

Физический факультет
Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова



На правах рукописи



Антипов Андрей Евгеньевич

**Особенности флуктуационного нарушения
магнитного порядка в системах с сильными
электронными корреляциями**

01.04.09 – Физика низких температур

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

- 6 ОКТ 2011

Москва – 2011

Работа выполнена на кафедре квантовой электроники физического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент *Рубцов Алексей Николаевич*

Официальные оппоненты: кандидат физико-математических наук, доцент *Мазуренко Владимир Владимирович*
доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, заведующий сектором теории твердого тела *Арсеев Петр Иварович*

Ведущая организация: *Институт физики высоких давлений РАН*

Защита состоится « 20 » октября 2011 г. в 16 часов на заседании диссертационного совета Д.501.001.70 при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова по адресу: 119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 35, конференц-зал центра коллективного пользования физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Физического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Автореферат разослан « 19 » сентября 2011 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д. 501.001.70,
доктор физико-математических наук,
профессор



Плотников Г.С.

Общая характеристика работы

Диссертационная работа посвящена теоретическому исследованию особенностей магнетизма систем с сильными электронными корреляциями в случае наличия сильных флуктуаций спина и орбитального момента. Под системами с сильными корреляциями подразумеваются ансамбль многих частиц, свойства которого не могут быть описаны в рамках парадигмы элементарных возбуждений. Отсутствие явного малого параметра требует использования численных теоретических методов, интерполирующих между режимами, доступными для аналитического исследования. В системах с сильными электронными корреляциями таким методом является динамическая теория среднего поля[1]. Нелокальные корреляции электронов системы и многоорбитальный характер их взаимодействия являются основной трудностью данной теории в настоящий момент. Эти два вопроса являются предметом исследования данной работы.

Коррелированные электронные системы обладают интересными свойствами элементарных возбуждений при низких температурах, связанных с конкуренцией квантовой делокализации электронов на решетке и их локальным кулоновским взаимодействием. Следствием является структурное многообразие рассматриваемых веществ, сложность их фазовых диаграмм. В природе такие вещества являются соединениями переходных металлов с неспаренными валентными электронами в $3d$ и $4f$ оболочках (в отдельных случаях $5f$, сюда также можно отнести некоторые случаи p -оболочек в органических материалах).

Для рассматриваемых систем характерен ряд наблюдаемых эффектов. Наиболее известным из них является высокотемпературная сверхпроводимость в купратах. Большая часть современных магнетиков обладают сильными электронными корреляциями, поскольку наличие в них нескомпенсированного магнитного момента обусловлено неполным заполнением валентной оболочки в переходных металлах. В этой связи уместно упомянуть системы “тяжелых фермионов” и Кондо-решетки, а также эффект гигантского магнетосопротивления в множестве материалов, в том числе $\text{La}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}_3$ [2].

Теоретическое описание магнитных свойств систем с сильными электронными корреляциями крайне затруднено. С одной стороны, использование традиционных среднеполевых подходов, как, например, критерий Стонера приводит к существенной переоценке вероятности образования ферромагнит-

ного упорядочения. Магнитные моменты в системах с сильными электронными корреляциями не являются локализованными, поэтому модель Гейзенберга для описания магнитного упорядочения на решетке часто оказывается неприменимой. С другой стороны, сложившаяся среднеполевая схема изучения систем с сильными электронными корреляциями применима тогда, когда нелокальные корреляции в системе пренебрежимо малы (собственно-энергетическая функция не зависит от квазимпульса электрона), что существенно ограничивает описание решеточного магнитного упорядочения. Кроме того, необходимость использования численных методов вплоть до недавнего времени не давала возможности учитывать термовую структуру исследуемых систем, что в свою очередь приводило к невозможности описания таких эффектов, как орбитальное упорядочение в системе, а также служило источником ошибок при реалистических расчетах различных соединений. В данной работе применение метода дуальных фермионов [3], а также использование разработанной многопроцессорной версии алгоритма квантового метода Монте-Карло в непрерывном времени [4] позволило исследовать указанные проблемы.

