

СЮРПРИЗ МОДЕЛИ ХАББАРДА: КОНКУРЕНЦИЯ МНОЖЕСТВЕННЫХ НИЗКОЛЕЖАЩИХ УПОРЯДОЧЕННЫХ СОСТОЯНИЙ

Рожков А.В. *¹, Сбойчаков А.О.¹

¹ *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия*

Статья поступила в редакцию 30.06.2023
Одобрена после рецензирования 08.07.2023
Принята к публикации 31.07.2023

Аннотация

В работе мы обсуждаем конкуренцию низколежащих упорядоченных состояний для модели Хаббарда. Имеющиеся численные и аналитические расчеты, выполненные в различных режимах, однозначно показывают, что для гамильтониана Хаббарда и родственных моделей существует целый набор непохожих друг на друга несверхпроводящих низколежащих состояний с чрезвычайно близкими энергиями. Эти состояния конкурируют между собой за возможность стать «истинным» основным состоянием системы. Мы приводим аргументы в пользу того, что параметры этой конкуренции таковы, что ценность поиска единственного состояния с наименьшей энергией весьма ограничена. Современные результаты требуют пересмотра роли модели Хаббарда (и других подобных упрощенных моделей) в теоретических исследованиях многоэлектронных коррелированных систем. Мы также показываем, что модель Хаббарда со слабым взаимодействием может быть использована как удобный теоретический «полигон» для изучения такой конкуренции.

Ключевые слова: модель Хаббарда, основное состояние, легирование, волна спиновой плотности, фазовое расслоение, доменные стенки

EDN PETF AZ

DOI: 10.24412/2949-0553-2023-35-4-12

1. Введение

Семейство многочастичных гамильтонианов, сегодня ассоциированных с именем Хаббарда, изучается, начиная с работы [1] Шубина и Вонсовского, уже почти сто лет. Особенно много работ по данному предмету вышли после открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в купратных соединениях. Эта активизация связана с общим ожиданием, что «загадка» ВТСП кроется в свойствах модели Хаббарда (МХ).

Ажиотажный интерес к проблеме ВТСП стал главным фактором, формирующим контекст исследований МХ. В частности, стало фактически стандартом рассматривать гамильтониан Хаббарда (ГХ) в режиме достаточно сильного взаимодействия и при электронной концентрации, близкой к одному электрону на один узел решетки. (Теоретики, работающие с МХ, традиционно обозначают такое значение концентрации как «близкое к половине», имея в виду, что количество электронов на один узел решетки не может превышать двух.) При этом пределы слабого взаимодействия или малой концентрации электронов считались «бесперспективными». Ну и, пожалуй, самой главной целью проводимых исследований считалось объяснение сверхпроводимости с необычно высокой критической температурой.

Поставленная задача оказалась, однако, весьма сложной и до конца не решенной даже сегодня, спустя уже почти четыре десятилетия с момента открытия ВТСП. Главная трудность в исследовании МХ в «интересном» режиме состоит в том, что точных решений для ГХ неизвестно, а малые параметры, по которым можно было бы строить приближенные пертурбативные схемы, в задаче отсутствуют. Стоит

* Автор, ответственный за переписку: Александр Владимирович Рожков, alex.vl.rozhkov@yandex.ru

также отметить, что предлагаемые экспериментом рекомендации о том, в какой области параметров модели может находиться сверхпроводимость, являются весьма расплывчатыми. Экспериментальные данные указывают, что концентрация электронов не должна слишком сильно отклоняться от половинной, но и приближение к половине разрушает сверхпроводимость.

В 90-х и 2000-х годах мы стали свидетелями расцвета так называемых «неконтролируемых приближений». В рамках неконтролируемых подходов допускались преобразования, точность которых невозможно было строго установить (иными словами, точность невозможно было «контролировать»). Полученные таким образом результаты регулярно подвергались критике в силу отсутствия надежных обоснований использованных теоретических приемов. Альтернативой чисто аналитическим или полуаналитическим подходам выступали численные расчеты. Следует также помнить, что и сами численные инструменты исследований нередко опираются на неконтролируемые предположения, например, используют вариационную волновую функцию.

В результате рефлексии и осмысления накопленных результатов изучающее МХ исследовательское сообщество практически полностью отказалось от неконтролируемых аналитических приближений, а численные методы вышли на первый план. Конечно же, качественные улучшения компьютерного оборудования, произошедшие за последние десятилетия, возросшая доступность высокопроизводительного оборудования, а также прогресс в развитии численных приемов изучения МХ позволили получить новые интересные результаты в данной области.

