

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА И ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ–ДИЭЛЕКТРИК В ПРЕДЕЛЕ СИЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

В. Ю. Ирхин, А. В. Зарубин*

*Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия*

Статья написана по материалам доклада
на 36-м Совещании по физике низких температур
(Санкт-Петербург, 2–6 июля 2012 г.)

С помощью метода многоэлектронных операторов вычислена функция Грина в парамагнитной фазе модели Хаббарда с сильными электронными корреляциями. Рассмотрена картина плотности состояний в ситуации половинного заполнения (переход металл–диэлектрик) и в легированном случае. Исследовано влияние на энергетический спектр низкотемпературного кондовского рассеяния, проведено сравнение с результатами динамической теории среднего поля.

DOI: 10.7868/S0044451013050224

1. ВВЕДЕНИЕ

Для систем с частично заполненными d - и f -оболочками типичен ряд аномальных физических свойств, обусловленных многоэлектронными эффектами (сильным кулоновским взаимодействием). К числу таких явлений относятся переход металл–диэлектрик Мотта–Хаббарда и формирование состояний с большой эффективной массой электрона в решетках Кондо и системах с тяжелыми фермионами. Для подобных систем характерны различные фазовые превращения с участием сверхпроводящей, магнитоупорядоченной и других фаз, а также переходы между локализованными и делокализованными состояниями носителей тока и магнитных моментов.

Первые работы Хаббарда [1] позволили описать переход металл–диэлектрик на языке формирования корреляционных подзон с большим затуханием. В дальнейшем эти подходы были обобщены с использованием метода многоэлектронных операторов [2–4]. К сожалению, в этих работах не был учтен вклад фермиевских возбуждений. Как выяснилось при дальнейшем развитии теории, в частности в рамках динамической теории среднего поля (dynamic mean field theory (DMFT)), предел больших

размерностей пространства d), в описании моттовского перехода очень важную роль играет «однопримесный» эффект Кондо, обусловленный такими возбуждениями и приводящий к формированию когерентного кондовского пика в центре зоны. Этот пик должен проявляться в спектральных и электронных свойствах при низких температурах. В настоящей работе мы проведем систематическое исследование этой проблемы как в ситуации перехода металл–диэлектрик (половинное заполнение зоны), так и в легированном случае.

2. МОДЕЛЬ ХАББАРДА В МНОГОЭЛЕКТРОННОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

Запишем гамильтониан модели Хаббарда в многоэлектронном представлении X -операторов [5–7]

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} t_{\mathbf{k}} (X_{-\mathbf{k}}^{\sigma 0} + \sigma X_{-\mathbf{k}}^{2-\sigma}) (X_{\mathbf{k}}^{0\sigma} + \sigma X_{\mathbf{k}}^{-\sigma 2}) + U \sum_i X_i^{22}, \quad (1)$$

где $t_{\mathbf{k}}$ — зонный спектр, $X_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}$ — фурье-образы операторов Хаббарда. Последние являются обобщенными проекционными операторами $X_i^{\alpha\beta} = |i\alpha\rangle\langle i\beta|$ ($\alpha = 0, \sigma, 2$ — пустые, однократно и двукратно занятые состояния на узле); они связаны с одноэлектронными операторами соотношениями $c_{i\sigma}^\dagger = X_i^{\sigma 0} + \sigma X_i^{2-\sigma}$.

*E-mail: Valentin.Irkhin@imp.uran.ru

Рассмотрим одноэлектронную запаздывающую функцию Грина

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E = \langle\langle X_{\mathbf{k}}^{0\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E + \sigma \langle\langle X_{\mathbf{k}}^{-\sigma 2} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E, \quad \text{Im } E > 0. \quad (2)$$

Записывая пару уравнений движения для функций Грина в правой части выражения (2), находим формальное решение

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = G_{\mathbf{k}\sigma}^\circ(E) [1 + F_\sigma^\circ(E) \Gamma_{\mathbf{k}\sigma}(E)]. \quad (3)$$