Цель диссертационной работы состояла в теоретическом исследовании особенностей нарушения магнитного порядка в сильнокоррелированных электронных системах в случае наличия сильных спиновых флуктуаций, вызванных фрустрацией решетки, и изменения характеристик моттовского фазового перехода из металлического в антиферромагнитное состояние при наличии дополнительных орбитальных степеней свободы.

Актуальность работы определяется сочетанием фундаментальности исследованных в работе физических проблем, применением новейших методов численного моделирования и использования теоретических моделей, ранее недоступных для исследования.

Научная новизна результатов диссертации состоит в реализации расчетной схемы метода дуальных фермионов для модели Хаббарда на треугольной решетке, реализации многопроцессорной версии алгоритма метода квантового Монте-Карло в непрерывном времени для решения примесной модели Андерсона (СТ-QMC), изучения состояния спиновой жидкости в рамках семейства среднеполевых методов решения модели Хаббарда, расчета магнитной восприимчивости многоорбитальной модели Хаббарда, получения функции Грина и спектральной функции для гамильтониана с полной матрицей кулоновского взаимодействия.

Практическая значимость Результаты, изложенные в диссертации, обладают предсказательной силой и могут быть использованы для количественно точного моделирования экспериментально реализуемых систем - оксидов переходных металлов, оптических решеток, систем с тяжелыми фермионами, ВТСП-купратов итд.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

- Модель Хаббарда при полузаполнении на треугольной решетке в конечном интервале параметра U/t обладает фазой без дальнего магнитного порядка - спиновой жидкостью. Данная фаза характеризуется наличием локализованного магнитного момента и обладает меньшей полной энергией, чем металлическое и антиферромагнитное состояния.
- В формировании состояния спиновой жидкости важную роль играют корреляции синглетного типа, которые могут быть описаны в рамках метода дуальных фермионов.
- Метод дуальных фермионов является чувствительным по отношению к динамическим корреляциям в системе, в то время как статическое упорядочение может быть эффективно описано в рамках динамической теории среднего поля.
- Учет полной матрицы кулоновского взаимодействия приводит к изменению характеристик фазового перехода металл-изолятор в многоорбитальной модели Хаббарда: понижению температуры перехода при заданной величине кулоновского взаимодействия на каждом узле решетки и увеличению критического U при фиксированной температуре. Различие в температурах перехода становится более существенным при допировании системы электронами или дырками.
- Различная степень вырождения основного состояния полного гамильтониана и гамильтониана с взаимодействием плотность-плотность приводит к различию в характере металлических фаз: в первом случае в плотности состояний одночастичных возбуждений в двухорбитальной модели Хаббарда при полузаполнении присутствует центральный «кондовский» пик, во втором такого пика нет.

Апробация работы проходила на следующих конференциях:

1. SFB 668 International Workshop «Quantum transport in nanostructures», Гамбург, Германия, 8-10.10.2008 : А. Е. Antipov, А. N. Rubtsov. «Orbital spin liquid states on a triangular lattice».
2. VII Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», Троицк, 18.06.2009 : А.Е. Антипов, А.Н. Рубцов. «Orbital spin liquid states on a triangular lattice».
3. 1st International Workshop «New generation in strongly correlated electron systems-2010», Лансароте, Испания, 20-25.06.2010 : А.Е. Antipov, А.Н. Rubtsov. «Orbital spin liquid states and T-phase ordering on a triangular lattice».
4. Международная конференция «Realistic theories of correlated electrons in condensed matter», Россия, 01-08.08.2010 : А.Е. Antipov. «Single-particle properties of quantum spin liquid in Hubbard model at triangular lattice».
5. Advanced school and workshop «Developments and prospects in quantum impurity physics», Дрезден, Германия, 30.05 - 10.06.2011 : А.Е. Antipov. «Electron energy spectrum of the spin liquid state in a frustrated Hubbard model».

Материалы диссертации опубликованы в 2 печатных работах, из них 2 статьи в рецензируемых журналах [A1, A2].

Личный вклад автора Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения, приложения и библиографии общим объемом 118 страниц, из них 10 рисунков и 1 таблица. Список цитированной литературы составляет 117 наименований, включая публикации автора по теме диссертации.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе, являющейся обзорной, рассмотрены основные теоретические модели и методы, использующиеся для изучения систем с сильными электронными корреляциями: интегралы по траекториям, когерентные состояния фермионных операторов рождения и уничтожения, примесная модель Андерсона и решеточная модель Хаббарда, квантовый метод Монте-Карло, динамическая теория среднего поля (DMFT), метод дуальных фермионов (DF).

