

УДК 53.01, 538.955, 538.915

Кластерная теория возмущений для модели Хаббарда: пиннинг химического потенциала

Сергей В. Николаев*

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Мира, 55а, Омск, 644077,
Россия

Сергей Г. Овчинников†

Сибирский федеральный университет,
Свободный, 79, Красноярск, 660041,
Россия

Получена 18.07.2010, окончательный вариант 25.10.2010, принята к печати 10.12.2010

В настоящей работе проводится исследование однозонной двумерной модели Хаббарда в рамках кластерной теории возмущений. Рассмотрение ограничено приближением ближайших соседей. Первоначальная двумерная квадратная решетка разбивается на кластеры 2×2 , образующие квадратную сверхрешетку. Методом точной диагонализации определяется полный набор собственных векторов и собственных значений отдельного кластера. На этом базисе проводится построение X -операторов, через которые переопределяется гамильтониан задачи. В приближении Хаббард-I вычисляется спектральная функция, позволяющая исследовать распределение спектрального веса квазичастиц в хаббардовских подзонах. Исследовано влияние внутрищелевых состояний на пиннинг химического потенциала при малых концентрациях дырок.

Ключевые слова: кластерная теория возмущений, модель Хаббарда, сильные электронные корреляции, точная диагонализация, X -операторы, плотность состояний.

Введение

На протяжении двух десятилетий при исследовании систем с сильными электронными корреляциями большое внимание уделяется кластерному подходу [1–6]. В последнее время особенно выделяются работы, в которых используется кластерное обобщение динамической теории среднего поля (CDMFT) [7–9]. Основная причина популярности всех кластерных теорий заключена в сущности самого метода. В рамках стандартных подходов учет пространственных корреляций без использования искусственных теоретических надстроек невозможен. Использование же кластерного подхода позволяет непосредственно учесть ближний порядок, который играет существенную роль в определении как нормальных, так и сверхпроводящих свойств систем с сильными электронными корреляциями. Рассмотрим общую схему всех кластерных теорий [10]. Основным этапом кластерного подхода является выделение из первоначальной решетки определенного кластера. Причем желательно осуществлять этот выбор, учитывая точечную группу симметрии и число ближайших соседей в соответствующих координационных сферах изначальной решетки. Но, как часто бывает, существуют различные отступления от этих правил в частных случаях. На следующем

*25sergeyn@mail.ru

†sgo@iph.krasn.ru

© Siberian Federal University. All rights reserved

этапе в подавляющем большинстве работ проводится процедура диагонализации гамильтониана выделенного кластера методом точной диагонализации по Ланцошу. Причем в зависимости от разновидности кластерного подхода используются разные сольверы [10]. Здесь следует отметить, что в настоящей работе мы применяем "чистый" метод точной диагонализации, позволяющий вычислить полный точный набор собственных векторов и собственных значений. В качестве основной модели мы используем однозонную модель Хаббарда. Дальнейший этап построения решения зависит от кластерного подхода. Для CDMFT или приближения динамического кластера (DCA) [3] существует схема самосогласования, для кластерной теории возмущений (СРТ) [4] такая процедура не осуществляется. В настоящей работе принципиально иной подход, основанный на представлении X-операторов Хаббарда. Данное представление позволяет непосредственно определить хаббардовскую функцию Грина в приближении Хаббард-I и вычислить спектральную функцию. Описание данного подхода изложено в следующем разделе.

1. Кластерная теория возмущений

Проблема описания перехода металл-диэлектрик привела к созданию модели Хаббарда более сорока лет назад [11]. В последующий период теоретических исследований эта простая модель оказалась способной описать богатейшую физику явлений в системах с сильными электронными корреляциями. Рассмотрим однозонную двухмерную модель Хаббарда:

$$H = \sum_{i\sigma} \left\{ (\varepsilon - \mu) n_{i\sigma} + \frac{U}{2} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \right\} + \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}, \quad (1)$$

где ε — одноэлектронная энергия в кристаллическом поле, μ — химический потенциал, U — параметр кулоновского отталкивания на узле, t_{ij} — интегралы перескока с узла j на узел i , $a_{i\sigma}^\dagger$, $a_{i\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона на узле i с проекцией спина σ , соответственно, $\bar{\sigma} = -\sigma$, $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ — оператор числа частиц. В данной работе мы ограничимся приближением ближайших соседей, поэтому во втором слагаемом гамильтониана (1) рассматриваются перескоки только между соседними узлами t . Ниже мы определяем энергию в единицах t . Разбив решетку на квадратные кластеры с четырьмя узлами, можно перегруппировать слагаемые в гамильтониане (1), выделив внутрикластерную часть и межкластерное взаимодействие

$$H = \sum_f H_0^c(f) + \sum_{f \neq g} H_t^c(f, g), \quad (2)$$

где f, g — кластерные индексы.

