

КЛАСТЕРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ МОДЕЛИ ХАББАРДА С ТОЧНЫМ УЧЕТОМ БЛИЖНЕГО МАГНИТНОГО ПОРЯДКА В КЛАСТЕРЕ 2×2

С. В. Николаев^{a,b,}, С. Г. Овчинников^{a,c}*

^a *Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск,*

^b *Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского
644077, Омск, Россия*

^c *Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 17 декабря 2009 г.

Представлена кластерная теория возмущений для двумерной модели Хаббарда, построенная с использованием X -операторов в приближении Хаббард-I. Точный учет ближнего магнитного порядка осуществлялся путем разбиения всей решетки на отдельные 2×2 -кластеры и решения задачи на собственные значения в отдельно взятом кластере методом точной диагонализации с учетом всех возбужденных уровней. Рассмотрен случай половинного заполнения с учетом перескоков между ближайшими соседями. В результате численного решения была обнаружена теневая зона в спектре квазичастиц. Также было получено, что щель в плотности состояний квазичастичного спектра при нулевой температуре существует при сколь угодно малых значениях параметра кулоновского отталкивания U , и с ростом последнего увеличивается. Установлено, что наличие этой щели в спектре обязано формированию ближнего антиферромагнитного порядка. Исследование температурной эволюции плотности состояний показало, что переход металл–диэлектрик происходит непрерывным образом. Показано наличие двух характерных масштабов энергий при конечных температурах, больший связан с формированием псевдощели в окрестности уровня Ферми, а меньший — с температурой перехода металл–диэлектрик. Образование пика в плотности состояний на уровне Ферми, как получается в теории динамического среднего поля вблизи перехода металл–диэлектрик, не выявлено.

1. ВВЕДЕНИЕ

За последние десятилетия стало понятно, что корреляционные эффекты играют основную роль в формировании физических свойств большой группы материалов с сильными электронными корреляциями, в частности, высокотемпературных сверхпроводников. Также не последним фактором, влияющим на свойства ВТСП-купратов, является квазидвумерность их структуры.

Самой перспективной моделью для теоретического исследования квазидвумерных систем с сильными электронными корреляциями является двумерная модель Хаббарда [1]. Несмотря на внешнюю простоту, эта модель способна выявить общие фун-

даментальные свойства подобных материалов. Важным сдерживающим фактором в детальном теоретическом описании свойств сильнокоррелированных систем играет тот факт, что кинетическая и потенциальная энергия одного порядка. Это означает неприемлемость теории возмущений ни в пределе слабой связи, ни в пределе сильной. Но хорошо известно, что исследование двумерных систем в рамках наиболее продвинутых для модели Хаббарда теорий динамического среднего поля [2–4] невозможно из-за пренебрежения в этой теории пространственными корреляциями частиц. В последнее время появилось множество работ, посвященных разработке нового класса теорий, которые можно выделить в раздел с общим названием — квантовые кластерные теории [5]. Сама идея разбить всю решетку на кластеры и учитывать взаимодействия внутри кластера

*E-mail: 25sergeyn@mail.ru

точно, а взаимодействие между кластерами учесть по теории возмущений, возникла достаточно давно [6–8]. В последующем был разработан целый ряд теорий, основанных на этом принципе, например, кластерная теория динамического среднего поля (в англоязычном сокращении, CDMFT) [9], приближение динамического кластера (DCA) [10], кластерная теория возмущений (CPT) [11]. Аналогичный подход был применен в работе [12] при описании плакетной деформации двумерного квантового магнетика.

Первым шагом в этих теориях является разбиение всей решетки на кластеры и точный учет внутрикластерных взаимодействий. Для этой цели в подавляющем большинстве работ используется метод точной диагонализации по Ланцошу [13, 14]. Как будет показано ниже, данный подход без соответствующего контроля числа состояний в гильбертовом пространстве не является корректным и может привести к неправильным результатам. Поэтому в настоящей работе используется метод полной точной диагонализации с учетом всех возбужденных состояний в каждом подпространстве гильбертова пространства локальных состояний кластера.

Вторым шагом при построении кластерных теорий является учет межкластерных взаимодействий. На этом этапе все квантовые кластерные теории существенно различаются. Например, в CDMFT и DCA используется самосогласованный подход учета взаимодействия кластера и окружающей среды, а в CPT-теории учет этого взаимодействия происходит без процедуры самосогласования по теории возмущений с привлечением понятия вспомогательных фермионов [15]. В данной работе используется техника X -операторов Хаббарда, которая позволяет непосредственно и точно записать взаимодействие между кластерами на языке X -операторов. Дальнейшее исследование модели в кластерном представлении возможно с применением различных разработанных для модели Хаббарда приближенных процедур.

Необходимо отметить, что мы работаем в рамках двумерной модели Хаббарда в приближении Хаббард-I для межкластерных перескоков и ограничили случаем половинного заполнения (без допирования). Но даже в таком, на первый взгляд, простом варианте кластерный подход позволил немного приблизить понимание такого важного физического явления как переход металл–диэлектрик (переход Мотта–Хаббарда) и выявил интересные особенности электронной зонной структуры. В частности, показано наличие двух характерных масштабов энергий при конечных температурах — большой связан

с формированием псевдощели в окрестности уровня Ферми, а меньший — с температурой перехода металл–диэлектрик

В разд. 2 описан метод точной диагонализации. В разд. 3 проводится построение X -операторов Хаббарда и осуществляется переход к этому представлению в двумерной модели Хаббарда. В разд. 4 описан фурье-переход к решеточному представлению и переход от редуцированной зоны Бриллюэна к расширенной. В разд. 5 представлены результаты численного расчета зонной структуры двумерной решетки, а также представлена зависимость щели от параметра кулоновского взаимодействия на узле U . Проводится аналогия между волной спиновой плотности с дальним магнитным порядком и данной ситуацией с ближним порядком. Вычисляются спиновые корреляционные функции для кластера. В разд. 6 представлены температурные зависимости плотности состояний и показано, что переход металл–диэлектрик происходит непрерывным образом. Определена температура этого перехода и построена ее зависимость от параметра U . В Заключении проводится обсуждение полученных результатов.