Здесь функции Грина в приближении «Хаббард-I» выражаются через нулевой обратный локатор:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^\circ(E) = \frac{1}{F_\sigma^\circ(E) - t_{\mathbf{k}}}, \quad (4)$$

$$F_\sigma^\circ(E) = \frac{E(E - U)}{E - U(n_0 + n_\sigma)},$$

где $n_\alpha = \langle X_i^{\alpha\alpha} \rangle$,

$$\Gamma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{1}{E} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \langle\langle \delta(X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{00} + X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\sigma\sigma}) c_{\mathbf{q}\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E + \frac{1}{E - U} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \langle\langle \delta(X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma-\sigma} + X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{22}) c_{\mathbf{q}\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E + \left(\frac{1}{E} - \frac{1}{E - U} \right) \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \langle\langle X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma} c_{\mathbf{q}-\sigma} + \sigma c_{\mathbf{q}-\sigma}^\dagger X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{02} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E, \quad (5)$$

$\delta A = A - \langle A \rangle$ — флуктуирующая часть оператора. Выполнив расщепление в уравнениях для функции $\Gamma_{\mathbf{k}\sigma}(E)$, получаем замкнутую систему уравнений для функций Грина, содержащую спиновые и зарядовые корреляционные функции:

$$\chi_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} = \langle S_{\mathbf{q}}^\sigma S_{-\mathbf{q}}^{-\sigma} \rangle, \quad \kappa_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} = \langle \rho_{\mathbf{q}}^\sigma \rho_{-\mathbf{q}}^{-\sigma} \rangle, \quad (6)$$

$$\lambda_{\mathbf{q}}^\sigma = \langle \delta(\sigma S_{\mathbf{q}}^z - \rho_{\mathbf{q}}^z) \delta(\sigma S_{-\mathbf{q}}^z - \rho_{-\mathbf{q}}^z) \rangle,$$

$$S_{\mathbf{q}}^\sigma = X_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma}, \quad S_{\mathbf{q}}^z = \frac{1}{2}(X_{\mathbf{q}}^{++} - X_{\mathbf{q}}^{--}), \quad (7)$$

$$\rho_{\mathbf{q}}^+ = X_{\mathbf{q}}^{20}, \quad \rho_{\mathbf{q}}^z = \frac{1}{2}(X_{\mathbf{q}}^{22} - X_{\mathbf{q}}^{00}).$$

Корреляционные функции возбуждений бозевского типа, вообще говоря, должны находиться самосогласованно — через соответствующие функции Грина. Далее мы используем локальное приближение, заменяя корреляторы средними по импульсу значениями на узле:

$$\chi_{\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma} = n_\sigma, \quad \kappa_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} = n_2, \quad \lambda_{\mathbf{q}}^\sigma = (n_0 + n_\sigma)(n_{-\sigma} + n_2).$$

Подчеркнем, что, в отличие от локального приближения «Хаббард-III» [1], такой подход позволяет учесть спиновые и зарядовые флуктуации и фермиевские возбуждения, ответственные за эффект Кондо. Самосогласованные выражения для одноэлектронных функций Грина получаются после замены функций Грина в приближении «Хаббард-I» (4), возникающих в резольвентах, на точные. В дальнейшем рассматривается парамагнитный случай, когда $n_\sigma = 1 - n_0 - n/2$.

3. ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК

Переход металл-диэлектрик имеет место в ситуации половинного заполнения, когда концентрация электронов на узел $n = 1$, так что выражения (4) принимают симметричный (относительно половинного заполнения зоны) вид

$$G_{\mathbf{k}}^\circ(E) = \frac{1}{F^\circ(E) - t_{\mathbf{k}}}, \quad F^\circ(E) = E - \frac{U^2}{4E}.$$

В этом случае в локаторном представлении имеем

$$G_{\mathbf{k}}(E) = \frac{1}{F(E) - t_{\mathbf{k}}}, \quad F(E) = \frac{b(E)}{a(E)}, \quad (8)$$

$$a(E) = 1 + \frac{3U^2}{4E^2} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}(E) + \frac{2U}{E} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}(E), \quad (9)$$

$$b(E) = F^\circ(E) + \frac{2U}{E} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}}^2 n_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}(E), \quad (10)$$

где $n_{\mathbf{k}}$ — одночастичные числа заполнения, которые выражаются через функции Грина (8) с помощью спектрального представления. Эти выражения позволяют описать «кондовский» центральный пик благодаря наличию членов с числами заполнения одночастичных возбуждений фермиевского типа $n_{\mathbf{k}}$, описывающих многоэлектронное рассеяние.