Используя метод точной диагонализации, определяем полный точный набор собственных векторов и собственных значений внутрикластерной части гамильтониана (2). Знание полного базиса позволяет нам построить X-операторы для отдельного кластера и провести процедуру разложения фермиевских операторов рождения и уничтожения по этим X-операторам

$$X_f^n \equiv X_f^{pq} = |p\rangle \langle q|, \quad (3)$$

$$a_{fi\sigma} = \sum_n \gamma_{i\sigma}(n) X_f^n, \quad \gamma_{i\sigma}(n) = \langle m', N-1 | a_{i\sigma} | m, N \rangle, \quad (4)$$

где f — кластерный индекс, i — внутрикластерный индекс (1, 2, 3, 4), n — номер перехода из начального состояния q в конечное состояние p в гильбертовом пространстве состояний

кластера, m и m' — совокупности квантовых чисел, N — число электронов в кластере. Воспользовавшись антикоммутиационным соотношением для фермиевских операторов рождения и уничтожения и разложением (4), можно получить следующее правило сумм [12]

$$\sum_n |\gamma_{i\sigma}(n)|^2 F(n) \equiv f, \quad F(n) = \langle X^{pp} \rangle + \langle X^{qq} \rangle, \quad (5)$$

где $F(n)$ — фактор заполнения. Если в (5) суммирование осуществляется по всем переходам фермиевского типа во всем гильбертовом пространстве, то $f = 1$. Наши расчеты показали, что часть из этих переходов не влияет существенно на конечный результат и может быть отброшена уже на этом этапе вычислений, что значительно ускоряет численную процедуру. Важно отметить, что мы можем проводить отбор переходов с наперед заданной точностью, используя введенный выше f -фактор [12]. Применяя разложение (4) и осуществив Фурье-преобразование X -операторов, получим гамильтониан в следующем виде:

$$H = \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_p \varepsilon_p X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{pp} + \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{nm} T_{nm}(\tilde{\mathbf{k}}) X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{\dagger n} X_{\tilde{\mathbf{k}}}^m, \quad (6)$$

где $\tilde{\mathbf{k}}$ — волновой вектор, принимающий значения в редуцированной зоне Бриллюэна. В рамках приближения Хаббард-I хаббардовскую функцию Грина можно найти как

$$D^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = (D^0(\omega))^{-1} - T(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (7)$$

где

$$D_{nm}^0(\omega) = \frac{F(n)}{\omega - \Omega(n)} \delta_{n,m}, \quad \Omega(n) = \varepsilon_q(N+1) - \varepsilon_p(N) - \mu. \quad (8)$$

Определив одночастичную электронную функцию Грина как

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N_c} \sum_{nm} \sum_{ij} \gamma_{\sigma i}(n) \gamma_{\sigma j}(m) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} D_{nm}(\mathbf{k}, \omega), \quad (9)$$

можно вычислить спектральную функцию

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} (\text{Im} G(\mathbf{k}, \omega + i\delta + \mu)). \quad (10)$$

Здесь N_c — число узлов в кластере (в нашем случае равно 4), \mathbf{k} — волновой вектор, принимающий значения в первоначальной зоне Бриллюэна.

Спектральная функция (10) позволяет исследовать распределение спектрального веса квазичастиц в хаббардовских подзонах. Причем ее сумма по волновым векторам в первой зоне Бриллюэна определяет плотность одноэлектронных состояний. Перейдем к основным результатам настоящей работы.

2. Пиннинг химического потенциала

В настоящей работе все вычисления были выполнены в рамках приближения ближайших соседей с параметром кулоновского отталкивания на одном узле $U = 8$. Все энергетические величины представлены в единицах t (параметр перескока между ближайшими соседями). Вычислив спектральную функцию (10), мы построили дисперсионные распределения и соответствующие плотности состояний. Причем все результаты получены при значении f -фактора (5) не менее 0,99 (конкретное значение указано на всех рисунках сверху).

На рис. 1а представлены распределения для случая половинного заполнения (без допирования). Хорошо видны две хаббардовские подзоны. Причем внутри каждой подзоны квазичастичный спектральный вес распределен неравномерно. Но полный спектральный вес отдельной подзоны с учетом проекции спина равен ~ 1 (см. обсуждение правила сумм в разделе 1).