2. ТОЧНАЯ ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ

Рассмотрим двумерную модель Хаббарда

$$H = H_0 + H_1, \quad (1)$$

$$H_0 = \sum_{i\sigma} \left\{ (\varepsilon - \mu) n_{i\sigma} + \frac{U}{2} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \right\}, \quad (2)$$

$$H_1 = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}, \quad (3)$$

где $a_{i\sigma}^\dagger$ и $a_{i\sigma}$ — оператор рождения и уничтожения электрона со спином σ на узле i , $n_{i\sigma}$ — оператор плотности электронов со спином σ ($\bar{\sigma} = -\sigma$), ε — энергия электрона на узле, μ — химический потенциал, t_{ij} — интеграл перескока, U — параметр кулоновского взаимодействия на узле. В дальнейшем мы ограничимся только приближением ближайших соседей с амплитудой перескока t .

Перейдем от одноузельного описания к кластерному. Разобьем квадратную решетку на кластеры 2×2 (рис. 1). Причем отметим, что выбор такого типа кластера сохраняет точечную группу симметрии первоначальной решетки.

Перегруппируем слагаемые в гамильтониане (1)

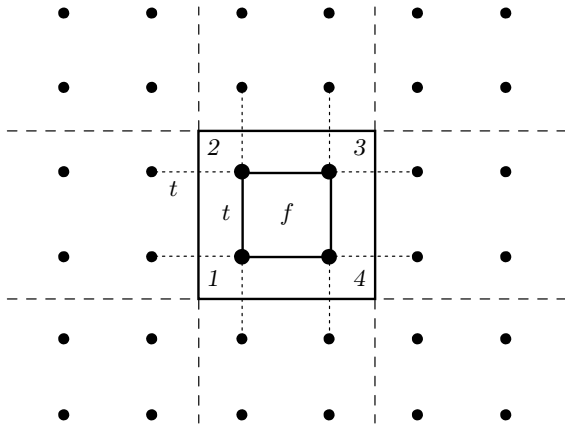


Рис. 1. Разбиение решетки на кластеры 2×2 . Здесь показано взаимодействие между ближайшими соседями внутри кластера (сплошные линии) и между кластерами (пунктирные линии)

так, чтобы отделить внутрикластерные взаимодействия от межкластерных:

$$H = \sum_f H_0^c(f) + \sum_{f \neq g} H_t^c(f, g), \quad (4)$$

где f, g — кластерные индексы. В дальнейшем будем нормировать энергию на величину параметра перескока t , полагая его равным -1 .

Следующим шагом после разбиения решетки на кластеры является точное решение стационарного уравнения Шредингера с внутрикластерной частью гамильтониана (4). После процедуры точной диагонализации получаем точные кластерные собственные волновые функции и соответствующие собственные значения энергии. Здесь хотелось бы подчеркнуть, что мы не используем при точной диагонализации метод Ланцоша, в котором точно находятся только основное и несколько возбужденных состояний. Поэтому в нашем случае собственные векторы представляют собой точный полный набор.

Кластерную волновую функцию можно представить в случае $N = 4$ в виде трех слагаемых, содержащих гомеополярную (с одним электроном на каждом узле), гетерополярную (с одной двойкой) и дважды гетерополярную (с двумя двойками) часть. В пределе $U \rightarrow \infty$ остаются только гомеополярные состояния и волновая функция $|4^0\rangle$ имеет вид [12]

$$|4^0\rangle = \frac{1}{2\sqrt{3}} \{ |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - 2|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - 2|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \}. \quad (5)$$

Поправки к гомеополярной функции (5) получены аналитически при $t \ll U$ в работах [6, 7].

3. ПОСТРОЕНИЕ X-ОПЕРАТОРОВ

Поскольку кластерные волновые функции образуют полный ортонормированный базис, можно по определению построить X -операторы Хаббарда для кластера в следующем виде:

$$X_f^\alpha \equiv X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|, \quad (6)$$

где f — кластерный индекс, $\alpha = \alpha(p, q)$, p и q — соответственно конечное и начальное состояние. Более подробно свойства X -операторов описаны в работах [1, 16–18].

Представим фермиевский оператор уничтожения через X -операторы

$$a_{f\sigma i} = \sum_\alpha \gamma_{i\sigma}(\alpha) X_f^\alpha, \quad (7)$$

$$\gamma_{i\sigma}(\alpha) = \langle m', N-1 | a_{i\sigma} | m, N \rangle, \quad (8)$$

где i — внутрикластерный индекс пробегает значения 1, 2, 3, 4; σ — спиновый индекс. Здесь явно показано, что матричный элемент $\gamma_{i\sigma}(\alpha)$ определяет переходы из части гильбертова пространства с N частицами из состояния m в часть гильбертова пространства с $N-1$ частицей в состояние m' . Аналогично можно записать и оператор рождения.

Используя антикоммутиационное соотношение между фермиевскими операторами рождения и уничтожения, можно записать следующее правило сумм:

$$\langle [a_{f\sigma i}, a_{f\sigma i}^\dagger]_+ \rangle = 1 = \sum_\alpha |\gamma_{i\sigma}(\alpha)|^2 F(\alpha) \equiv f, \quad (9)$$

$$F(\alpha) = \langle X^{pp} \rangle + \langle X^{qq} \rangle, \quad (10)$$

где $F(\alpha)$ — фактор заполнения [17, 18]. Здесь мы ввели f -фактор, величину, которая определяет степень выполняемости правила сумм, выражающего сохранение полного спектрального веса электрона. Расчет показал, что для правильного результата необходимо контролировать эту величину в пределах от 0.99 до 1.00 (подробнее см. разд. 5). Как следует из соотношения (9), f -фактор «набирается» за счет увеличения числа переходов из одной части гильбертова пространства в другое (рис. 2). Следовательно, возникает возможность такой ситуации, когда f -фактор уже близок к 1.0, но еще не все переходы учтены. Это говорит о том, что оставшиеся переходы являются маловероятными и не дают значительного вклада в общую зонную картину. Данный вывод подтверждается результатами вычислений, полученными в настоящей работе.