Кроме этих, в общем-то, чисто методических уточнений, сама теоретическая мысль, зажатая в достаточно жесткие рамки сфокусированного на ВТСП нарратива, пришла к определенной переоценке исходной цели исследования. Дело в том, что экспериментально наблюдаемые «нормальные» (т.е., несверхпроводящие) свойства ВТСП купратов не всегда поддавались убедительному объяснению в рамках модели ферми-жидкости Ландау. Данный факт был воспринят как указание на то, что даже сам феномен сверхпроводимости с непривычно высокой критической температурой является лишь следствием необычных свойств нормального состояния. Такая интерпретация эксперимента привела к тому, что многие численные исследования затрачивают весьма значительные усилия на анализ именно нормальной фазы МХ.

Результаты, полученные благодаря воплощению данной научной программы в жизнь, оказались, однако, весьма неожиданными. А именно, выяснилось, что в низкоэнергетической части спектра модели расположены несколько почти вырожденных состояний весьма разной природы как сверхпроводящих, так и несверхпроводящих, пространственно-однородных и неоднородных. Разделенные весьма небольшими энергиями, эти состояния конкурируют за возможность стать истинным основным состоянием гамильтониана. Для иллюстрации этой особенности МХ можно привести работу [2], где эта конкуренция была не только явно отмечена, но и предпринята попытка оценить разницу энергий двух близлежащих состояний (одно сверхпроводящее, другое нет). Присутствие низколежащих состояний, характеризующихся т.н. фазовым расслоением, было отмечено в статье [3]. (Фазовое расслоение – это спонтанное возникновение областей-доменов, отличающихся друг от друга концентрацией электронов.)

В данной работе мы постараемся убедить читателя в том, что такое положение вещей требует переосмысления роли МХ как инструмента исследований многоэлектронных систем: множественность низколежащих состояний с близкой энергией означает, что поиск единственного основного состояния модели не может более рассматриваться как окончательная цель теоретических исследований. Кроме этого, мы продемонстрируем, что проблемы множественных почти вырожденных состояний не уникальны для «интересных» режимов МХ. Такие явления можно изучать в гораздо более «комфортных» теоретических условиях, предоставляемых моделями со слабым взаимодействием.

2. Гамильтониан Хаббарда: вводные замечания

В этой части мы формально введем модель Хаббарда и объясним основные обозначения. Итак, гамильтониан модели Хаббарда \hat{H} задается следующими формулами:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{kin}} + \hat{H}_{\text{int}}, \quad \text{где} \quad \hat{H}_{\text{kin}} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}, \quad \hat{H}_{\text{int}} = U \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - 1/2)(\hat{n}_{i\downarrow} - 1/2). \quad (1)$$

Иными словами, ГХ может быть записан как сумма двух вкладов: слагаемое \hat{H}_{kin} представляет кинетическую энергию электронов, а слагаемое \hat{H}_{int} – энергию электрон-электронного взаимодействия. Символ $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ обозначает оператор рождения электрона с проекцией спина $\sigma = \uparrow, \downarrow$ на узле i . Мы будем везде предполагать, что узлы организованы в простую трехмерную кубическую или двухмерную квадратную решетку, содержащую в общей сложности \mathcal{N} узлов. Оператор $\hat{c}_{i\sigma}$ сопряжен $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ и отвечает за уничтожение электрона. Традиционное обозначение $\langle ij \rangle$ указывает на то, что узлы i и j являются

ближайшими соседями на решетке. Оператор $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ определяет количество электронов со спином σ на узле i .

Гамильтониан (1) характеризуется двумя величинами, имеющими размерность энергии. Первая такая величина – это коэффициент t , входящий в определение оператора кинетической энергии. Он называется амплитудой перескока на ближайший узел. Амплитуда t задает масштаб кинетической энергии электронов. Второй размерный коэффициент – это U в определении оператора \hat{H}_{int} . Его физический смысл – прирост потенциальной энергии системы в случае, когда два электрона находятся одновременно на одном узле. Чтобы убедиться в этом, удобно переписать \hat{H}_{int} следующим образом:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{U}{4} \mathcal{N} - \frac{U}{2} \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (2)$$

В этой сумме первый член – это просто c -число, второй член – это интеграл движения (см. ниже), а третий член пропорционален числу узлов, на которых одновременно находятся два электрона. Каждый раз, когда число таких узлов меняется на единицу, модельная энергия межэлектронного взаимодействия меняется на величину U .

Отношение U/t определяет значимость многочастичных корреляций в системе, описываемой МХ. В пределе $U/t \rightarrow 0$ роль взаимодействия падает, а вместе с этим ослабевают и проявления корреляций. При $U = 0$ волновая функция системы представима в виде слэтеровского детерминанта. В противоположном пределе $U \gg t$ многочастичные корреляции сильны, и единого надежного описания свойств модели неизвестно.