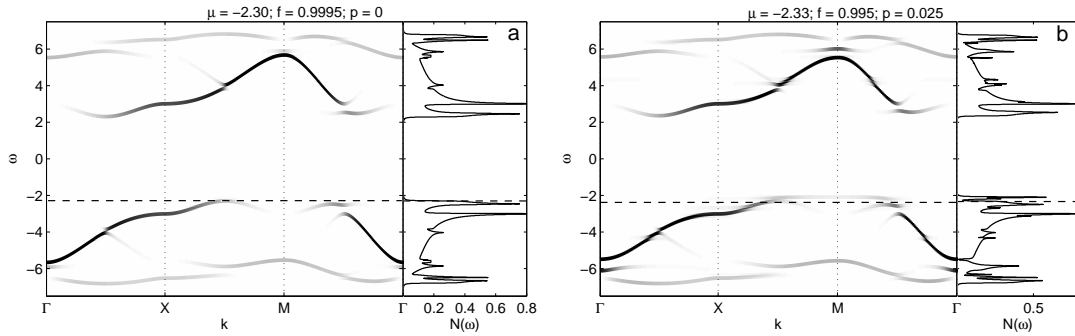


Рис. 1. Дисперсионная зависимость вдоль симметричного направления Γ -X-M- Γ ($\Gamma=(0,0)$, $X=(\pi,0)$, $M=(\pi,\pi)$) и плотность состояний (справа) при концентрации дырок $p = 0,0$ (a) и $0,025$ (b). $U = 8$, полуширина лоренциана $\delta = 0,01$. Химический потенциал μ отмечен пунктирной линией

Интерес представляет исследование системы при различной степени допирования. В силу электрон-дырочной симметрии для приближения ближайших соседей, мы ограничились рассмотрением дырочного допирования. На рис. 1b и 2 представлены дисперсии и плотности состояний для $p = 0,025; 0,1; 0,25$.

Отдельно рассмотрим рис. 1. Можно заметить, что увеличение числа дырок до 2,5% существенно не повлияло на положение химического потенциала, что позволяет нам назвать это явление — пиннинг химического потенциала. Такое поведение легко понять, если обратиться к рис. 1b, на котором отчетливо видны внутрищелевые состояния (в плотности состояний выше уровня химического потенциала появляется пик). Расчеты показали, что незначительная концентрация дырок приводит к образованию этих состояний, забирающих на себя часть спектрального веса как с нижней, так и с верхней хаббардовских подзон. Причем при малой степени допирования "стекание" спектрального веса с нижней подзоны строго согласовано с величиной допирования. Это приводит к тому, что она всегда остается заполненной, а химический потенциал оказывается запиннигован.

Дальнейшее увеличение степени допирования приводит к непрерывному смещению химического потенциала (см. рис. 2). Одновременно наблюдается эволюция внутрищелевых состояний, приводящая при определенной степени допирования ($p \approx 0.05$) к слиянию этих состояний с нижней подзоной. В целом видно, что изменение концентрации дырок существенно влияет на структуру хаббардовских подзон и перераспределение спектрального веса между ними.

Заключение

В заключении настоящей работы необходимо отметить, что кластерный подход позволяет непосредственно учесть ближний магнитный порядок. Использование X-операторной техники упростило процедуру вычисления одночастичной функции Грина по сравнению с другими методами. В целом, предложенная кластерная теория возмущений позволила описать полный спектр фермиевских квазичастиц с учетом спектрального веса и проследить

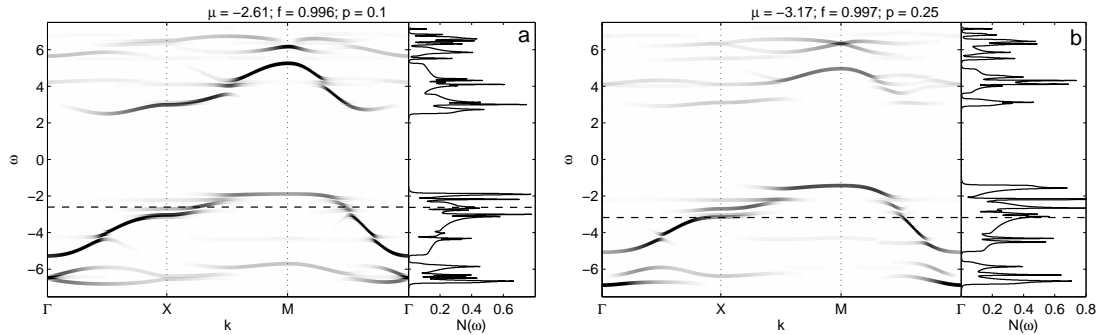


Рис. 2. Дисперсионная зависимость вдоль симметричного направления Γ -X-M- Γ ($\Gamma=(0,0)$, X= $(\pi,0)$, M= (π,π)) и плотность состояний (справа) при концентрации дырок $p = 0,1$ (a) и $0,25$ (b). $U = 8$, полуширина лоренциана $\delta = 0,01$. Химический потенциал μ отмечен пунктирной линией