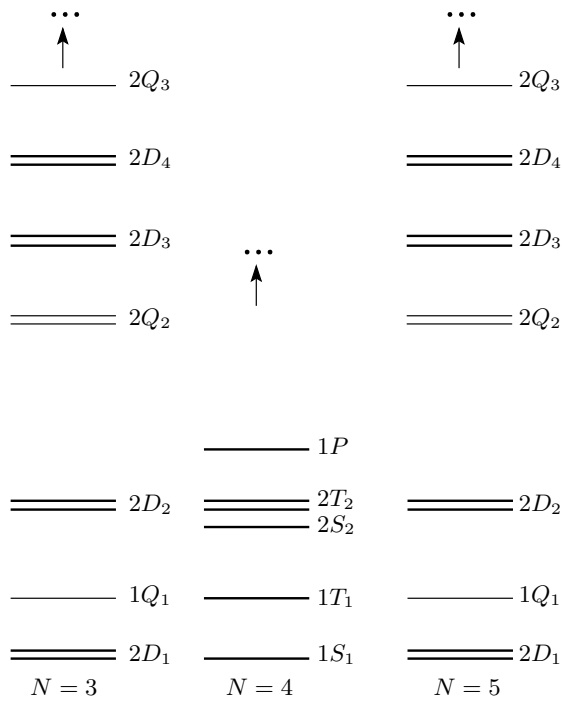


Рис. 2. Низкоэнергетическая часть гильбертова пространства с $N = 3, 4, 5$ для $U = 8$ (обозначения: S — полный спин 0, D — $1/2$, T — 1, Q — $3/2$, P — 2, цифра слева означает вырождение по точечной группе симметрии кластера)

На рис. 2 представлена низкоэнергетическая часть гильбертова пространства для $N = 3, 4, 5$ в диапазоне энергий около $U/2$ относительно нижнего терма для каждого подпространства. Здесь используется следующая схема обозначений состояний: цифра слева означает вырождение, связанное с точечной группой симметрии кластера; буква — полный спин и соответствующую кратность вырождения по спину; индекс — номер состояний с равным полным спином. В подпространстве с $N = 4$ основным состоянием является синглет S_1 (в обозначениях работ [6, 7] — это терм $|4^0\rangle$).

4. ПЕРЕХОД К РЕШЕТКЕ

Определив X -операторы на кластере, можно теперь переписать гамильтониан (4) в виде

$$H = \sum_{fn} \varepsilon_n X_f^{nn} + \sum_{f \neq g} \sum_{\alpha\beta} t_{fg}^{\alpha\beta} X_f^\alpha X_g^{-\beta}, \quad (11)$$

где ε_n — энергия кластера в состоянии n , $t_{fg}^{\alpha\beta}$ — межкластерные интегралы перескока.

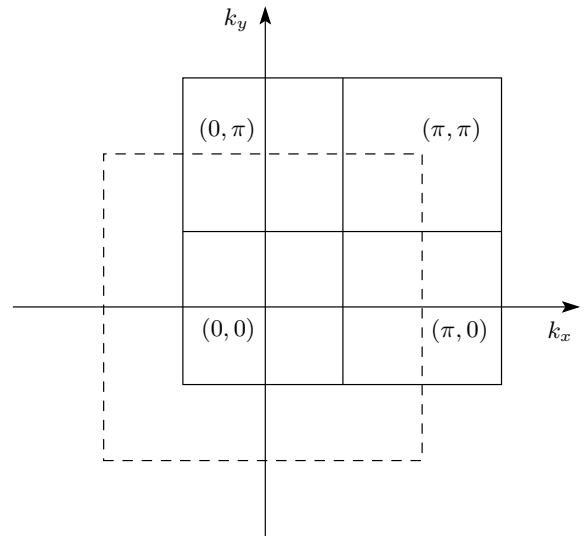


Рис. 3. Исходная зона Бриллюэна (штриховые линии), редуцированная зона Бриллюэна для кластерной сверхрешетки (сплошная линия)

Проведем фурье-преобразование X -операторов. Учтем, что эти операторы определены для кластеров, которые формируют квадратную сверхрешетку с периодом в два раза большем, чем исходная узельная решетка. В нашем случае число узлов на один кластер равно четырем, следовательно, полное число кластеров будет меньше исходного числа узлов также в четыре раза. Принимая все это во внимание, получим

$$X_f^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N^*}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_f} X_{\mathbf{k}}^\alpha, \quad (12)$$

где N^* — число кластеров в сверхрешетке, $\tilde{\mathbf{k}}$ — волновой вектор, принимающий значения в редуцированной зоне Бриллюэна (рис. 3). В результате получим

$$H = \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_n \varepsilon_n(\tilde{\mathbf{k}}) X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{nn} + \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\alpha\beta} T_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}) X_{\tilde{\mathbf{k}}}^\alpha X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{-\beta}. \quad (13)$$

Определим две двухвременные функции Грина на фермиевских операторах рождения и уничтожения и для хаббардовских фермионов в представлении X -операторов

$$G(if, t; jg, t') = \langle \langle a_{if}(t) | a_{jg}^\dagger(t') \rangle \rangle, \quad (14)$$

$$D^{\alpha\beta}(f, t; g, t') = \langle \langle X_f^\alpha(t) | X_g^{-\beta}(t') \rangle \rangle, \quad (15)$$

где i, j — внутрикластерные индексы; f, g — кластерные индексы. Здесь использованы обозначения из работы [19].

Записав уравнение движения для функции Грина (15) и воспользовавшись фурье-преобразованием (12), в приближение Хаббард-I можно получить следующее матричное уравнение:

$$D^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = (D^0(\omega))^{-1} - T(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (16)$$

где

$$D_{\alpha\beta}^0(\omega) = \frac{F(\alpha)}{\omega - \Omega(\alpha)} \delta_{\alpha,\beta}, \quad (17)$$

$$\Omega(\alpha) = \varepsilon_q(N+1) - \varepsilon_p(N) - \mu, \quad (18)$$

$$F(\alpha) \equiv F(p, q) = \langle X^{pp} \rangle + \langle X^{qq} \rangle. \quad (19)$$

Выражение (17) определяет кластерную функцию Грина, которая вычисляется точно. В нее входит энергия перехода (энергия квазичастицы) из состояния q с числом частиц $N+1$ в состояние p с числом частиц N (18), а также фактор заполнения фермиевских квазичастиц (19), определенный как сумма чисел заполнения соответствующих состояний. Эта функция Грина представляет собой диагональную матрицу.