Для рассмотрения проблемы перехода металл-диэлектрик исследуем эволюцию одночастичной плотности состояний

$$N(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}(E) \quad (11)$$

при увеличении параметра U .

Численные расчеты были выполнены для квадратной и двух кубических решеток с симметричными плотностями состояний. Также были проведены

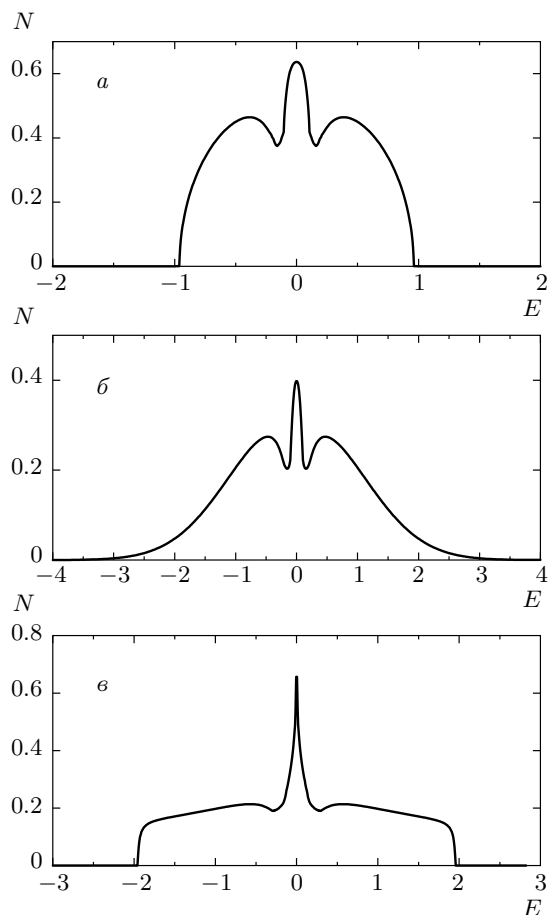


Рис. 1. Плотность состояний для полуэллиптической зоны с $U = 0.2W$ (а), гауссовой зоны (предел $d \rightarrow \infty$) (б) и квадратной решетки (в)

вычисления для решетки Бете, т. е. модельной полуэллиптической затравочной зоны

$$N_0(E) = \frac{4}{\pi W} \sqrt{1 - \left(\frac{2E}{W}\right)^2}$$

(W — затравочная ширина зоны), прямоугольной плотности состояний и гауссиана, который соответствует гиперкубической решетке в пределе больших d ; в последнем случае параметр W определяется из второго момента функции плотности состояний:

$$W = 4\sqrt{\mu_2}, \quad \mu_2 = \int E^2 N(E) dE.$$

Картина плотности состояний в металлическом состоянии для трех решеток показана на рис. 1 (для квадратной решетки (рис. 1в) ситуация несколько усложнена вследствие особенности Ван Хова в центре полосы). Трехпиковая структура плотности состояний формируется при малых U и размывается

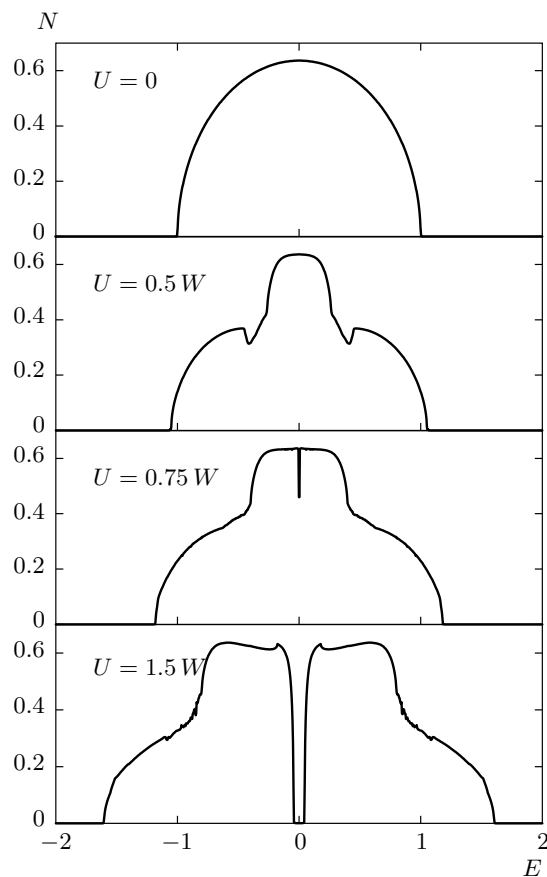


Рис. 2. Картина перехода металл–диэлектрик для полуэллиптической затравочной зоны