его эволюцию с увеличением степени дырочного допирования. В ходе анализа полученных результатов был выявлен пиннинг химического потенциала при малых концентрациях дырок. Расчеты показали, что пиннинг химического потенциала происходит за счет перераспределения спектрального веса между хаббардовскими подзонами и внутрищелевыми состояниями. Результаты настоящей работы открывают широкие перспективы применения кластерного подхода при описании систем с сильными электронными корреляциями.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 10-02-90725-моб_ст, № 10-02-00251-а) и программы 2.3 ОФН РАН "Сильные электронные корреляции".

Список литературы

- [1] A.F.Barabanov, L.A.Maksimov, A.V.Mikheyenkov, On the bound state of holes for the square-lattice Hubbard model with resonating valence bonds, *J. Phys.: Cond. Matt.*, **1**(1989), 10143–10151.
- [2] S.G.Ovchinnikov, I.S.Sandalov, The band structure of strong-correlated electrons in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$, *Physica C*, **161**(1989), 607–617.
- [3] M.H.Hettler, A.N.Tahvildar-Zadeh, M.Jarrell et al., Nonlocal dynamical correlations of strongly interacting electron systems, *Phys. Rev. B*, **58**(1998), R7475–R7479.
- [4] D.Senechal, D.Perez, M.Pioro-Ladriere, Spectral Weight of the Hubbard Model through Cluster Perturbation Theory, *Phys. Rev. Lett.*, **84**(2000), 522–525.
- [5] G.Kotliar, S.Y.Savrasov, G.Pallson, G.Biroli, Cellular Dynamical Mean Field Approach to Strongly Correlated Systems, *Phys. Rev. Lett.*, **87**(2001), 186401(4).
- [6] В.В.Вальков, В.А.Мицкан, Г.А.Петраковский, Магнитоупругий механизм формирования синглетной фазы квантового двумерного антиферромагнетика, *ЖЭТФ*, **129**(2006), 268–282.
- [7] M.Civelli, Doping-driven evolution of the superconducting state from a doped Mott insulator: Cluster dynamical mean-field theory, *Phys. Rev. B*, **79**(2009), 195113(33).

- [8] M.Balzer, W.Hanke, M.Potthoff, Importance of local correlations for the order parameter of high- T_c superconductors, *Phys. Rev. B*, **81**(2010), 144516(7).
- [9] G. Sordi, K. Haule, and A.-M. S. Tremblay, Finite Doping Signatures of the Mott Transition in the Two-Dimensional Hubbard Model, *Phys. Rev. Lett.*, **104**(2010), 226402(4).
- [10] T.Maier, M.Jarrell, T.Pruschke, M.H.Hettler, Quantum cluster theories, *Rev. Mod. Phys.*, **77**(2005), 1027–1080.
- [11] J.Hubbard, Electron Correlations in Narrow Energy Bands, *J. Proc. Roy. Soc. A*, **276**(1963), 238-257.
- [12] С.В.Николаев, С.Г.Овчинников, Кластерная теория возмущений для модели Хаббарда с точным учетом ближнего магнитного порядка в кластере 2×2 , *ЖЭТФ*, **138**(2010), 717-728.

Cluster Perturbation Theory for the Hubbard Model: the Pinning of Chemical Potential

Sergey V.Nikolaev
Sergey G.Ovchinnikov

In this paper we study the single-band two-dimensional Hubbard model in the framework of the cluster perturbation theory. Consideration is limited to nearest-neighbor approximation. The original two-dimensional square lattice is divided into clusters of 2×2 , forming a square superlattice. The complete set of eigenvectors and eigenvalues of a single cluster is determined by exact diagonalization method. On this basis, we construct X -operators, through which overrides the Hamiltonian of the problem. The spectral function is computed within the Hubbard-I approximation. This function allows to explore the distribution of spectral weight of the quasiparticles in the Hubbard subbands. The effect of the in-gap states at the pinning of the chemical potential at low concentrations of holes is explored.

Keywords: cluster perturbation theory, Hubbard model, strong electron correlation, exact diagonalization, X -operators, density of states.