Определим фурье-преобразование для фермиевских операторов

$$a_{f\sigma i} = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_f + \mathbf{r}_i)}, \quad (20)$$

где N_0 — число узлов в исходной решетке, \mathbf{k} — волновой вектор, определенный в исходной зоне Бриллюэна (рис. 3). Заметим, что подобное фурье-разложение для X -операторов (12) определено в редуцированной зоне Бриллюэна. Функцию Грина (15) получаем определенной для сверхрешетки кластеров. Для перехода к электронной функции Грина (14) необходимо установить связь между функциями Грина (14) и (15). Воспользовавшись разложением (7), можно получить

$$\begin{aligned} G_{\sigma\sigma'}(if, t; jg, t') &= \\ &= \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\sigma i}(\alpha) \gamma_{\sigma' j}(\beta) D^{\alpha\beta}(f, t; g, t'). \end{aligned} \quad (21)$$

После фурье-преобразования (20) с учетом выражения (21), фурье-образ электронной функции Грина есть

$$\begin{aligned} G_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{N_c} \times \\ &\times \sum_{\alpha\beta} \sum_{ij} \gamma_{\sigma i}(\alpha) \gamma_{\sigma j}(\beta) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega), \end{aligned} \quad (22)$$

где N_c — число узлов в кластере (в нашем случае равно четырем).

Определив из формулы (22) электронную функцию Грина, найдем спектральную функцию

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} (\text{Im } G(\mathbf{k}, \omega + i\eta + \mu)). \quad (23)$$

Известно, что спектральная функция должна удовлетворять правилу сумм, которое следует из антикоммутиационного соотношения фермиевских операторов:

$$\int d\omega A(\mathbf{k}, \omega) = \langle [a_{\mathbf{k}\sigma}, a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger]_+ \rangle = 1. \quad (24)$$

Выше мы ввели понятие f -фактора (9), которое определяет степень выполнения равенства (24), т. е.

$$\int d\omega A(\mathbf{k}, \omega) = f. \quad (25)$$

И теперь можно в полной мере оценить необходимость в контроле f -фактора на первых шагах вычисления полной функции Грина. Выполнив процедуру точной диагонализации одного кластера, еще не проводя вычисление функции Грина, можно выбрать такое количество фермиевских квазичастиц — хаббардовских фермионов, описываемых переходами $N+1 \rightarrow N$ в гильбертовом пространстве (рис. 2), которое позволит нам удовлетворить правилу сумм в конце вычислений. В идеальной ситуации мы должны включать в рассмотрение все переходы гильбертова пространства. Но так как расчет осуществляется численным путем и увеличение числа переходов влечет за собой увеличение времени счета, то очень важным является до начала вычислений определить их оптимальное число, существенно не повлияв при этом на конечный результат вычисления. Такую возможность и дает контроль f -фактора в начале численного расчета. Примеры такого контроля приведены в следующем разделе.

5. ЗАКОНЫ ДИСПЕРСИИ

Одним из основных способов выявить физические свойства любого вещества является построение и анализ законов дисперсии квазичастиц. С учетом определения (17) дисперсионное уравнение имеет вид

$$\det \left((\omega - \Omega(\alpha)) \delta_{\alpha\beta} - F(\alpha) T_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}) \right) = 0. \quad (26)$$

Решение уравнения (26) дает «голые» законы дисперсии всех квазичастиц. Причем в это множество входят как дисперсии, определяющие зоны, так

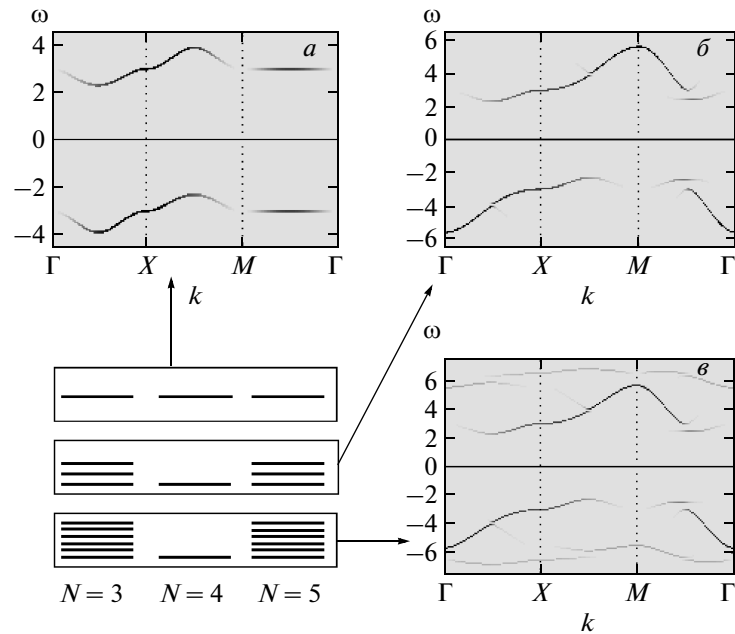


Рис. 4. Зависимость закона дисперсии от количества учитываемых переходов (f -фактора): $f = 0.395$ (а), 0.792 (б), 0.9995 (в); $U = 8$. Схематично представлены состояния в гильбертовом пространстве, переходы между которыми были учтены при расчете соответствующих дисперсий

и бездисперсные уровни. Иначе говоря, уравнение (26) дает и ложные полюса, которые в полной функции Грина сокращаются с числителем. Спектральная функция (23) позволяет найти спектральный вес всех таких состояний при каждом значении волнового вектора и тем самым произвести отбор физически значимых полюсов.

Вернемся еще раз к обсуждению влияния f -фактора на конечный результат вычисления и о применимости метода точной диагонализации по Ланцошу. Напомним, что на величину f -фактора влияет количество учтенных переходов в гильбертовом пространстве между состояниями, различающимися на одну частицу. В случае половинного заполнения для кластера 2×2 это переходы из состояний с $N = 5$ в состояния с $N = 4$, и из состояний с $N = 4$ в $N = 3$ (рис. 2). Причем при нулевой температуре число заполнения состояния $1S_1$ в подпространстве с $N = 4$ равно единице, все остальные состояния незаполнены. Учет квантовых флуктуаций, которые приводят в пределе сильных корреляций к числу двоек порядка $(t/U)^2$, лежит за пределами точности нашего приближения.

На рис. 4 представлена зависимость закона дисперсии от количества учитываемых переходов. Здесь используются следующие обозначения ха-

рактерных точек в зоне Бриллюэна: $\Gamma \equiv (0, 0)$, $X \equiv (\pi, 0)$, $M \equiv (\pi, \pi)$. Видно, что постепенное увеличение числа переходов (т.е. увеличение f -фактора) приводит к существенным изменениям в зонной структуре. Это и изменение дисперсионных зависимостей, и перераспределение веса между ними. Хотя качественно результат является «правильным» на всех представленных дисперсиях. Это, прежде всего, проявляется в образовании верхней и нижней хаббардовских зон.

