

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ МОДЕЛИ ХАББАРДА В СЛУЧАЕ ПОЛОВИННОГО ЗАПОЛНЕНИЯ

С.Г. Овчинников, Е.И. Шнейдер*

В модели Хаббарда для решетки с антиферромагнитным упорядочением спинов вычислены спектральные функции и плотность состояний в приближении Хаббард-I. Результаты сопоставлены с данными, полученными численно точным методом квантового Монте-Карло [1]. Также показано, что дисперсия антиферромагнитного состояния имеет вид закона дисперсии для волны спиновой плотности.

Модель Хаббарда, учитывающая движение электронов в твёрдом теле наряду с межэлектронным взаимодействием, является одной из базовых в теории систем с сильными электронными корреляциями (СЭК). Дело в том, что, несмотря на недостаточность модели для правильного количественного описания конкретных веществ, она содержит [2] в себе важные эффекты систем с СЭК. Определённый интерес представляет исследование приближений в атомном пределе, т.к. известно, что такие системы проще описать, стартуя из локального подхода, а не из хартри-фоковской теории зонного предела [3]. В настоящей работе спектральные функции $A(\vec{k}, \omega)$, рассчитанные в режиме сильных электронных корреляций для двумерной модели Хаббарда в приближении Хаббард-I с антиферромагнитным основным состоянием, сопоставлены с данными численно точного метода квантового Монте-Карло (КМК).

Сравнение электронных свойств модели в различных решениях показывает, что найденные спектральные функции находятся в разумном согласии с функциями, полученными методом КМК, несмотря на все недостатки принятого приближения. Перечислим эти недостатки.

1) Согласно теореме Мермина-Вагнера не существует дальнего антиферромагнитного порядка в двумерной системе при конечных температурах, т.о. мы должны предположить некоторую анизотропию или межплоскостное взаимодействие. Тем не менее, рассмотренное приближение допустимо, т.к. мы сравниваем наши результаты с данными для конечных систем КМК, где вышеупомянутая теорема не применима.

2) Приближение Хаббард-I не даёт самосогласованного описания антиферромагнитного состояния: существует только равное нулю решение для намагниченности подрешетки m . Поэтому в пределе $t \ll U$ для системы с $n_e = 1$ мы строим эффективный гамильтониан Гейзенберга с константой антиферромагнитного взаимодействия $J = 4t^2/U$ и рассчитываем намагниченность в модели Гейзенберга. При $T = 0$ величина m на 40% уменьшается от номинального значения вследствие нулевых квантовых флуктуаций и мы получаем $m = 0,3$.

Гамильтониан рассматриваемой модели может быть записан следующим образом:

$$\hat{H} - \mu \hat{N}_e = \sum_{f,\sigma} \left[(e - \mu) n_{f,\sigma} + \frac{1}{2} U n_{f,\sigma} n_{f,\bar{\sigma}} \right] + \sum_{f,g,\sigma} (t_{f,g} a_{f,\sigma}^+ a_{g,\sigma} + h.c.), \quad (1)$$

где $a_{f,\sigma}^+$ ($a_{f,\sigma}$) - оператор рождения (уничтожения) электрона на узле f со спином $\sigma = \pm 1/2$; $n_{f,\sigma} = a_{f,\sigma}^+ a_{f,\sigma}$ - число электронов на узле с заданной проекцией спина; e - одноэлектронная энергия в кристаллическом поле; μ - химпотенциал; U - внутриатомный матричный элемент отталкивания; $t_{f,g}$ - интеграл перескока между узлами f и g в приближении ближайших соседей.

Далее рассмотрено простейшее пространственно неоднородное решение приведенного гамильтониана для двумерной квадратной решетки с антиферромагнитным упорядочением спинов. (Антиферромагнитный порядок вблизи половинного заполнения обусловлен кинетическим суперобменом в системе.) Вследствие наличия двух подрешеток функция Грина [4] выглядит как:

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{N} \left(\begin{array}{cc} \sum_{f,f'} e^{i\vec{k}(\vec{f}-\vec{f}')} \langle\langle a_f | a_{f'}^+ \rangle\rangle & \sum_{f,g} e^{i\vec{k}(\vec{g}-\vec{f})} \langle\langle a_g | a_f^+ \rangle\rangle \\ \sum_{f,g} e^{i\vec{k}(\vec{f}-\vec{g})} \langle\langle a_f | a_g^+ \rangle\rangle & \sum_{g,g'} e^{i\vec{k}(\vec{g}-\vec{g}')} \langle\langle a_g | a_{g'}^+ \rangle\rangle \end{array} \right). \quad (2)$$