при приближении к переходу металл–диэлектрик: центральный пик становится широким и появляется псевдощель (рис. 2). Критические значения U_C кулоновского отталкивания для перехода металл–диэлектрик составляют во всех трех случаях $1.06W$ [8].

Детали нашей картины перехода металл–диэлектрик отличны от картины, полученной с помощью DMFT, где центральный квазичастичный пик постепенно сужается, но не становится ниже при увеличении U и исчезает при $U \rightarrow U_C - 0$ [9–14]. Возникновение в таких расчетах высокого и узкого пика (в том числе не слишком близко к U_C) является, вероятно, нефизическим.

С другой стороны, в нашем методе, вероятно, имеет место переоценка роли затухания. Последовательная трактовка затухания является трудной проблемой. Чтобы обойти эту трудность, большинство вычислений в рамках DMFT и квантового метода Монте-Карло в случае больших d выполняется при конечных температурах.

Отметим, что расчеты квантовым методом Монте-Карло дают результаты, различающиеся для разных решеток (квадратной, кубической и для больших d), и демонстрируют формирование более широкого пика в центре зоны, чем дает DMFT. В этих вычислениях (см., например, работы [15–21]) в металлической фазе вблизи перехода металл–диэлектрик может развиваться псевдощель, как и в нашем расчете.

Специфика проблемы связана с тем, что вблизи перехода металл–диэлектрик отсутствует малый энергетический масштаб, обеспечивающий экспоненциально малую ширину пика (резонанса Абрикосова–Сула) в обычной проблеме Кондо. Следует также отметить, что структура выражения (8) свидетельствует об определенной симметрии спектральных вкладов хаббардовских подзон и «кондовского» пика, обусловленной динамической суперсимметрией алгебры X -операторов (возбуждений бозевского и фермиевского типа) [22]. Поэтому представляется вероятным, что мощность центрального пика в модели Хаббарда недооценивается в DMFT и должна быть достаточно велика.

4. КОНДОВСКИЕ ОСОБЕННОСТИ В ДОПИРОВАННОЙ СИСТЕМЕ

В «несимметричном» легированном случае (при отклонении от половинного заполнения, т. е. при допировании системы) уравнения для функции Грина имеют гораздо более сложный вид. Случай ферромагнитного упорядочения был рассмотрен в работе [23]. В парамагнитном случае соответствующие выражения существенно упрощаются и принимают вид ($\eta = 1 - n/2$)

$$G_{\mathbf{k}}^{\circ}(E) = \frac{1}{F^{\circ}(E) - t_{\mathbf{k}}}, \quad F^{\circ}(E) = \frac{E(E - U)}{E - \eta U}, \quad (12)$$

$$G_{\mathbf{k}}(E) = \frac{1}{F(E) - t_{\mathbf{k}}}, \quad F(E) = \frac{b(E)}{a(E)}, \quad (13)$$

$$a(E) = 1 + \frac{(1 - \eta^2)U^2}{(E - \eta U)^2} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}^{\circ}(E) + \frac{(2E - U)U}{(E - \eta U)^2} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}^{\circ}(E), \quad (14)$$

$$b(E) = F^{\circ}(E) + \frac{(2E - U)U}{(E - \eta U)^2} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}}^2 n_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}^{\circ}(E). \quad (15)$$

