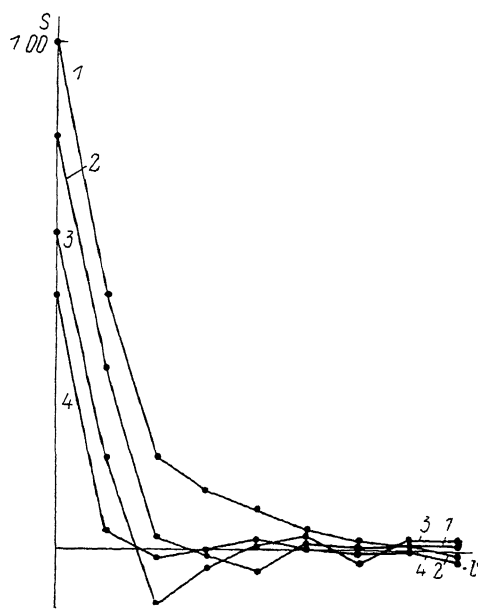


Рис. 4. Спин-спиновые корреляционные функции $S(l)$ при $\nu=0.0$ (1), 0.2 (2), 0.4 (3), 0.5 (4). $L=64$, $T/V=0.16$.

лять отношение матричных элементов $\langle i_1 | \hat{A} \hat{U} | i_2 \rangle / \langle i_1 | \hat{U} | i_2 \rangle$ и усреднять такую величину.

В наших расчетах число пространственных узлов системы равнялось 32. Для уменьшения влияния границ использовались периодические граничные условия. Отношение матричного элемента перескока к внутриузельному отталкиванию равнялось $t/U=0.1$. Отклонения заполнения от половинного $\nu=1$ были следующие: 0, 6/32, 12/32, 16/32. Для сохранения одинаковой точности расчетов при различных температурах фиксировалась величина $\Delta \tau V=0.1$. Температура при этом определялась числом интервалов по оси мнимого времени L . Значения $L=512$, 256, 128, 64, 32 соответствуют величине $T/V=0.02 \div 0.3$. Число попыток при элементарном акте переключения траектории равнялось 15 000 на каждый пространственно-временной куб.

Из расчетов следует, что корреляционная функция плотность—плотность (13) распадается на произведение средних $\langle n_{i+k} \rangle \langle n_i \rangle$, что говорит

о полном отсутствии корреляций электронной плотности на разных узлах. Таким образом, состояние с волной зарядовой плотности в системе отсутствует, что вполне естественно, поскольку гамма-функция не содержит членов отталкивания электронов на соседних узлах.

На рис. 3, 4 приведена спин-спиновая корреляционная функция при $L=512, 64$ и различных числах заполнения. Антиферромагнитные корреляции распространяются на несколько постоянных решетки. Данный факт свидетельствует о том, что состояние системы не является нееевским, а обнаруживает только ближний антиферромагнитный порядок. При $\nu=1$ и $t/U \ll 1$ модель Хаббарда сводится к модели Гейзенберга со спином $1/2$. Спин-спиновая корреляционная функция на соседних узлах для такой модели при $T=0$ была вычислена точно в работе [11]. Значение $S(k)$ в наших расчетах $S(1)=0.140$ с хорошей точностью согласуется с точным значением $S(1)=-(\ln(2)-1/4)/3=0.147$. Точность при этом

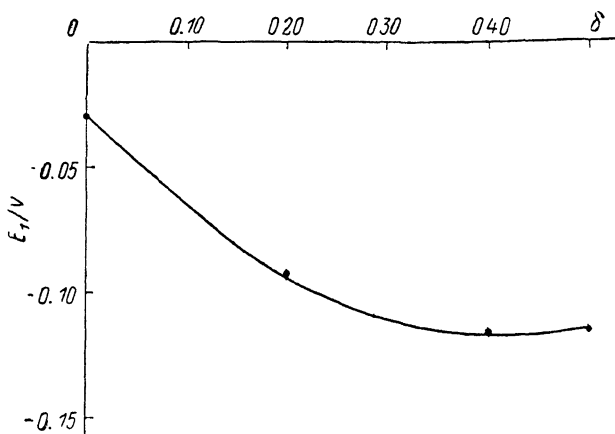


Рис. 5. Зависимость энергии E_1 от заполнения δ . $T/V=0.02$.