Во второй главе рассматривается роль спиновых флуктуаций в определении фазовой диаграммы фрустрированных систем. Особый интерес представляет случай, когда флуктуации спина настолько сильны, что они разрушают магнитное упорядочение. Показано, что на треугольной решетке синглетные корреляции электронов решетки приводят к образованию фазы без дальнего магнитного порядка - спиновой жидкости в конечной области параметров U/t . Исследована плотность состояний этой фазы, обсуждены значения полученных критических параметров.

Впервые подобный сценарий нарушения антиферромагнитного порядка предложил Ф. Андерсон [5, 6], рассмотрев случай модели Изинга на треугольной решетке с антиферромагнитным взаимодействием, действующим между соседними узлами решетки. Основное состояние в такой модели является макроскопически вырожденным, добавление в гамильтониан слагаемых гейзенберговского типа, ответственных за переворот спинов, приводит к формированию состояния жидкости спиновых синглетов, известного как состояние с резонансными валентными связями (RVB).

Дальнейшие работы в этой области, впрочем, не подтверждали гипотезу Андерсона. Основным состоянием классической модели Гейзенберга на треугольной решетке является неколлинеарная магнитная структура с углом между соседними спинами, равным 120 градусов [7]. Квантовая модель Гейзенберга обладает аналогичным решением, теоретические и расчетные результаты QMC и DMRG предсказывают также 120-ти градусное упорядочение.

Ситуация изменилась с открытием органических κ -ET₂X солей, которые

построены при помощи BEDT-TTF(ET) молекул, а X является одновалентным анионом. Такие соединения обладают треугольной решеткой, образованной димерами ET молекул с эффективной величиной обменного интеграла $t \approx 50meV$. Существуют экспериментальные доказательства, что RVB спиновая жидкость — это основное состояние *моттовского* диэлектрика: органической соли κ -(ET)₂Cu₂(CN)₃ [8]. По оценкам авторов оригинальной работы [8] система обладает одинаковым заполнением электронов и дырок, а величина матричного элемента кулоновского взаимодействия на узле составляет $U \approx 8.2t$. Для описания моттовских диэлектриков традиционно используют модель Хаббарда. Решеточная фрустрация является существенно нелокальной особенностью решетки, которую необходимо учесть при решении проблемы. В данной работе для рассмотрения корреляций синглетного типа (образующих ближний магнитный порядок) использовалось спин-поляризованное обобщение метода дуальных фермионов [3], позволяющий пертурбативно учитывать нелокальные поправки к результатам динамической теории среднего поля.

Для того чтобы вычислить энергетическую диаграмму треугольной решетки было произведено 2-3 серии независимых вычислений, состоявших из 20-30 DMFT итераций и последующих 15-25 DF итераций на решетке размера 32×32 . Использовалась первая ненулевая поправка к дуальной собственно-энергетической функции [3]. В работе применен метод квантового Монте Карло в непрерывном времени с разложением по величине кулоновского взаимодействия (CT-INT), для которого стохастическая погрешность становится существенной при больших значениях U . Полученные данные были усреднены, соответствующая статистическая погрешность построена на графиках. Спин-поляризованная диэлектрическая фаза построена при помощи вращения в спиновом пространстве, она соответствует неелевскому состоянию. Неполяризованная DMFT диэлектрическая фаза, обладая только локальными корреляциями, описывает парамагнитное состояние. Неполяризованная диэлектрическая DF фаза построена при помощи синглетной диаграммы для собственно-энергетической функции и, следовательно, является приближением состояния RVB-спиновой жидкости.