Таким образом, неконтролируемое отбрасывание возбужденных состояний может привести к нарушению правила сумм и изменению зонной картины в целом. Это и происходит при использовании метода точной диагонализации по Ланцошу, где в силу ограниченности самого метода точно определяются только основное и несколько возбужденных состояний.

На рис. 4в представлена зонная структура для шести переходов в подпространство с меньшим на единицу числом частиц, формирующее нижнюю хаббардовскую зону, и шесть переходов в подпространство с большим на единицу числом частиц, формирующее верхнюю хаббардовскую зону. В этом случае f -фактор равен 0.9995, что говорит о том, что дальнейший учет переходов практически не изменит

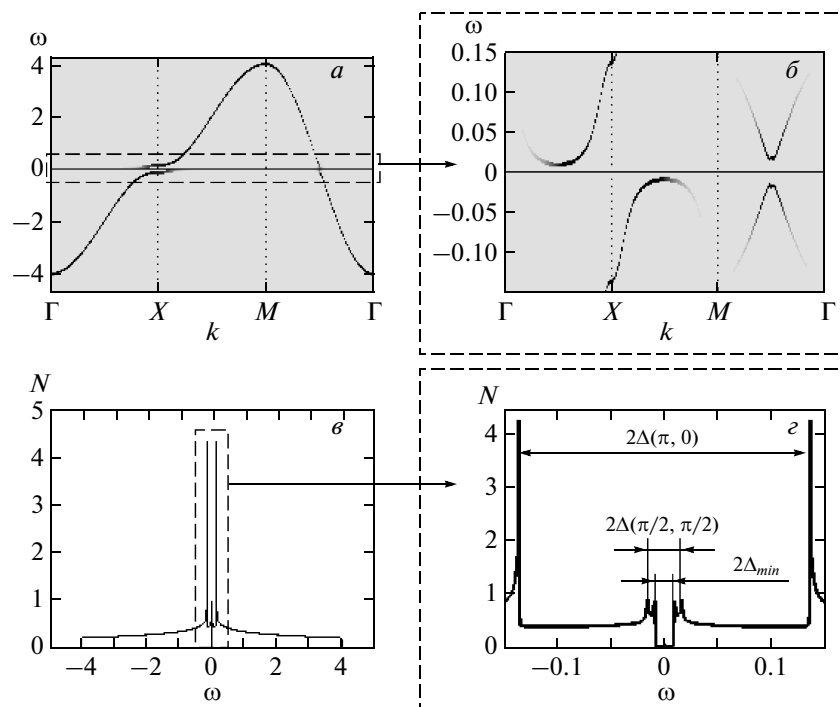


Рис. 5. а) Дисперсионные кривые ($U = 0.5, f = 0.997$), б) увеличенная область дисперсии вблизи уровня Ферми, в) плотность состояний ($U = 0.5, f = 0.997, \delta = 0.0001$), г) увеличенная область плотности состояний для $U = 0.5$

зонной структуры. И действительно, наш расчет с учетом всех оставшихся переходов показал, что появившиеся новые состояния имеют бездисперсный характер и почти нулевой спектральный вес, и не изменяют зонной структуры.

Исследование законов дисперсии и плотности состояний выявило ряд интересных особенностей. На рис. 5 представлены дисперсионные кривые с учетом спектрального веса и соответствующая плотность состояний для параметра кулоновского отталкивания $U = 0.5$. При численных расчетах спектральной функции и плотности состояний, как обычно, дельта-функция заменяется лоренцианом с полушириной δ . Этот параметр на рис. 5 равен 0.0001. Рассмотрим подробнее рис. 5а, на котором отчетливо видна зона свободных электронов для предельного случая $U = 0$ с максимумом в точке (π, π) , минимумом в точке $(0, 0)$ и седловой точкой $(\pi, 0)$. Но вместе с ней еще слабо заметна теньевая зона (рис. 5б), которая забирает на себя часть спектрального веса с основной дисперсии. Появление теньевой зоны обусловлено наличием антиферромагнитного порядка. Но в нашем двумерном случае по теореме Мермина–Вагнера дальний порядок реализоваться может только при нулевой температуре. Мы рассчи-

тываем электронную структуру в предположении об отсутствии дальнего магнитного порядка. Следовательно, появление теньевой зоны становится возможным только благодаря формированию ближнего антиферромагнитного порядка.

На рис. 5в отчетливо видны две симметричные особенности, которые в пределе $U = 0$, соединяясь вместе, дают характерную для этого предела логарифмическую расходимость плотности состояний на уровне Ферми. На рис. 5г представлена увеличенная область плотности состояний вблизи уровня Ферми. Хорошо видно тонкую структуру, имеющую несколько особенностей. Можно выделить три характерных масштаба щели. Это щель в точке $(\pi, 0)$ между седловыми особенностями на дисперсионных кривых (рис. 5б), щель в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ и минимальная щель, отвечающая за истинную щель в плотности состояний. Последняя щель, как видно на рис. 5б, является неоптической и определяется областями дисперсионных кривых со слабым спектральным весом в точках $(\pi/2, 0)$ и $(\pi, \pi/2)$.

Детальный анализ зависимости минимальной щели Δ_{min} от параметра U показал, что щель в плотности состояний при нулевой температуре су-

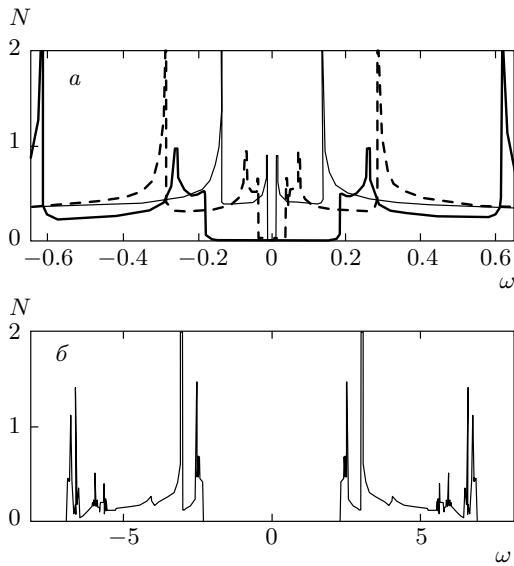


Рис. 6. Зависимость плотности состояний при $T = 0$ от параметра U : *a* — тонкая кривая ($U = 0.5$), штриховая кривая ($U = 1$), жирная кривая ($U = 2$); $f > 0.995$, $T = 0$; *б* — $U = 8$, $f = 0.9995$, $T = 0$