Аналитические выражения для функций Грина получены в известном приближении Хаббард-I, которому соответствует следующее расщепление средних [2]:

$$\langle\langle a_{f+h,\sigma} n_{f,\bar{\sigma}} | a_{f,\sigma}^+ \rangle\rangle \rightarrow \langle n_{f,\bar{\sigma}} \rangle \langle\langle a_{f+h,\sigma} | a_{f,\sigma}^+ \rangle\rangle. \quad (3)$$

В атомном пределе более удобным является представление операторов Хаббарда, с которыми обычные фермиевские операторы связаны линейной комбинацией:

$$a_{f\sigma}^+ = X_f^{\sigma,0} + 2\sigma X_f^{2,\bar{\sigma}}, \quad a_{f\sigma} = X_f^{0,\sigma} + 2\sigma X_f^{\bar{\sigma},2}. \quad (4)$$

Поэтому выражение для функций Грина запишем в новом представлении (А,В- межподрешёточные индексы):

$$\begin{aligned} G_{AA}^u &= \langle\langle X_A^{\bar{\sigma},2} | X_A^{2,\bar{\sigma}} \rangle\rangle = F_A^{\bar{\sigma},2} \left((E - \varepsilon_1)^2 (v + F_B^{\bar{\sigma},2} t) - F_A^{0,\sigma} t^2(\bar{k}) (E - \varepsilon_1 - F_B^{0,\sigma} U) \right) / \prod_{i=1}^4 (E - E_i), \\ G_{AB}^u &= \langle\langle X_A^{\bar{\sigma},2} | X_B^{2,\bar{\sigma}} \rangle\rangle = F_B^{\bar{\sigma},2} \left((E - \varepsilon_1)^2 (v + F_A^{\bar{\sigma},2} t) - F_B^{0,\sigma} t^2(\bar{k}) (E - \varepsilon_1 - F_A^{0,\sigma} U) \right) / \prod_{i=1}^4 (E - E_i), \\ G_{AA}^l &= \langle\langle X_A^{0,\sigma} | X_A^{\sigma,0} \rangle\rangle \\ &= F_A^{0,\sigma} \left((E - \varepsilon_1) \left[v^2 - F_A^{\bar{\sigma},2} F_B^{\bar{\sigma},2} t^2(\bar{k}) \right] + F_B^{0,\sigma} t(\bar{k}) \left[v^2 - F_A^{\bar{\sigma},2} t(\bar{k}) v \right] \right) / \prod_{i=1}^4 (E - E_i), \\ G_{AB}^l &= \langle\langle X_B^{0,\sigma} | X_A^{\sigma,0} \rangle\rangle \\ &= F_B^{0,\sigma} \left((E - \varepsilon_1) \left[v^2 - F_A^{\bar{\sigma},2} F_B^{\bar{\sigma},2} t^2(\bar{k}) \right] + F_A^{0,\sigma} t(\bar{k}) \left[v^2 - F_B^{\bar{\sigma},2} t(\bar{k}) v \right] \right) / \prod_{i=1}^4 (E - E_i), \end{aligned} \quad (5)$$

где введены обозначения: $F_A^{0,\sigma} = \langle X_A^{0,0} + X_A^{\sigma,\sigma} \rangle$, $F_A^{\bar{\sigma},2} = \langle X_A^{2,2} + X_A^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}} \rangle$ - факторы заполнения и $\varepsilon_1 = (\varepsilon - \mu)$, $v = (E - \varepsilon_1 - U)$, кроме того, индексы l и u относятся к нижней и верхней хаббардовским зонам соответственно. Полюса функций Грина, определяющие законы квазичастиц, являются решением следующего уравнения четвертого порядка:

$$\begin{aligned} E^4 + aE^3 + bE^2 + cE + d &= 0, \\ a &= -2(2\varepsilon_1 + U), \\ b &= (2\varepsilon_1 + U)^2 + 2\varepsilon_1(\varepsilon_1 + U) - t^2(\bar{k}), \\ c &= -2\varepsilon_1(\varepsilon_1 + U)(2\varepsilon_1 + U) + 2\varepsilon_1 t^2(\bar{k}) + Ut^2(\bar{k})(2 - n_f), \\ d &= \varepsilon_1^2(\varepsilon_1 + U)^2 - \varepsilon_1^2 t^2(\bar{k}) - Ut^2(\bar{k})(2\varepsilon_1 + U)(1 - n_{f,\sigma})(1 - n_{f,\bar{\sigma}}) - \varepsilon_1 Ut^2(\bar{k})(n_f - 2n_{f,\sigma}n_{f,\bar{\sigma}}). \end{aligned} \quad (6)$$