Зависимости средней энергии $\langle H + \mu N \rangle = \langle H \rangle + U/2$ и среднего квадрата магнитного момента $\langle m^2 \rangle$ на узел решетки как функции от U/t в интервале $8 < U/t < 14$ при $\beta t = 10$ представлены на рисунках 1 и 2 соответственно. Были рассчитаны отдельные кривые для спин-поляризованного и неполяри-

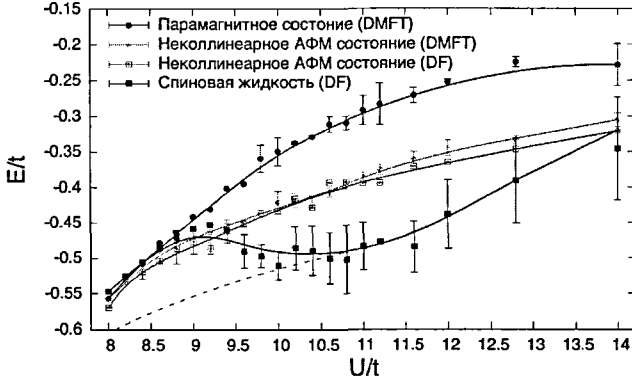


Рис. 1. Зависимость полной энергии от параметра U при $\beta t = 10$. Были получены различные кривые для фазовых переходов металл-спиновая жидкость и металл-неколлинеарный неелевский диэлектрик. Спиновая жидкость обладает меньшей энергией в интервале $9.5 < U/t < 13$. При больших значениях U энергии диэлектрических состояний становятся близкими. Фазовый переход из металлического в состояние спиновой жидкости происходит при $U/t \approx 9.6 \pm 0.2$, значение критического U/t для моттовского перехода в 120° неелевское состояние принадлежит интервалу $8.25 - 9.4 \pm 0.2$. Штрихованная линия соответствует монотонной интерполяции кривой для энергии спиново-жидкостного состояния.

зованных случаев - таким образом были отдельно рассмотрены фазовые переходы металл- 120° антиферромагнетик и металл-спиновая жидкость. Фазовый переход в состояние спиновой жидкости происходит при $U/t = 9.6 \pm 0.2$, гистерезис в области $U/t = 8.25 - 9.4 \pm 0.2$ означает фазовый переход I рода в неколлинеарное антиферромагнитное состояние.

На рис. 1 обнаруживается существенная разница между результатами DMFT и метода дуальных фермионов в случае спиновой жидкости. Нелокальные корреляции оказываются сильными в этом состоянии. Без учета DF-поправок эта фаза не может быть основным состоянием во всем изученном интервале U и является металлической вплоть до $U/t < 11.2 \pm 0.2$. Это согласуется с предыдущими DMFT-расчетами. Первая отличная от нуля поправка к дуальной собственно-энергетической функции снижает общую энергию неупорядоченного диэлектрического состояния, делая его наиболее вероятным в области $9.5 < U/t < 13$. Дуальные поправки в 120° антиферромагнитной фазе малы и не меняют ее энергии. При больших значениях параметра U/t кривые полной энергии неелевского и спиново-жидкостного состояний

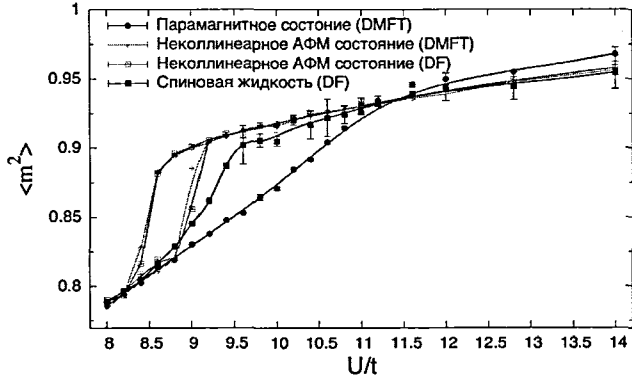


Рис. 2. Зависимость среднего квадрата магнитного момента одного узла решетки от хаббардовского U при $\beta t = 10$. С увеличением U формирование магнитных моментов происходит вначале для 120° антиферромагнитного состояния при $U/t = 8.25 - 9.4 \pm 0.2$. Гистерезис на кривой для этого состояния означает фазовый переход I рода. Формирование магнитных моментов в спиново-жидкостном состоянии происходит при критическом U моттовского перехода $U = 9.6 \pm 0.2$.

становятся близкими и не могут быть разделены в рамках статистической погрешности метода. Тем не менее, поскольку дуальные поправки малы при больших значениях U [3], можно ожидать, что кривые энергий DMFT и DF-состояний совпадут, а именно 120° антиферромагнитное состояние основным.