ществует при сколь угодно малых значениях U и с ростом последнего увеличивается (рис. 6). Такое поведение можно сопоставить с поведением щели, возникающей в спектре состояний в теории среднего поля из-за образования волны спиновой плотности (ВСП). При нулевой температуре мы можем найти ВСП-щель из уравнения

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0^2(\mathbf{k}) + \Delta^2}}, \quad (27)$$

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = 2t (\cos k_x a + \cos k_y a). \quad (28)$$

Можно получить зависимость этой щели от параметра U (рис. 7). В формулах (27), (28) волновой вектор \mathbf{k} пробегает по антиферромагнитной зоне Бриллюэна. Видно, что качественно поведение обеих щелей с ростом U совпадает, но наша расчетная кривая лежит ниже вычисленной по формуле (27). При малых значениях параметра U зависимость проявляет экспоненциальный характер, а при больших становится линейной. Также на рис. 7 показана температура перехода из диэлектрика в металл с ростом U (см. ниже).

Расчет спиновых корреляционных функций ближайших соседей внутри кластера показал формирование ближнего антиферромагнитного порядка. Проведенная проверка соотношения $\langle S_0^+ S_n^- \rangle = 2 \langle S_0^z S_n^z \rangle$ показала, что данная система проявляет

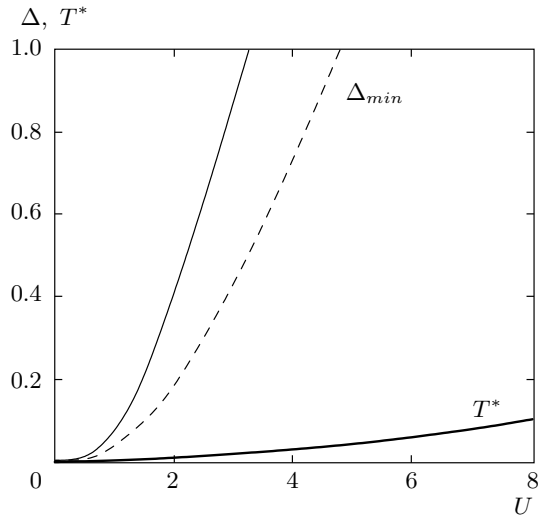


Рис. 7. Зависимость величины щели (сплошная кривая соответствует ВСП-состоянию (27), штриховая кривая — наш численный результат Δ_{min} , в котором учтен ближний антиферромагнитный порядок) и температуры перехода металл–диэлектрик T^* (сплошная жирная кривая) от параметра U

свойства изотропной спиновой жидкости, в которой среднее значение любой компоненты спина равно нулю, а корреляционные функции одинаковы для проекций спина x, y, z .

6. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЭВОЛЮЦИЯ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

В предыдущей части мы уже рассматривали тонкую структуру плотности состояний и получали зависимость ширины щели от параметра кулоновского отталкивания U . Сейчас мы рассмотрим температурные изменения плотности состояний, которые приводят еще к одному очень важному физическому явлению — переходу металл–диэлектрик.

Прежде всего необходимо понять, каким образом температура может оказывать влияние на систему. Во всех приближенных подходах отбрасываются те или иные вклады в собственно-энергетическую часть, которая обуславливает, в частности, затухание квазичастиц с ростом температуры. В связи с этим обстоятельством в большинстве работ, посвященных исследованию модели Хаббарда [20, 21], температурные эффекты учитываются через уширение энергетических уровней $\delta \sim T$, которое можно интерпретировать как влияние мнимой части массового оператора. С другой стороны, при конечной тем-

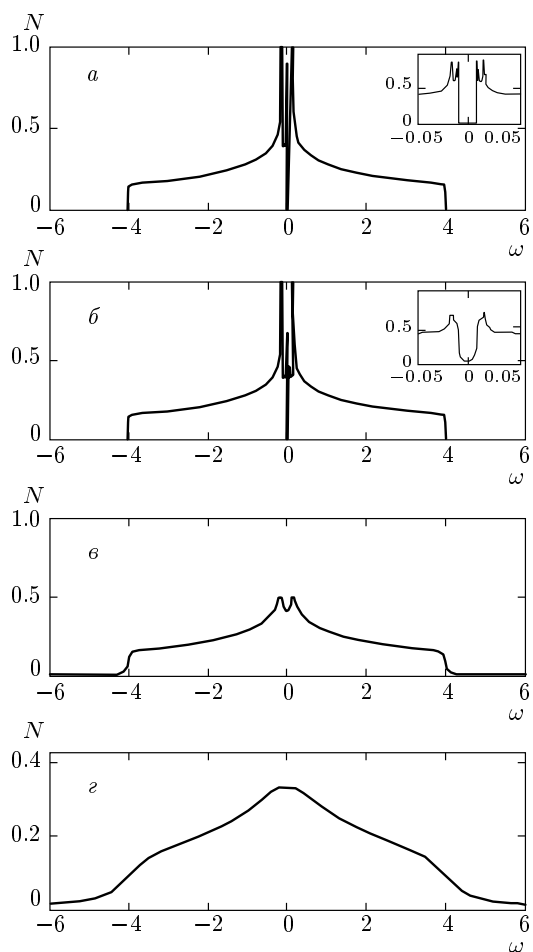


Рис. 8. Плотность состояний для $U = 0.5$, $f = 0.997$ при температуре $T = \delta = 0.0001$ (а), 0.001 (б), 0.05 (в), 0.5 (г)