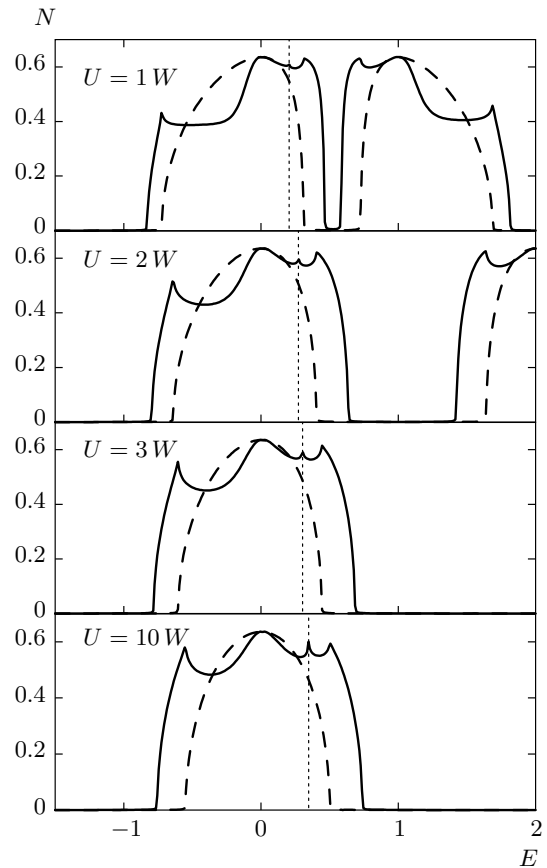


Рис. 3. Эволюция плотности состояний в допированном случае ($n_0 = 0.05$) в несамосогласованном приближении для полуэллиптической затравочной зоны (вертикальные прямые соответствуют химическому потенциалу)

Здесь мы снова использовали для корреляторов локальное приближение, заменяя их одноузельными значениями, определенными из правила сумм для корреляторов,

$$\chi_{\mathbf{q}} = 1 - \frac{n}{2} - n_0, \quad \kappa_{\mathbf{q}} = n + n_0 - 1,$$

$$\lambda_{\mathbf{q}} = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{n}{2}.$$

Результаты расчета в несамосогласованном приближении (13) показаны на рис. 3. При этом химический потенциал (вертикальные линии на рисунке) определяется в приближении «Хаббард-I» (4), что обеспечивает совпадение кондовской сингулярности с уровнем Ферми для дырок. Дефектом несамосогласованного приближения является появление «ложных» сингулярностей на границах зон приближения «Хаббард-I», а также переоценка энергетической ще-

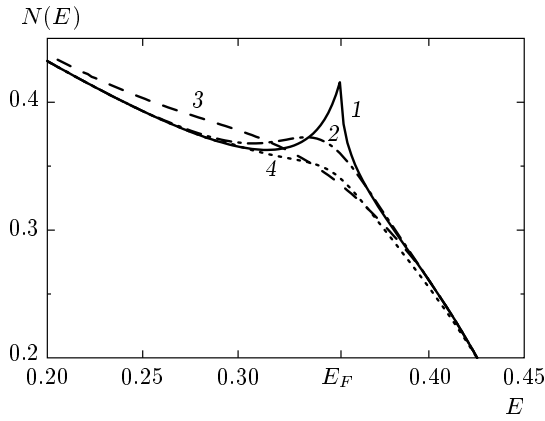


Рис. 4. Фрагмент зависимости плотности состояний для полуэллиптической зоны при $U \rightarrow \infty$ и концентрации носителей $n_0 = 0.05$ в самосогласованном приближении. Линии 1, 2, 3 соответствуют температурам $T = 0, 0.01, 0.03$ в единицах W без учета спиновой динамики, а линия 4 — нулевой температуре, но с учетом спиновой динамики с частотой $\omega_{max} = 0.257n_0$, соответствующей приближению Нагаока [25]

ли, особенно при малых U [8]. Эти недостатки устраняются в самосогласованном приближении.

Самосогласование выполняется заменой $G_{\mathbf{q}}^{\circ}(E) \rightarrow G_{\mathbf{q}}(E)$ в выражениях (14) и (15). При этом уравнение для химического потенциала имеет вид

$$n_0 = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int \text{Im} G_{\mathbf{k}}(E) f(E) dE. \quad (16)$$

Соответствующие результаты представлены на рис. 4. Как мы видим, в случае сильного кулоновского взаимодействия кондовский пик действительно может быть узким, хотя несколько размывается спиновой динамикой (которая может быть учтена введением динамических корреляционных функций, усредненных по волновому вектору [24]) и существенно уширяется при росте температуры (рис. 4). Отметим, что в пределе $U \rightarrow \infty$ модель Хаббарда эквивалентна (с заменой $t_{\mathbf{k}} \rightarrow t_{\mathbf{k}}/2$) s - d -обменной модели, в рамках которой обычно рассматривается эффект Кондо [3].