определяется числом разбиений интервала $[0, \beta]$. Для достижения большей точности необходимо увеличивать число интервалов разбиения по оси мнимого времени L .

Далее из рис. 3, 4 видно, что корреляции убывают с ростом температуры (уменьшением L) и коэффициента заполнения. При $\nu-1 \geq 12/32$ поведение корреляционной функции с расстоянием существенно меняется. Ближний антиферромагнитный порядок разрушается, но разрушение порядка происходит не с полной потерей корреляций спинов ближайших соседей. Антиферромагнитные корреляции ближних узлов остаются, но пропадают корреляции между синглетными парами спинов. Происходит как бы сбой ориентации синглетных пар в разных местах цепочки (рис. 3). На наш взгляд, данный факт можно интерпретировать как переход системы в состояние квантовой жидкости из сильно коррелированных синглетных пар [2].

Полная энергия на один узел в системе равна

$$E_{\text{tot}} = \delta U + E_1(\delta, T) \nu, \quad \delta = \nu - 1. \quad (16)$$

Зависимость E_1 от температуры не содержит никаких особенностей, что говорит об отсутствии каких-либо фазовых переходов. Зависимость $E_1(\delta, T)$ изображена на рис. 5. Добавка к энергии E_1 от δ отрицательна и убывает при малых δ . Это означает, что в системе существует эффективное притяжение между электронами.

Таким образом, моделирование методом квантового Монте-Карло показывает, что с ростом заполнения δ ближний антиферромагнитный порядок разрушается с образованием коррелированных синглетных пар, что приводит к возникновению эффективного притяжения между электронами.

В заключение авторы благодарят С. В. Иорданского и С. В. Мешкова за полезные обсуждения в процессе работы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Hubbard J. // Proc. Roy. Soc. 1963. V. A276. P. 238—273.
- [2] Anderson P. W. // Science. 1987. V. 235. N T-10. P. 1196—1198.
- [3] Bednorz J. G., Muller K. A. // Z. Phys. B. Condensed Matter. 1986. V. 64. N 6. P. 189—193.
- [4] Wu M. K., Ashburn J. R., Torng C. J. et al. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. N 9. P. 908—910.
- [5] Baskaran G., Zou Z., Anderson P. W. // Sol. St. Comm. 1987. V. 63. N 11. P. 973—976.
- [6] Kivelson S. A., Rokhsar D. S., Sethna J. P. // Phys. Rev. 1987. V. B35. N 16. P. 8865—8868.
- [7] Zhang F. C., Gros C., Rice T. M., Shiba H. // Preprint Theoretische Physik. 1987. P. 1—39.
- [8] Hirsch J. E., Sugar R. L., Scalapino D. J., Blankenbecler R. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 47. N 22. P. 1628—1631.
- [9] Hirsch J. E., Sugar R. L., Scalapino D. J., Blankenbecler R. // Phys. Rev. 1982. V. B26. N 9. P. 5033—5055.
- [10] Bethe H. A. // Z. Phys. 1931. V. 71. N 6. P. 205—226.
- [11] Bonner J., Fisher M. E. // Phys. Rev. 1964. V. A135. N 3. P. 640—658.
- [12] Lieb E. H., Wu E. Y. // Phys. Rev. Lett. 1968. V. 20. N 25. P. 1445—1448.
- [13] Anderson P. W. // Materials Research Bulletin. 1973. V. 8. N 2. P. 153—160.
- [14] Emery V. // Phys. Rev. 1976. V. B14. N 7. P. 2989—2994.
- [15] Hirsch J. E. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. N 12. P. 1317—1320.
- [16] Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N. et al. // J. Chem. Phys. 1953. V. 21. N 6. P. 1087—1098.

Институт физики твердого тела АН СССР
Черноголовка
Московская область

Поступило в Редакцию
14 июля 1988 г.