Легко проверить, что следующие операторы

$$\hat{N} = \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}), \quad (3)$$

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (4)$$

коммутируют с гамильтонианом (1). Оператор \hat{N} – это полное число электронов в системе. Поскольку \hat{N} коммутирует с ГХ, число электронов N сохраняется. Удобно ввести два новых обозначения, традиционно используемых в литературе:

$$n = \frac{N}{\mathcal{N}}, \quad x = n - 1. \quad (5)$$

Величина n называется концентрацией (на один узел), а x – уровень легирования или уровень допирования. Принцип запрета Паули ограничивает значения n интервалом от нуля до двух: $0 < n < 2$. Случай $n = 1$ называют половинным заполнением именно потому, что это значение концентрации соответствует как раз середине допустимого интервала значений n . Уровень легирования x описывает отклонение от половинного заполнения и может быть как положительным (электронное легирование), так и отрицательным (дырочное легирование). Для многих важных случаев $|x|$ мало.

Оператор \hat{S}_z , определяемый формулой (4), соответствует проекции на ось z полного спина $\hat{\mathbf{S}}$ всего электронного коллектива. Равенство $[\hat{S}_z, \hat{H}] = 0$ означает, что проекция полного спина S_z – интеграл движения. Поскольку \hat{H} инвариантен относительно одновременного вращения спинов всех электронов в системе, две другие проекции $S_{x,y}$ также сохраняются (данное утверждение может быть доказано применением унитарных операторов \hat{U} , отвечающих за поворот всех спинов, к тождеству $[\hat{S}_z, \hat{H}] = 0$). За исключением случаев, когда значительная спиновая поляризация системы была создана целенаправленным внешним воздействием (например, приложением магнитного поля), удельная спиновая поляризация \mathbf{S}/\mathcal{N} стремится к нулю в термодинамическом равновесии.

Как мы видим, сама модель весьма проста. Гамильтониан (1) явным образом учитывает лишь одну электронную зону, ширина которой контролируется амплитудой перескока t . Также модель игнорирует взаимодействие между фононами и электронами, а кроме этого и дальнедействующую часть кулоновского взаимодействия. По сути, все взаимодействие сводится к исключительно локальному межэлектронному отталкиванию, характеризующемуся энергией U . При этом, несмотря на указанные упрощения и десятилетия исследований, гамильтониан Хаббарда остается не до конца понятным теоретическим объектом, привлекающим внимание активно работающих ученых.

3. Известные решения для модели Хаббарда

На сегодняшний день для МХ известно несколько случаев, допускающих аналитическое или частично аналитическое исследование. Во-первых, это предел малого U/t . Если $U/t \ll 1$, к гамильтониану

может быть применено приближение среднего поля. Этот подход позволяет описывать термодинамику и упорядоченные состояния МХ при $x = 0$. С некоторыми оговорками он применим и при $|x| \ll 1$. Работы такого типа были особенно популярны на рубеже веков, но впоследствии интерес к использованию метода среднего поля упал из-за того, что предел малого U неприменим к купратам, исследования которых были чрезвычайно востребованы в то время. Однако в недавней работе [4] приближение среднего поля было применено к ГХ для изучения конкуренции несверхпроводящих состояний.

Особняком стоит случай половинного заполнения $x = 0$. При малых значениях U можно воспользоваться методом среднего поля, который при половинном заполнении особенно прост. Этот случай будет рассмотрен ниже в части 5. В противоположном пределе $U/t \gg 1$ известно унитарное преобразование, отображающее ГХ на гамильтониан модели антиферромагнетика Гейзенберга. В обоих пределах основное состояние МХ с нулевым легированием обладает антиферромагнитным упорядочением. Также существенный прогресс достигнут и в изучении возбужденных состояний, термодинамики и т.д., смотри работу [5].

В заключении этой части отметим, что точное решение МХ возможно для одномерной решетки. Для этого необходимо воспользоваться так называемой подстановкой Бете. К сожалению, в силу узкой специализации этого метода, а также из-за определенной «патологичности» одномерных систем, обобщить получающиеся таким образом результаты на пространства больших размерностей не удастся.

4. Конкуренция состояний в режиме сильного взаимодействия

В силу ограниченности аналитического инструментария, доступного для исследования «интересного» режима сильных взаимодействий $U/t \gtrsim 1$ при ненулевом $|x|$, значительные усилия были вложены в развитие численных методов. В сочетании с впечатляющим прогрессом в области компьютерной техники это не могло не привести к появлению новых важных результатов.