Рис. 2 иллюстрирует образование магнитных моментов в изучаемых фазах с увеличением U/t . Видно, что в диэлектрической области и спиновая жидкость, и 120° антиферромагнитное состояния обладают сформировавшимися магнитными моментами, отличаясь по построению типом магнитного упорядочения. Включение дуальной поправки в случае неупорядоченного состояния существенно ускоряет образование магнетизма в области моттовского перехода. Таким образом, важна роль синглетных корреляций, образующих состояние спиновой жидкости. В случае неколлинеарной антиферромагнитной фазы дуальная поправка мала, а магнитное упорядочение образуется при меньшем значении U . Это означает, что статическое спиновое упорядочение может быть эффективно описано уже на уровне динамической теории среднего поля.

Семейство кривых для плотности состояний $N(E)$ сильнокоррелирован-

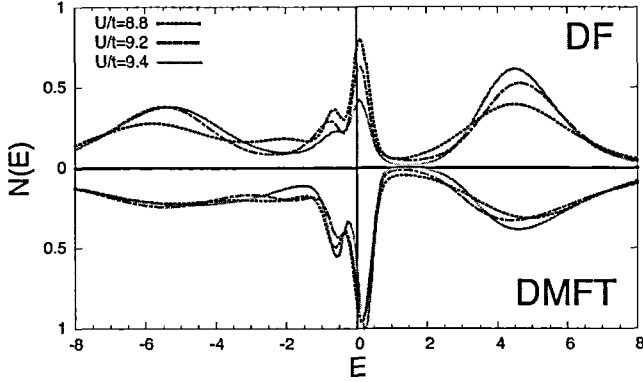


Рис. 3. Плотность состояний $N(E)$ металлической фазы при $\beta t = 10$ и $U/t = 8.0, 8.4, 8.56$. Верхняя часть графика соответствует решению, полученному при помощи метода дуальных фермионов, нижняя часть получена в рамках динамической теории среднего поля.

ного металлического состояния изображено на рис. 3. Кривые получены при помощи аналитического продолжения температурной функции Грина при помощи метода максимальной энтропии. Такая процедура не позволяет различить особенности спектра, однако воспроизводит его основные свойства и обладает хорошей точностью в области энергий около уровня Ферми. На рис. 3 видна типичная для металлической части фазовой диаграммы трехпиковая структура — две хаббардовские зоны и центральный “кондовский” квазичастичный пик [1]. Такая структура наблюдается как для результатов, полученных при помощи динамической теории среднего поля, так и для результатов, полученных методом дуальных фермионов. Есть существенная разница в форме центрального пика. Плотность состояний на уровне Ферми в локальной среднеполевой теории зафиксирована правилом сумм Фриделя, т.е. в металлической части фазовой диаграммы $N(E_f)$ должно быть равно точно такому же значению, что и для системы свободных электронов ($U = 0$) [1]. В методе дуальных фермионов правило сумм может не выполняться: нелокальные корреляции уменьшают высоту центрального пика с увеличением U .

Графики плотности состояний спиновой жидкости и 120° антиферромагнитного состояния изображены на рис. 4. Спектральная щель в случае спиновой жидкости шире, чем аналогичная щель неелевской фазы. Это соответ-

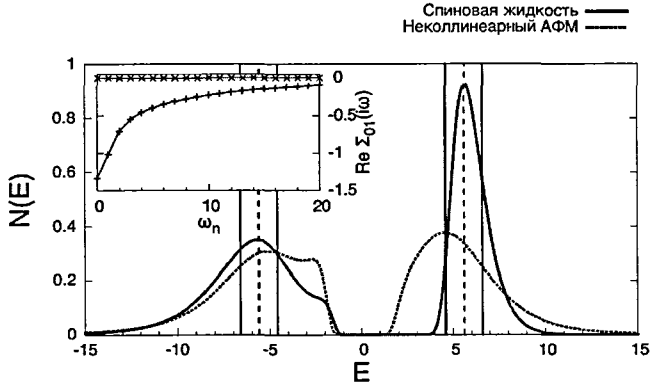


Рис. 4. Плотность состояний $N(E)$ диэлектрической фазы при $\beta t = 15$ и $U/t = 11.2$ спиново-жидкостного и неколлинеарного антиферромагнитного состояний. Спектр 2х-атомного синглета с теми же значениями U и t изображен черными вертикальными прямыми. Серые прямые обозначают значение $\pm U/2$. На вкладке изображен график зависимости действительной части собственно-энергетической функции от значения мацубаровских частот для случая спиновой жидкости (черная кривая). Аналогичная величина для неколлинеарного антиферромагнитного состояния (красная кривая) пренебрежимо мала, а нелокальная часть собственно-энергетической функции в динамической теории среднего поля всегда равна нулю.