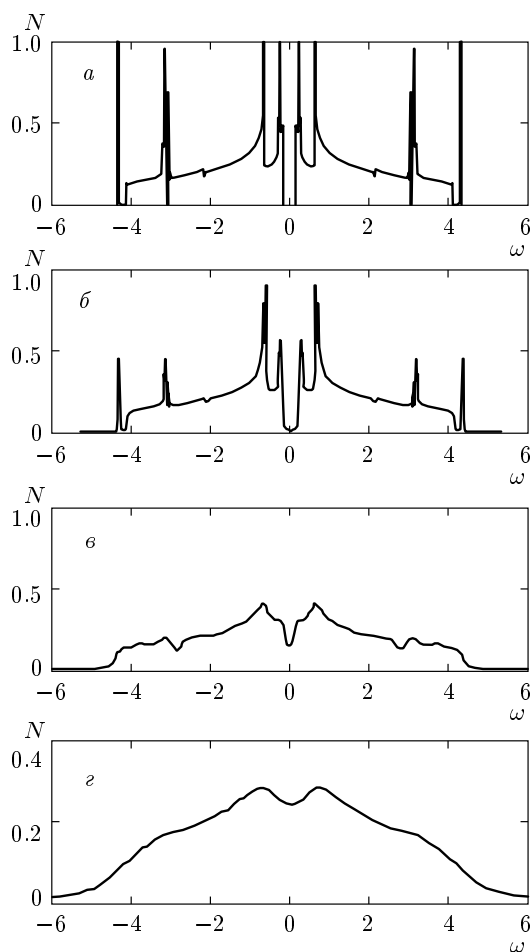


Рис. 9. Плотность состояний для $U = 2$, $f = 0.997$ при температуре $T = \delta = 0.0001$ (а), 0.01 (б), 0.1 (в), 0.5 (г)

температуре не надо забывать о возможности теплового заселения возбужденных состояний системы. В нашем подходе такое заселение можно учесть явно, принимая в расчет новые переходы с возбужденных уровней (см. рис. 2) с соответствующими факторами заполнения. Используя эту возможность, мы рассмотрели оба фактора одновременно, причем зависимость δ от температуры выбиралась прямо пропорциональная, $\delta = T$.

На рис. 8, 9 представлены две температурные эволюции плотности состояний соответственно при $U = 0.5$ и $U = 2$. Во-первых, обращает на себя внимание тот факт, что никакого узкого пика на уровне Ферми не обнаруживается во всем диапазоне температур, как то предсказывает теория динамического среднего поля (DMFT) вблизи перехода металл–диэлектрик. Наоборот, при низких температурах отчетливо проявляется щель, которая с ростом

температуры замазывается и при определенной температуре появляется широкий максимум (рис. 8). Как видно на рис. 9, при низких температурах в плотности состояний существует множество особенностей, которые при увеличении температуры пропадают и две зоны сливаются в одну. Это говорит о том, что состояние системы при определенной температуре испытывает переход металл–диэлектрик. Следует отметить, что в данном случае правильнее говорить о кроссовере из диэлектрика в металл, так как зарастание щели, имеющей место при нулевой температуре, происходит постепенно и плавно. Точное определение того, локализованы или делокализованы электронные состояния на уровне Ферми внутри псевдощели, выходит за рамки нашего приближения. Поэтому температура перехода определяется достаточно грубо как точка, в которой на уровне Ферми появляется достаточно заметная плотность

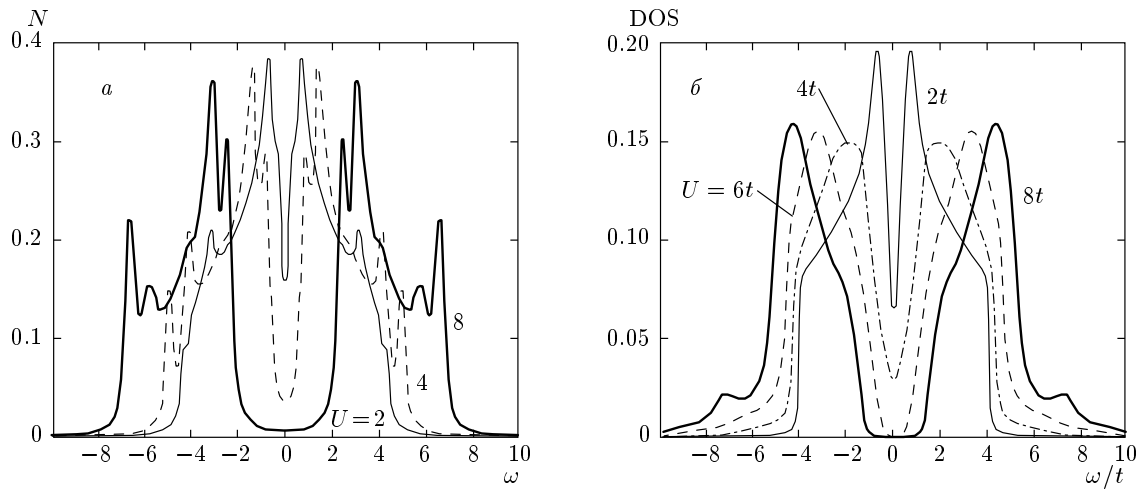


Рис. 10. Плотность состояний при $T = 0.15$ ($\delta = 0.15$, $f > 0.996$): a — наши вычисления, b — из работы [23]

состояний (такое определение использовалось в работе [22]). На рис. 7 представлена зависимость температуры этого перехода T^* от параметра кулоновского отталкивания U . Величина этой температуры перехода много меньше псевдощели в плотности состояний, формирующейся при конечных температурах. Аналогичное соотношение между щелью и температурой перехода металл-диэлектрик наблюдалось в работе [22].

Сравнение плотности состояний при конечной температуре с результатами работы [23], где авторы используют динамические поправки к функции Грина, показало хорошее согласие (рис. 10). Общая картина изменения ширины щели в зависимости от параметра U полностью совпадает, но в нашем случае из-за точного учета ближнего порядка в дисперсии зон проявляется больше особенностей в плотности состояний.

В работе [21] авторы применяют кластерный вариант динамической теории среднего поля (CDMFT-подход) к решению модели Хаббарда и получают плотности состояний для различных значений параметра U (рис. 11а). Причем они проводят расчет как для парамагнитного (рис. 11а, сплошная кривая), так и для антиферромагнитного (рис. 11а, штриховая кривая) случаев. Результаты наших вычислений (рис. 11а, б) достаточно хорошо согласуются с поведением плотности состояний для антиферромагнитного случая. Это еще раз подтверждает вывод о том, что именно ближний антиферромагнитный порядок определяет зонную структуру и плотности состояний в сильнокоррелированных системах.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленная кластерная теория возмущения для двумерной модели Хаббарда даже в простейшем случае половинного заполнения показала большие возможности и открывает перспективы дальнейшего исследования случая с допированием. Как показали расчеты, учет ближнего магнитного порядка играет очень важную роль в формировании зонной структуры сильнокоррелированных систем. Одним из преимуществ представленного подхода является возможность контроля правила сумм с помощью введенного f -фактора до начала вычисления полной функции Грина. Метод точной диагонализации кластера дает возможность учета такого количества возбужденных состояний, которое обеспечит выполнение этого правила с высокой степенью точности. Такая возможность отсутствует в случае использования точной диагонализации по Ланцошу, что является существенным недостатком этого подхода.