Компьютерные исследования, нацеленные на определение основного состояния ГХ, столкнулись с неожиданным затруднением. Оказалось, что спектр ГХ устроен так, что рядом с основным состоянием соседствует еще как минимум одно или несколько состояний, чья энергия практически совпадает с энергией основного. В качестве примера работы, обсуждающей такую ситуацию, можно привести статью [2]. Авторы обнаружили, что три состояния разной структуры (диэлектрические диагональные доменные стенки в антиферромагнитной матрице; сосуществующие со сверхпроводимостью «вертикальные» доменные стенки; состояние без доменов, объединяющее в себе сверхпроводящий и антиферромагнитный параметры порядка) конкурируют друг с другом. Детали этой конкуренции можно уточнить, используя графики, представленные на Рис. 2а рассматриваемой статьи. Из приведенных данных следует, что типичная энергия на одну внесенную в процессе легирования дырку при рассматриваемых в работе параметрах равна примерно $1,5t$ для всех трех состояний, а вот разница в энергиях между ними составляет менее $0,008t$ (для расчетов с максимально доступной точностью).

При наличии такой жесткой конкуренции непохожих друг на друга многочастичных фаз с неизбежностью возникает следующий парадокс численного анализа. Расчеты энергии основного состояния, проводимые разными численными методами, находятся в согласии друг с другом. При этом другие наблюдаемые величины демонстрируют заметный разброс. Это связано с тем, что каждый конкретный метод вносит в расчет энергии конкретного состояния свою специфическую систематическую ошибку, предпочитая одну какую-то фазу из списка конкурентов в соответствии с особенностями своего алгоритма. Поскольку энергия у всех конкурирующих фаз практически одна и та же, а другие свойства могут принципиально отличаться, между ответами, полученными разными способами, возникает согласованность по энергии и расхождение по другим наблюдаемым. Данная особенность была, в частности, отмечена в работе [5], анализирующей широкий набор наиболее популярных численных результатов, опубликованных до 2015 г.

5. Конкуренция состояний в модели Хаббарда со слабым взаимодействием

Мы продемонстрируем в этой части, что конкуренцию низколежащих состояний можно исследовать вне пределов сильно коррелированных систем, и не используя узкоспециализированные инструменты компьютерного моделирования. Вместо этого можно работать с гамильтонианом со слабым взаимодействием, который допустимо исследовать с помощью метода среднего поля. Приближение среднего поля – это общезначимый подход, знакомый теоретикам по разным контекстам как квантовым, так и классическим. Такой весьма скромный набор требований к теоретическому багажу принципиально упрощает исследовательский процесс.

Модель, рассматриваемая в этой части, является разновидностью МХ. Мы будем считать, что наша система задана на трехмерной простой кубической решетке. Также как и модель, задаваемая

соотношениями (1), исследуемый ниже гамильтониан является суммой кинетической энергии и энергии межэлектронного взаимодействия. Мы, однако, хотим ввести в кинетический член \hat{H}_{kin} анизотропию типа «легкая плоскость». А именно, определим вклад, ответственный за кинетическую энергию, следующим образом:

$$\hat{H}_{\text{kin}} = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}. \quad (6)$$

Данная формула подразумевает, что амплитуда перескока зависит от узлов i и j , между которыми происходит перескок. Мы зафиксируем следующую зависимость: $t_{ij} = t$, если вектор, соединяющий узлы i и j , лежит в плоскости Oxy (в базальной плоскости). Если же такой вектор параллелен оси Oz , то $t_{ij} = t_z < t$. Такой выбор амплитуд перескока означает, что электроны преимущественно движутся в одном каком-то слое, параллельном базальной плоскости. Перемещения из слоя в слой можно рассматривать как редкие события в пределе $t_z \ll t$. Если же положить $t_z \equiv 0$, то модель распадается на набор несвязанных друг с другом двумерных квадратных решеток.

Введение такой анизотропии позволяет решить сразу две проблемы. Во-первых, многие популярные классы кристаллов обладают подобной анизотропией. Во-вторых, анизотропия амплитуды перескоков позволяет решить формальный технический вопрос: благодаря анизотропии особенности ван Хофа в плотности одноэлектронных состояний смещаются с энергии Ферми, упрощая обоснование метода среднего поля.

Что касается члена \hat{H}_{int} , он будет иметь тот же вид, что и в соотношениях (1), но мы потребуем малости взаимодействия: $U/t \ll 1$. Именно это неравенство является критерием применимости приближения среднего поля к исследуемой модели.

Также мы отметим, что для управления электронной концентрацией удобно ввести в формализм химический потенциал μ и добавить стандартный член $-\mu\hat{N}$ в полный гамильтониан модели. В таком случае можно контролировать n , меняя μ , что и будет сделано нами в этой части статьи. Важный частный случай половинного заполнения $n = 1$ соответствует $\mu = 0$.