ствуует RVB-картине диэлектрического основного состояния без дальнего магнитного порядка как жидкости, сформированной локальными синглетами [5]. Действительно, спектр такого состояния должен быть унаследован от спектра синглета - изолированного кластера, состоящего из двух спинов. Чтобы подчеркнуть это утверждение, на рис. 4 черными линиями изображен спектр такого кластера с тем же значением t . Из вкладки к рис. 4 можно сделать вывод, что нелокальные поправки к собственно энергетической функции между ближайшими соседями решетки в случае спиновой жидкости намного больше, чем для неелевского состояния и именно они определяют низкочастотный энергетический спектр. Это говорит о важности *нелокальных динамических флуктуаций* в случае спиновой жидкости. Для неелевской фазы, напротив, нелокальность состоит в *статическом* магнитном упорядочении и потому эффективно описывается уже в рамках динамической теории среднего поля. Это соответствует выводам к рис. 1 и 2.

Поправки к собственно-энергетической функции, полученные при помо-

щи метода дуальных фермионов существенны при промежуточных значениях параметра U/t , который по порядку величины равен ширине зоны. График, полученный при учете только первой ненулевой диаграммы, соответствует представлению о спиновой жидкости как состояния, которое может наблюдаться в конечном интервале параметра U/t . Металлическое состояние при этом наблюдается при меньших значениях U , а 120° антиферромагнитная диэлектрическая фаза — при больших. Это соответствует известным литературным данным. Существует расхождение в значениях U_c - оба полученных значения являются переоцененными. При получении вышеизложенных результатов были сделаны некоторые предположения и допущения. Они должны быть обсуждены в контексте фазовой диаграммы исследуемой модели. Основные допущения состоят в конечности температуры и учете только первой ненулевой поправки в методе дуальных фермионов.

На рисунке 2 показано, что включение синглетных поправок существенно влияет на формирование магнетизма - дуальные поправки существенно понижают критическое значение U . Расчеты были сделаны используя только первую дуальную диаграмму, и, ожидается, что последующие поправки будут сдвигать величину U_{c1} в сторону еще меньших значений. Это проиллюстрировано штриховой линией на рис. 1. Предполагается, что основное состояние спиновой жидкости будет продолжено в область меньших U по сравнению с текущим значением $U_{c1} = 9.6$, и 120° антиферромагнитное состояние появится после спиновой жидкости. Для количественного описания фазовой диаграммы необходимо включить ряд диаграмм, таких как лестничные, которые могут привести к формированию связанных синглетных состояний.

Верхняя граница фазы спиновой жидкости $U_{c2} \geq 14$ выглядит переоцененной из-за конечности температуры. Действительно, тепловые флуктуации всегда уничтожают магнитное упорядочение. Наиболее ярким примером является наполовину заполненная решетка Хаббарда, где упорядоченное основное состояние реализуется при любых (даже бесконечно малых) U , из-за perfect nesting - резонансного положения поверхности Ферми в первой зоне Бриллюэна. Однако расчеты методом динамической теории среднего поля при относительно небольшой температуре $\beta = 20$ показывают разрушение локальными флуктуациями магнитного состояния при $U \lesssim 1$. Говоря об энергетической зависимости, представленной на рисунке 1, ожидается, что понижение температуры должно сдвинуть энергию 120° антиферромагнитного состояния вниз.

Результаты второй главы опубликованы в работе [A1].