Вычисление спектральной функции позволило получить спектральные веса состояний и выявить теньевую зону, которая не проявляется в стандартных методах расчета зонной структуры. Не менее важным результатом работы является выявление щели в плотности состояний, которая существует при сколь угодно малых значениях параметра кулоновского отталкивания U . Вычисление спиновых корреляционных функций и сравнение плотности состояний с результатами других работ показало, что образование щели связано с существованием ближнего антиферромагнитного порядка.

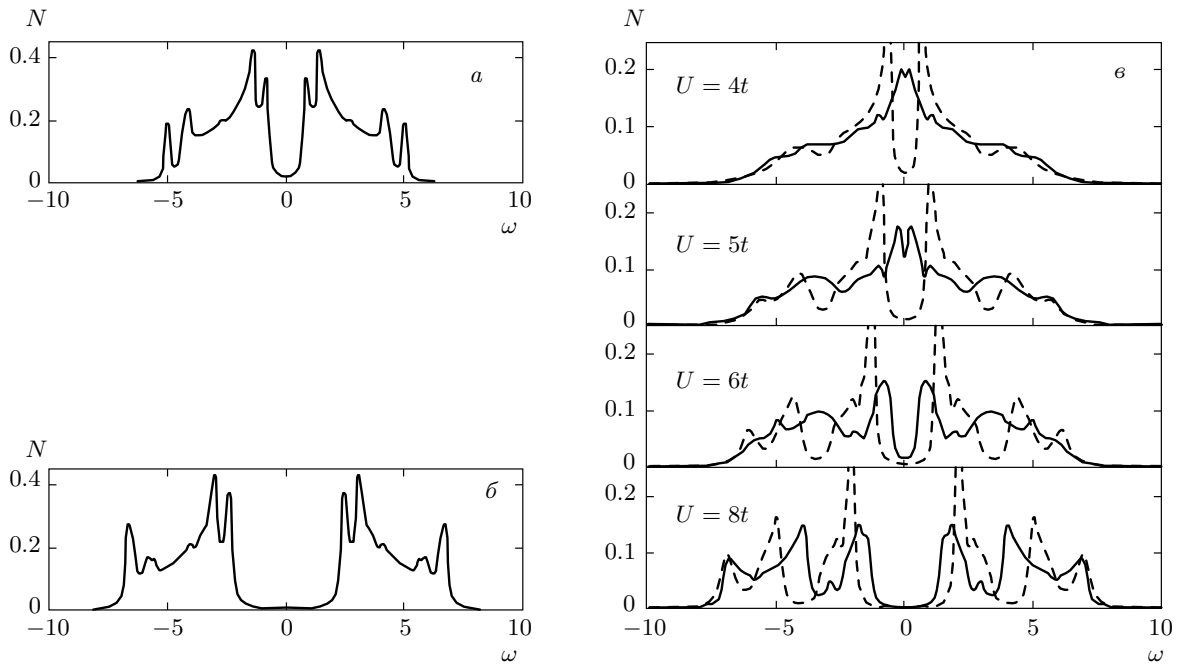


Рис. 11. Сравнение плотности состояний при $\delta = 0.1$ для $U = 4$, $f = 0.998$ (а) и $U = 8$, $f = 0.9995$ (б) с результатом из работы [21] (в). На рис. в штриховая кривая соответствует антиферромагнитному, сплошная кривая — парамагнитному решениям

Исследование зависимости плотности состояний от температуры показало, что никакого пика в плотности состояний на уровне Ферми не наблюдается, как это следует из расчетов, проведенных в рамках теории динамического среднего поля. Наши расчеты показывают, что переход металл–диэлектрик происходит непрерывным образом с изменением температуры. Показано наличие двух характерных масштабов энергий при конечных температурах, больший связан с формированием псевдощели в окрестности уровня Ферми, а меньший — с температурой перехода металл–диэлектрик.

Мы надеемся, что представленная кластерная теория возмущений при учете взаимодействия с большим числом ближайших соседей в случае ненулевого допирования поможет выявить фундаментальные особенности систем с сильными электронными корреляциями.

Авторы благодарят В. В. Валькова за полезные обсуждения данной работы. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 09-02-90723-моб_ст, 09-02 00127) и в рамках программы 5.7 Президиума РАН и интеграционного проекта 40 СО РАН–УрО РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Hubbard, J. Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).
2. W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
3. A. Georges and G. Kotliar, Phys. Rev. B **45**, 6479 (1992).
4. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
5. T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, Rev. Mod. Phys. **77**, 1027 (2005).
6. А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, А. В. Михеенков, ФТТ **30**, 2518 (1988).
7. A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, and A. V. Mikheyenkov, J. Phys.: Cond. Matt. **1**, 10143 (1989).
8. S. G. Ovchinnikov and I. S. Sandalov, Physica C **161**, 607 (1989).
9. G. Kotliar, S. Y. Savrasov, G. Pallson, and G. Biroli, Phys. Rev. Lett. **87**, 186401 (2001).
10. M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell et al., Phys. Rev. B **58**, R7475 (1998).

11. D. Senechal, D. Perez, and M. Piogo-Ladriere, Phys. Rev. Lett. **84**, 522 (2000).
12. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, Г. А. Петраковский, ЖЭТФ **129**, 268 (2006).
13. C. Lanczos, J. Res. Nat. Bur. Stand. **45**, 255 (1950).
14. J. Jaklic and P. Prelovsek, Phys. Rev. B **49**, 5065 (1994).
15. D. Senechal, D. Perez, and D. Plouffe, Phys. Rev. B **66**, 075129 (2002).
16. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильнокоррелированных системах*, изд-во СО РАН, Новосибирск (2001), с. 277.
17. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
18. Р. О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма*, изд-во УРСС, Москва (2004), с. 175.
19. Д. Н. Зубарев, УФН **71**, 71 (1960).
20. Y. Z. Zhang and M. Imada, Phys. Rev. B **76**, 045108 (2007).
21. B. Kyung, S. S. Kancharla, D. Senechal et al., Phys. Rev. B **73**, 165114 (2006).
22. S. Moukouri and M. Jarrell, Phys. Rev. Lett. **87**, 167010 (2001).
23. T. D. Stanescu and P. Phillips, Phys. Rev. B **64**, 235117 (2001).