Далее мы ограничимся областью половинного заполнения, где выражение для химпотенциала известно [5] и является справедливым при любых значениях параметров модели и температуры $\mu = \varepsilon + U/2$. В этом случае уравнение (6) сводится к биквадратному, откуда сразу получаем спектр квазичастиц двумерной антиферромагнитной решетки при $n_e = 1$:

$$E_{\pm}^{l,u} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \left(t^2(\bar{k}) \pm \sqrt{t^4(\bar{k}) + 4U^2 t^2(\bar{k}) n_{f,\sigma} n_{f,\bar{\sigma}} - 2\varepsilon_1(\varepsilon_1 + U)} \right)^{1/2}. \quad (7)$$

Интересно заметить, что квазичастичный спектр (7) может быть переписан через хорошо известное решение для парамагнитной фазы. При этом оказывается, что найденное решение имеет вид закона дисперсии для волны спиновой плотности:

$$E_{\pm}^{l,u} = \pm \sqrt{(\xi_{\bar{k}}^{\pm})^2 + \Delta^2}, \quad (8)$$

где $\Delta = Um$ - параметр щели; $m = 1/2(n_{f,\sigma} - n_{f,\bar{\sigma}})$ - намагнитченность подрешетки; $\xi_{\bar{k}}^{\pm}$ - соответствует дисперсии верхней и нижней хаббардовских зон в парамагнитной фазе с перенормированной величиной параметра кулоновского отталкивания $\tilde{U} = U\sqrt{1 - 4m^2}$:

$$\xi_{\bar{k}}^{\pm} = \frac{1}{2} \left(t(\bar{k}) \pm \sqrt{t^2(\bar{k}) + U^2} \right). \quad (9)$$

Теперь мы можем рассчитать суммарную спектральную функцию системы, определяемую как сумму мнимых частей функций Грина (5):

$$\begin{aligned}
 A(\vec{k}, \omega) &= -\frac{1}{\pi} \mathcal{S}_p(\text{Im} G(\vec{k}, \omega)) = \\
 &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(G_{AA}^l(\vec{k}, \omega) + G_{AB}^l(\vec{k}, \omega) + G_{AA}^u(\vec{k}, \omega) + G_{AB}^u(\vec{k}, \omega) \right)
 \end{aligned} \tag{10}$$

и одноэлектронную плотность состояний:

$$N(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}, \omega). \tag{11}$$

Принятое приближение не содержит никакой информации о ширине спектральных линий (в выражение для спектральной плотности входят обычные дельта-функции). Для сопоставления результатов с данными, полученными численным методом КМК, аппроксимируем дельта-функции лоренцианом с наиболее подходящим параметром δ . Такая перенормировка ширины и веса спектральных линий квазичастиц отвечает некоторой ненулевой мнимой части величины собственной энергии $\Sigma(\vec{k}, \omega)$ и означает феноменологический выход за рамки принятого ранее приближения Хаббард-I.

Необходимо отметить, что между параметром δ и температурой нет однозначного соответствия, однако при уменьшении температуры этот параметр также стремится к нулю. И несмотря на то, что теорема Мермина-Вагнера запрещает существование антиферромагнитного упорядочения в двумерной системе при конечных температурах, обычно полагают, что система «эффективно упорядочена», если спиновая корреляционная длина становится сравнимой с размерами системы.

Найденные спектральные функции и плотность состояний представлены на рисунках 1-3 одновременно с данными численно-точных расчетов методом КМК [1,6]. При этом использованы следующие значения параметров системы: $U = 8t$, $\epsilon - \mu + U = 0$ и $t(\vec{k}) = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y))$; в области низких температур мы полагаем, что параметр m намагниченности подрешетки равен 0,3.