В третьей главе исследуется роль многоорбитальной структуры валентной оболочки систем с сильными электронными корреляциями в определении характеристик фазового перехода металл-изолятор. При помощи расчета статической магнитной восприимчивости показано, что учет полной матрицы кулоновского взаимодействия приводит к понижению температуры перехода фазового перехода из парамагнитного в упорядоченное состояние. Трехкратное вырождение основного состояния двухорбитальной модели Хаббарда приводит к появлению при конечной температуре Кондо-пика в плотности состояний, а также к увеличению значения критического U , что согласуется с данными, полученными методом численной ренормализационной группы (NRG) для случая нулевой температуры [9].

Эффекты, связанные с орбитальными флуктуациями, играют важную роль в физике систем с сильными электронными корреляциями. Наличие дополнительных степеней свободы валентных электронов приводит к появлению новых механизмов ферромагнетизма - упорядочения одновременно спина и орбитального момента валентных электронов. Варьирование плотности состояний или чисел заполнения валентных электронов в зависимости от проекции орбитального момента приводит к образованию нового типа квантового фазового перехода - орбитально зависящего моттовского перехода.

Учет полной матрицы кулоновского взаимодействия необходим для количественного описания свойств систем с сильными электронными корреляциями. Существовавшие до недавнего времени алгоритмы расчета примесной задачи динамической теории среднего поля [1] могли рассматривать только взаимодействия вида плотность-плотность, имеющие диагональный вид в пространстве кубических гармоник, что приводило, в частности, к двукратному завышению рассчитанной температуры Кюри в Ni относительно экспериментально установленной величины [10]. Учет недиагональных матричных элементов в общем случае приводил к экспоненциальному увеличению времени расчета. Появление алгоритмов метода квантового Монте-Карло в непрерывном времени позволило решить эту проблему [11].

Многозонная (двух- или трехзонная) модель Хаббарда в базе кубических гармоник имеет вид:

$$\hat{H} = -t \sum_{(i,j),\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i\sigma}) - \mu \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + \sum_i \hat{H}_i^{\text{int}} \quad (1)$$

$$\hat{H}^{\text{int}} = \frac{U}{2} \sum_{\alpha\sigma} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha\bar{\sigma}} + \frac{U-2J}{2} \sum_{\alpha \neq \alpha', \sigma} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha'\bar{\sigma}} + \frac{U-3J}{2} \sum_{\alpha \neq \alpha', \sigma} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha'\sigma} - \frac{J}{2} \sum_{\alpha \neq \alpha', \sigma} (c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\alpha'\bar{\sigma}}^\dagger c_{\alpha'\sigma} c_{\alpha\bar{\sigma}} + c_{\alpha'\sigma}^\dagger c_{\alpha'\bar{\sigma}}^\dagger c_{\alpha\sigma} c_{\alpha\bar{\sigma}}). \quad (2)$$

Индексы α, α' пробегают номер гармоники, σ означает проекцию спина. Первые 3 члена в формуле (2) описывают взаимодействие типа плотность-плотность. Недиagonalный вклад от последних двух членов в формуле (2) существенно меняет свойства матрицы кулоновского взаимодействия: в случае полного гамильтониана, обладающего вращательной симметрией, основное состояние полузаполненной двухорбитальной модели является трехкратно вырожденным спиновым триплетом, тогда как в случае взаимодействия вида плотность-плотность в основном состоянии присутствуют только два состояния с коллинеарным направлением спинов. В результате в плотности состояний, найденной при помощи метода численной ренормализационной группы, при нулевой температуре в первом случае обнаруживается Кондо-пик, тогда как во втором случае такого пика нет [9]. Использование квантового метода Монте-Карло позволяет исследовать свойства системы при конечных температурах, что дает возможность получить термодинамические характеристики системы. В данной работе, наряду с получением одно-электронных свойств системы, изучается влияние типа матрицы кулоновского взаимодействия в двух- и трехорбитальной моделях Хаббарда на температуру перехода из парамагнитного в упорядоченное магнитное состояние.