Хорошо известно, что при нулевом легировании $x = 0$ основное состояние нашего гамильтониана – это волна спиновой плотности (ВСП). По сути, ВСП является частным случаем антиферромагнетика. Традиционно ВСП называют антиферромагнетизм с малым значением локальной намагниченности. Для того, чтобы описать состояние с ВСП, мы введем следующий параметр порядка:

$$\Delta_i = \frac{U}{2} (\langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle - \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle), \quad (7)$$

где $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по отношению к основному состоянию модели. Следует сделать два замечания по поводу ур. (7). Во-первых, стоит обратить внимание на то, что значение параметра порядка Δ_i зависит от узла i : развиваемый нами формализм явно допускает возможность пространственно модулированного параметра порядка. Во-вторых, такой параметр порядка пропорционален проекции на ось z вектора локальной спиновой намагниченности. Это позволяет нам переписать ур. (7) таким образом: $\Delta_i = U s_z(i)$, где $s_z(i) = (\langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle - \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle)/2$ – проекция спиновой намагниченности на узле i на ось z . Такая форма записи проясняет смысл термина «волна спиновой плотности».

Используя предложенный параметр порядка, можно аппроксимировать ГХ следующим среднеполевым гамильтонианом:

$$\hat{H}^{\text{MF}} = \hat{H}_{\text{kin}}^{\text{MF}} + \hat{H}_{\text{int}}^{\text{MF}}, \quad (8)$$

$$\hat{H}_{\text{kin}}^{\text{MF}} = \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \text{H.c.} \right) - \sum_{i\sigma} \left(\mu - \frac{U x_i}{2} \right) \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}, \quad (9)$$

$$\hat{H}_{\text{int}}^{\text{MF}} = \sum_i \left[\Delta_i (\hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} - \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\uparrow}) - U \left(\frac{x_i(2 + x_i)}{4} - \frac{\Delta_i^2}{U^2} \right) \right], \quad (10)$$

где нами была введена локальная плотность легирования $x_i = \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle - 1$. В рамках среднеполевого подхода параметр порядка Δ_i и локальная плотность x_i вычисляются с помощью процедуры самосогласования.

Среднеполевой гамильтониан (8) квадратичен по операторам рождения и уничтожения. Кроме этого, он расщепляется на два слагаемых, каждое из которых соответствует одному какому-то значению проекции σ . Это позволяет записать гамильтониан (8) как

$$\hat{H}^{\text{MF}} = \sum_{ij\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \mathcal{H}_{ij}^\sigma \hat{c}_{j\sigma}, \quad (11)$$

где величины \mathcal{H}_{ij}^σ – это элементы матрицы \mathcal{H}^σ . (Размер \mathcal{H}^σ равен $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$.) Поэтому процесс установления термодинамических и корреляционных свойств системы, описываемой \hat{H}^{MF} , сводится к диагонализации двух матриц размера $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$ каждая. Нужно, однако, помнить, что при численном исследовании данную диагонализацию придется выполнять многократно для достижения самосогласования по Δ_i и x_i .

Условие самосогласования удобно интерпретировать как задачу о нахождении экстремума для большого канонического потенциала $\Omega = \Omega(\mu)$, задаваемого формулой:

$$\Omega = \sum_{\sigma} \sum_{S=1}^{\mathcal{N}^2} E_{\sigma}^{(S)} \Theta(-E_{\sigma}^{(S)}) - U \sum_i \left(\frac{x_i(2+x_i)}{4} - \frac{\Delta_i^2}{U^2} \right). \quad (12)$$

В данном выражении величины $E_{\sigma}^{(S)} = E_{\sigma}^{(S)}(\mu)$ являются собственными числами матриц \mathcal{H}_{ij}^σ . При фиксированном μ необходимо найти абсолютный минимум Ω как функции Δ_i и x_i . Такой минимум соответствует основному состоянию. Низколежащие локальные минимумы будут представлять метастабильные состояния, конкурирующие с основным. Стоит, тем не менее, не забывать, что поиск таких минимумов – весьма непростая задача. В общем случае неизвестен способ исчерпывающе указать все возможные экстремумы. На языке физики это означает, что для конкретной модели невозможно однозначно перечислить все допустимые виды упорядочения. Как правило, приходится просто перебирать варианты параметров порядка, вытекающие из опыта предыдущих исследований, согласующиеся с экспериментальными данными и общезначимой «интуицией».