При высоких температурах (рис. 1) приближение Хаббард-I достаточно хорошо воспроизводит положение и вес спектральных пиков, соответствующих верхней и нижней хаббардовским зонам. Это объясняется тем, что выше температуры Нееля роль эффектов спиновых корреляций (не учтенных в данном приближении) становится незначительной.

При температуре $T = 1,00t$ данные КМК [1] обнаруживают очень слабые сателлиты для незанятого состояния в точке $k = (0,0)$ и для заполненного в точке $k = (\pi, \pi)$. Эти сателлиты соответствуют рассчитанным E_+^u and E_-^l зонам с весьма малым спектральным весом.

При средних и низких температурах (рис.2) каждая хаббардовская зона парамагнитного состояния расщепляется на две подзоны $E_{1,2}^{l,u}$. При этом одна из подзон имеет наибольший спектральный вес, другая выглядит как слабый сателлит. Нетривиальным результатом, полученным как в методе КМК, так и в приближении Хаббард-I, является перераспределение спектрального веса между сильными и слабыми пиками. В то время как тенденции перераспределения спектрального веса в наших и КМК расчетах сохраняются, в некоторых областях зоны Бриллюэна (вблизи $\vec{k} = (0,0)$ и $\vec{k} = (\pi, \pi)$) наблюдается разумное согласие в форме и расположении пиков $A(\vec{k}, \omega)$,

в других же областях k -пространства ($\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ и $\vec{k} = (\pi, 0)$) имеется существенное отличие между данными КМК и Хаббард-I.

Одноэлектронная плотность состояний (рис.3) при низких температурах показывает два пика, соответствующих занятой (l) и незаполненной (u) хаббардовским зонам. Слабые сателлиты в спектральной плотности приводят к образованию плечей у обоих пиков. Данные рассмотренного приближения и метода КМК [6] находятся в качественном согласии.

Таким образом, можно сделать следующие выводы. При низких температурах спектральная функция модели Хаббарда в приближении Хаббард-I, так же как и в численно точных расчетах КМК, состоит из четырех пиков, соответствующих антиферромагнитным хаббардовским подзонам. Рассмотренное приближение сохраняет основные тенденции перераспределения спектрального веса, в то же время в некоторых областях k -пространства имеется качественное несогласие. Плотность состояний в решении Хаббард-I соответствует данным КМК.

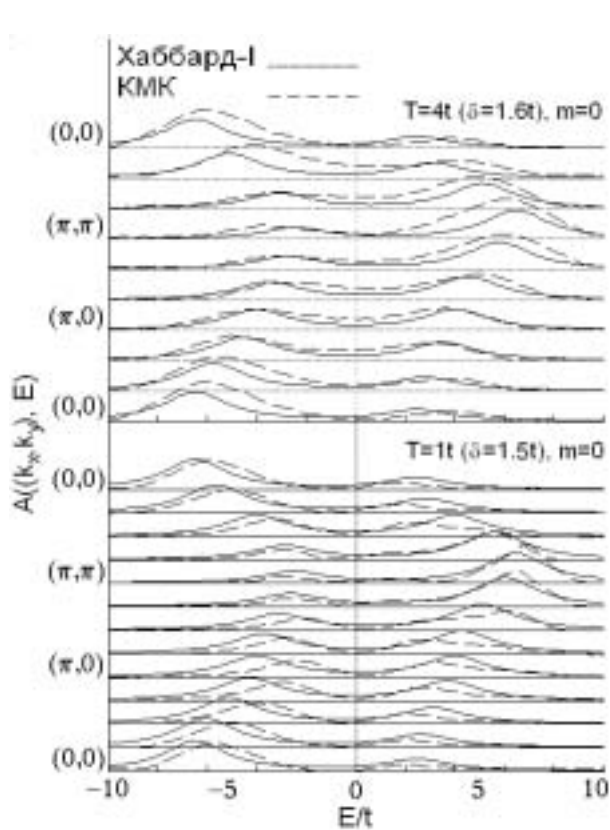


Рис. 1. Спектральные функции модели Хаббарда при высоких температурах (КМК [1] и Хаббард-1)