Ранее электронные состояния в допированном моттовском изоляторе рассматривались в рамках DMFT (предел больших d) с помощью точной диагонализации [26], обобщенной итеративной теории возмущения и квантового метода Монте-Карло [27, 28]. Отметим, что в ряде работ (см., например, [29, 30]) были получены состояния в энергетической щели

(mid-gap states). Теоретическое описание таких состояний требует более корректного рассмотрения спиновой динамики, лишь грубо учитываемой в нашем подходе, что является задачей для дальнейших исследований.

Таким образом, наше рассмотрение позволяет предсказать появление кондовских аномалий в спектре и в низкотемпературных электронных свойствах систем с сильными кулоновскими корреляциями. При этом мы непосредственно используем модель Хаббарда, не переходя к вспомогательной модели Андерсона, как это делается в подходе DMFT.

Авторы благодарят А. О. Анохина и К. А. Кирина за полезные обсуждения. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке УрО РАН «Сильнокоррелированные электроны в твердых телах» (грант № 12-Т-2-1001), Президиума РАН «Квантовые мезоскопические и неупорядоченные структуры» (грант № 12-П-2-1041), РФФИ (гранты №№ 11-02-00931-а, 11-02-00937-а).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A **281**, 401 (1964).
2. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **75**, 2362 (1978).
3. А. О. Анохин, V. Yu. Irkhin, and M. I. Katsnelson, J. Phys.: Condens. Matter. **3**, 1475 (1991).
4. Ю. А. Изюмов, В. И. Анисимов, *Электронная структура соединений с сильными корреляциями*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Москва-Ижевск (2009).
5. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A **285**, 542 (1965).
6. V. Yu. Irkhin and Yu. P. Irkhin, Phys. Stat. Sol. (b) **183**, 9 (1994).
7. В. Ю. Ирхин, Ю. П. Ирхин, *Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d- и f-металлах и их соединениях*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Москва-Ижевск (2008).
8. V. Yu. Irkhin and A. V. Zarubin, Eur. Phys. J. B **38**, 563 (2004).
9. A. Georges and G. Kotliar, Phys. Rev. B **45**, 6479 (1992).

10. X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg, and G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1666 (1993).
11. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
12. Ю. А. Изюмов, УФН **165**, 403 (1995); Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, УФН **178**, 25 (2008).
13. R. Bulla, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 136 (1999).
14. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **133**, 670 (2008).
15. M. Jarrell and Th. Pruschke, *Z. Phys. B* **90**, 187 (1993).
16. M. Jarrell, Th. Maier, C. Huscroft, and S. Moukouri, *Phys. Rev. B* **64**, 195130 (2001).
17. S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, and N. E. Bickers, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1523 (1989).
18. M. S. Laad, L. Craco, and E. Müller-Hartmann, *Phys. Rev. B* **64**, 195114 (2001).
19. A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein, *Phys. Rev. B* **77**, 033101 (2008).
20. H. Hafermann, G. Li, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, and H. Monien, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 206401 (2009).
21. E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 349 (2011).
22. K. Kikoin, M. Kiselev, and Y. Avishai, *Dynamical Symmetries for Nanostructures: Implicit Symmetries in Single-Electron Transport Through Real and Artificial Molecules*, Springer (2012).
23. А. В. Зарубин, В. Ю. Ирхин, *ЖЭТФ* **141**, 976 (2012).
24. V. Yu. Irkhin and A. V. Zarubin, *Eur. Phys. J. B* **16**, 463 (2000).
25. Y. Nagaoka, *Phys. Rev.* **147**, 392 (1966).
26. M. Caffarel and W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1545 (1994).
27. Th. Pruschke, D. L. Cox, and M. Jarrell, *Phys. Rev. B* **47**, 3553 (1993).
28. M. Jarrell, J. K. Freericks, and Th. Pruschke, *Phys. Rev. B* **51**, 11704 (1995).
29. D. S. Fischer, G. Kotliar, and G. Moeller, *Phys. Rev. B* **52**, 17112 (1995).
30. H. Kajueter, G. Kotliar, and G. Moeller, *Phys. Rev. B* **53**, 16214 (1996).