Тем не менее, существуют удачные стечения обстоятельств, при которых тип упорядочения считается надежно установленным. Как мы уже отмечали ранее в части 3, для МХ таким «хорошим» случаем является предел половинного заполнения $x = 0$. Известно, что при отсутствии легирования пространственная структура параметра порядка имеет простой вид:

$$\Delta_i = (-1)^{i_x+i_y+i_z} \Delta_0, \quad (13)$$

где мы предполагаем, что положение узла i на простой кубической решетке можно задать тремя целочисленными декартовыми координатами (i_x, i_y, i_z) . Иными словами, в упорядоченном состоянии, описываемом параметром порядка (13), спиновые намагниченности на двух соседних узлах одинаковы по модулю, но противоположны по направлению. Знак Δ_0 устанавливается спонтанно в момент фазового перехода, а для $|\Delta_0|$ может быть выведено приближенное соотношение, выражающее $|\Delta_0|$ через t и U . Заметим также, что возникновение параметра порядка рассматриваемого типа приводит к открытию щели в спектре одноэлектронных возбуждений, поэтому нелегированное состояние гамильтониана Хаббарда обладает диэлектрическими свойствами.

Имеющееся у нас представление об основном состоянии при нулевом легировании помогает в исследовании случая конечного x . Поскольку мы знаем, что при $x = 0$ основное состояние характеризуется параметром порядка (13), мы ожидаем, что при предельном переходе $x \rightarrow 0$ структура параметра порядка (13) должна воспроизводиться. Эта деталь помогает сузить список перспективных типов упорядочения.

Несмотря на наличие упрощающих обстоятельств, поставленная задача требует привлечения численных расчетов. Стоит, тем не менее, помнить, что компьютерные инструменты, необходимые для этой работы, далеко не так сложны, как те, что используются для симуляции сильнокоррелированных режимов МХ. В частности, достаточно прямолинейный программный код для поиска экстремумов потенциала Ω , задаваемого ур. (12), может быть написан с опорой на общедоступные универсальные средства разработки. Окончательная программа исполняется на обычном офисном компьютере за несколько часов, а использование высокопроизводительного счетного оборудования не требуется вообще.

В результате такого исследования в статье [4] были идентифицированы три класса многочастичных состояний с низкой энергией, потенциально могущих конкурировать друг с другом за возможность стать основным состоянием. Рассмотрим эти три класса подробнее.

Класс I – это пространственно неоднородная фаза, демонстрирующая расслоение на области двух типов. В областях первого типа локальная концентрация носителей равна единице $n = 1$. Иными словами, дополнительных носителей заряда, внесенных в образец легированием, в этих областях нет, т.е. локально $x = 0$. В данных областях реализуется половинное заполнение и, как следствие, упорядочение (13). Такие области являются диэлектрическими.

Области второго типа являются проводящими: они аккумулируют все внесенные электроны, а параметр порядка там занулен. По мере того, как легирование растет, растет и полный объем, занятый областями второго типа. А вот концентрация носителей не зависит от уровня легирования, сохраняясь постоянной до тех пор, пока проводящие области не распространятся на весь объем системы.

В предельном переходе $x \rightarrow 0$ проводящие области исчезают, а упорядочение (13) восстанавливается во всем объеме образца, как мы и указывали выше.

Класс II. Многочастичные состояния этого класса похожи на состояния класса I: внесенный легированием заряд формирует ограниченные металлические области внутри диэлектрической матрицы. В отличие от первого класса, в тех областях, где скапливаются носители, упорядочение не разрушается полностью, но присутствует в ослабленном и несколько искаженном виде: там возникает т.н. несоизмеримая ВСП. Предельный переход $x \rightarrow 0$ восстанавливает упорядочение (13) во всем объеме образца, поскольку области с лишними носителями просто сжимаются в объеме до нуля.

Класс III. Состояния, образующие этот класс, можно охарактеризовать как «кристалл» из доменных стенок ВСП. Чтобы понять, как устроен такой «кристалл», нужно вначале разобраться с тем, что такое доменная стенка ВСП. Давайте модифицируем упорядочение (13) следующим образом:

$$\Delta_i = (-1)^{i_x+i_y+i_z} \tilde{\Delta}_{i_x}, \quad (14)$$

где $\tilde{\Delta}_{i_x}$ – медленная монотонная функция решеточной координаты i_x , удовлетворяющая одному из двух условий:

$$\lim_{i_x \rightarrow \pm\infty} \tilde{\Delta}_{i_x} = \pm|\Delta_0| \quad \text{или} \quad \lim_{i_x \rightarrow \pm\infty} \tilde{\Delta}_{i_x} = \mp|\Delta_0|. \quad (15)$$

Любое из этих условий подразумевает, что $\tilde{\Delta}_{i_x}$ проходит через ноль при некоем $i_x = I_x^{\text{DW}}$. При не слишком больших значениях $|i_x - I_x^{\text{DW}}|$ модуль параметра порядка $|\Delta_i|$ подавлен по сравнению с $|\Delta_0|$. Условия (15) подразумевают также, что на бесконечности Δ_i асимптотически приближается к структуре, выражаемой ур. (13). Но параметр порядка при $i_x \rightarrow +\infty$ отличается знаком от параметра порядка при $i_x \rightarrow -\infty$. Описанная конфигурация называется доменной стенкой, а плоскость $i_x = I_x^{\text{DW}}$ задает положение этой стенки в образце.