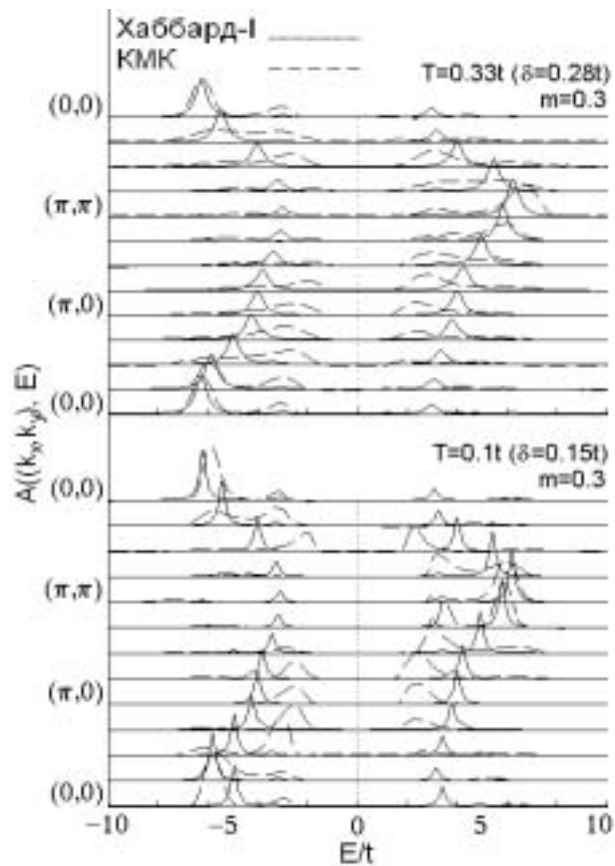


Рис. 2. Спектральные функции модели Хаббарда при низких температурах (КМК [1] и Хаббард-1)

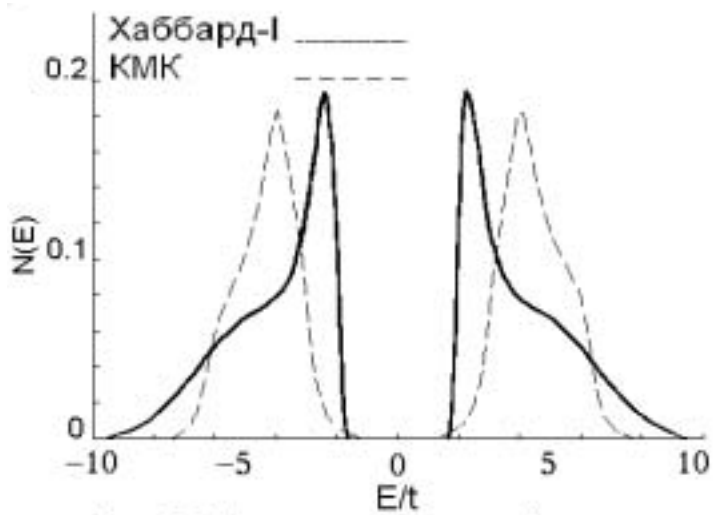


Рис. 3. Плотность состояний в модели Хаббарда (КМК и Хаббард-1)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Grober C., Eder R., Hanke W., Phys. Rev. B 62, 4336, (2000).
2. Hubbard J., Proc. R. Soc. London, Ser. A 276, 238 (1963).
3. Квазичастицы в сильно коррелированных системах / В.В. Вальков, С.Г. Овчинников. - Новосибирск.: Изд-во СО РАН, 2001. - 277 с.
4. Методы квантовой теории магнетизма / С.В. Тябликов,- М.: Наука, 1975, - 528 с.
5. Castellani C., Di Castro C., Feinberg D., Ranniger J. Phys. Rev. Lett. 26, 1957 (1979).
6. Bulut N., Scalapino D.J., White S.R., Phys. Rev. Let. 73, 748 (1994).

**ELECTRON SPECTRAL DENSITY OF THE HALF-FILLED HUBBARD MODEL
IN THE ATOMIC LIMIT AT FINITE TEMPERATURE**

C.G. Ovchinnikov, E.I. Shnaider

We have calculated the spectral function and density of states of half-filled two-dimensional Hubbard model in the Hubbard-I approximation assuming an antiferromagnetic long range order at low temperature and compared results to the QMC data. It occurs that calculated functions are in a qualitative agreement with the QMC one. We have also shown that Neel ordered state dispersion has the similar form to the spin density wave one.