Сами по себе доменные стенки повышают энергию системы. По этой причине при $x = 0$ доменных стенок нет. Однако можно показать, что при легировании работа, требуемая для внесения в систему одного носителя заряда, уменьшается, если внесенный носитель локализуется внутри доменной стенки. Это свойство есть следствие подавления параметра порядка при $i_x \approx I_x^{\text{DW}}$. Поэтому при легировании возникновение доменных стенок становится выгодным. Доменные стенки в состоянии с конечным x параллельны друг другу и образуют пространственно периодическую структуру с периодом $l = l(x)$. Период монотонно уменьшается с ростом уровня легирования x . Именно эта конфигурация и называется «кристаллом» из доменных стенок.

Для того, чтобы охарактеризовать конкуренцию рассмотренных классов состояний, удобно пользоваться энергией на один внесенный носитель. Для класса I эта величина может быть вычислена аналитически [4]. Она равна $\Delta_0/\sqrt{2} \approx 0,707\Delta_0$. Численный расчет дает $0,698\Delta_0$ для класса II. Для класса III получается интервал значений от примерно $0,69\Delta_0$ для модели с высокой анизотропией до примерно $0,64\Delta_0$ для низкой анизотропии. Мы видим, что доменный кристалл имеет самую низкую энергию на один заряд. Таким образом, при легировании именно состояние с доменными стенками является основным состоянием модели. Однако энергии для двух других классов чрезвычайно близки: разница в энергиях не превосходит $0,06\Delta_0$. Мы приходим к заключению, что МХ в режиме слабого взаимодействия демонстрирует конкуренцию низколежащих состояний.

6. Обсуждение и выводы

Конкуренция нескольких низколежащих состояний – интересная и достаточно неожиданная особенность МХ. Численные работы, исследовавшие МХ в режиме сильного взаимодействия, стали явно отмечать эту черту примерно последние десять лет. Стоит, тем не менее, помнить, что МХ в режиме сильных корреляций не является уникальной платформой, где такая конкуренция может развернуться. Эта мысль была сформулирована и подкреплена конкретными примерами в статье [4]. Более того, если рассматривать такую конкуренцию как общую проблему, потенциально затрагивающую широкий спектр моделей, то быстро выяснится, что сильные корреляции не являются необходимым условием такой конкуренции. При этом наличие корреляций в модели без нужды усложняет анализ. Действительно, как мы отмечали выше, учет сильных корреляций в многочастичных системах в настоящий момент невозможен вне численных методов. Соответствующее программное обеспечение может создаваться и совершенствоваться годами, требуя усилий как физиков-теоретиков, так и специалистов по эффективным современным методам программирования. Даже в тех случаях, когда разработанный компьютерный код делается свободно доступным для всех желающих, освоение его с нуля может занять длительное время. В противовес такому подходу, для изучения конкуренции множественных состояний мы предлагаем

использовать модели в режиме слабого взаимодействия. Такой анализ был представлен в работе [4]. Выше мы изложили основные технические приемы и выводы этой статьи.

Что наличие множественных конкурирующих фаз означает для исследовательского процесса? Видимо, нужно согласиться с тем, что поиски единственного основного состояния МХ, хотя и интересны с академической точки зрения, не могут рассматриваться как окончательная цель. Необходимо помнить, что простые гамильтонианы типа ГХ явным образом пренебрегают множеством деталей, неизбежно присутствующих в реальных кристаллах. К таким деталям относится дальнедействующее кулоновское взаимодействие, взаимодействие между электронами и решеткой, наличие примесей и т.д. В ситуации, когда несколько термодинамических фаз, да еще и обладающих разной структурой, населяют низколежащую часть спектра, такие отброшенные поправки могут сыграть решающую роль в стабилизации какого-то конкретного состояния. Например, дальнедействующее взаимодействие повысит энергию любого неоднородного состояния по сравнению с однородными состояниями. Неоднородные фазы без определенной пространственной структуры (типа состояний классов I и II, представленных выше) могут предпочесть какую-то конкретную структуру, минимизирующую кулоновское взаимодействие. В такой ситуации приоритетной задачей должна стать не изнурительная и ресурсоемкая «охота» за единственным и неповторимым основным состоянием, а составление списка низколежащих фаз. С точки зрения сравнения теории и эксперимента такой список может оказаться полезнее знания об основном состоянии идеализированного модельного гамильтониана. Отметим также и следующее обстоятельство. Мы только что упомянули, что кулоновское дальнедействующее отталкивание будет повышать энергию неоднородных фаз по сравнению с однородными. С другой стороны, дефекты, пиннингуя спонтанно возникшие неоднородные структуры, могут понижать энергию именно неоднородных фаз. Это лишь два конкретных примера воздействия неучтенных поправок на конкуренцию состояний. По видимому, будет полезно расширить подобный анализ и разобраться с влиянием и других вкладов, не учтенных МХ, но присутствующих в реальных системах. С точки зрения чисто теоретического знания интересным представляется вопрос о происхождении описываемой конкуренции. Поскольку мы видим приближенное вырождение нескольких низколежащих многочастичных состояний, мы можем предположить, что за этим вырождением скрывается некая приближенная симметрия. Если эта гипотеза верна, то следующие два наблюдения, возможно, будут полезны в вопросе идентификации такой симметрии. Во-первых, эта симметрия полностью или частично разрушается дальнедействующим кулоновским взаимодействием. Во-вторых, симметрия также присутствует и в других моделях, необязательно решеточных. На последнее обстоятельство указано в работе [4].

Заканчивая обсуждение, хотелось бы напомнить основные тезисы работы. Мы рассматривали конкуренцию низколежащих состояний в модели Хаббарда. Опубликованные статьи, посвященные численному исследованию МХ в режиме сильного взаимодействия, дают достаточно оснований считать такую конкуренцию реально существующей особенностью гамильтониана Хаббарда с сильным взаимодействием. Подобную конкуренцию можно обнаружить и при слабом взаимодействии. В отличие от режима сильных корреляций, модели со слабым взаимодействием можно изучать аналитически или полуаналитически. Это существенно упрощает требования к исследовательскому инструментарию. Наличие нескольких фаз, разделенных лишь небольшой разницей энергий, требует пересмотра теоретических подходов к исследованию модельных гамильтонианов.

Список литературы

- [1] Schubin S., Wonsowsky S. On the Electron Theory of Metals // Proceedings of The Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. — 1934. — Vol. 145. — P. 159–180.
- [2] Corboz P., Rice T. M., Troyer M. Competing States in the t - J Model: Uniform d -Wave State versus Stripe State // Physical Review Letters. — 2014. — Jul. — Vol. 113. — P. 046402.
- [3] Variational Monte Carlo method for fermionic models combined with tensor networks and applications to the hole-doped two-dimensional Hubbard model / Zhao H.-H., Ido K., Morita S., and Imada M. // Physical Review B. — 2017. — Aug. — Vol. 96. — P. 085103.
- [4] Competition of spatially inhomogeneous phases in systems with nesting-driven spin-density wave state / Kokanova S. V., Maksimov P. A., Rozhkov A. V., and Sboychakov A. O. // Physical Review B. — 2021. — Aug. — Vol. 104. — P. 075110.
- [5] Solutions of the Two-Dimensional Hubbard Model: Benchmarks and Results from a Wide Range of Numerical Algorithms / LeBlanc J. P. F., Antipov A. E., Becca F., Bulik I. W., Chan G. K.-L., Chung C.-M., Deng Y., Ferrero M., Henderson T. M., Jiménez-Hoyos C. A., Kozik E., Liu X.-W., Millis A. J., Prokof'ev N. V., Qin M., Scuseria G. E., Shi H., Svistunov B. V., Tocchio L. F., Tupitsyn I. S., White S. R., Zhang S., Zheng B.-X., Zhu Z., and Gull E. // Physical Review X. — 2015. — Dec. — Vol. 5. — P. 041041.

HUBBARD MODEL SURPRISE: COMPETITION OF MULTIPLE LOW LYING ORDERED STATES

Rozhkov A.V.^{1*}, Sboychakov A.O.¹

¹ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia

* alex.vl.rozhkov@yandex.ru

Abstract

In this paper, we discuss the competition of low-lying ordered states in the spectrum of Hubbard model. Available numerical and analytical calculations performed in various regimes show unambiguously that for the Hubbard and similar Hamiltonians, there is a whole set of dissimilar non-superconducting low-lying states with extremely close eigenenergies. These states compete with each other for the opportunity to become the ground state of the system. We argue here that the parameters of this competition are such that the value of finding the single state with the lowest eigenenergy is very limited. Currently available results suggest the need for the re-evaluation of the role played by the Hubbard model (and other related simplified models) in theoretical studies of many-electron correlated systems. We also show that the weak interaction Hubbard model can be used as a convenient theoretical playground for studying such competition.

Key words: Hubbard model, ground state, doping, spin-density wave, phase separation, domain walls