Для того, чтобы разделить роль эффектов многоорбитальности и нелокальности, исследование проведено на решетке Бете бесконечной размерности. В этом случае, нелокальные корреляции отсутствуют, и решение, полученное в рамках динамической теории среднего поля, является точным. Условие самосогласования динамической теории среднего поля на такой решетке имеет вид:

$$\Delta_{\omega\sigma} = t^2 g_{\omega\bar{\sigma}},$$

где для изучения антиферромагнитного упорядочения на решетке может быть введена спиновая поляризация в эффективном поле $\sigma \neq \bar{\sigma}$. Для каждого набора параметров (U, t, β, H) функция Грина определялась итеративно. Сходимость схемы наблюдалась после ≈ 5 итераций, всего для каждого набора параметров проводилось 10 итераций. Статическая магнитная восприимчивость определяется при помощи варьирования системы слабым внешним

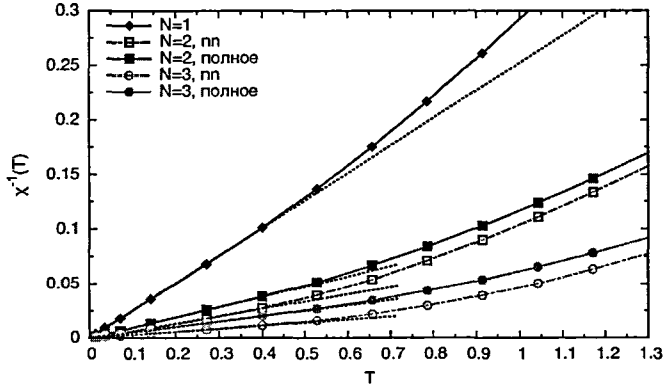


Рис. 5. Графики зависимости обратной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ одиночного хаббардовского атома, описываемого (2) при $U = 3.6, J = 1$, для разных размерностей валентной орбитали (1, 2, 3). Константы Кюри C определяются углом наклона прямых в области $T < 0.6$ к оси $\chi^{-1} = 0$. Полученные значения: $C_{N=1} = 0.25$, $C_{N=2}^{\text{full}} = 0.66$, $C_{N=2}^{\text{nn}} = 0.94$, $C_{N=3}^{\text{full}} = 1.25$, $C_{N=3}^{\text{nn}} = 2.21$.

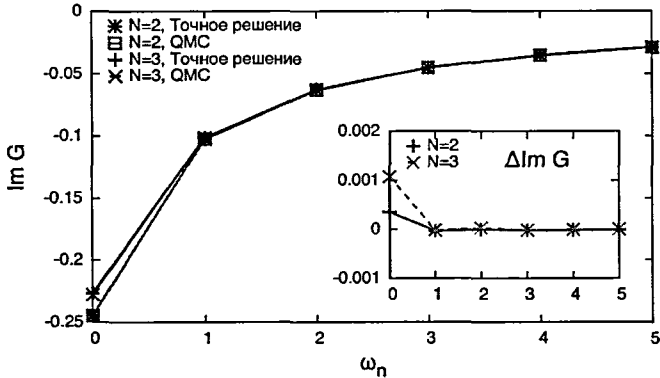


Рис. 6. График зависимости мнимой части функции Грина от значения мадубаровской частоты, рассчитанные при помощи методов точной диагонализации и квантового метода Монте-Карло для двух- и трехорбитального одиночного хаббардовского атома для $\beta = 1, U = 3, J = 0.8$. На врезке изображена разница между кривыми.

магнитным полем :

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_{H \rightarrow 0} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \langle n_{\uparrow} - n_{\downarrow} \rangle}{\partial H} \Big|_{H \rightarrow 0}$$

Температура перехода определялась из интерполяции линейного участка температурной зависимости обратной статической магнитной восприимчивости.

В начале рассмотрен случай $\Delta_{\omega\sigma} = 0$ одиночного атома, описываемого гамильтонианом (2). Термодинамические характеристики такой системы можно получить, не прибегая к квантовому методу Монте-Карло, а используя точную диагонализацию гамильтоновой проблемы. На рис. 5 изображено семейство кривых обратной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ одиночного атома для разных размерностей валентной орбитали ($N = 1, 2, 3$) при $U/t = 3.6, J = t$. Кривые состоят из двух линейных участков вида $\chi = \frac{C}{T}$. В низкотемпературной области $U \gg T$ значение константы Кюри C зависит от степени вырождения триплетного основного состояния, которое определяется правилом Хунда. Для случая инвариантной относительно операций поворота U -матрицы (2) константа Кюри имеет вид: $C = \mathbf{S}(\mathbf{S} + 1)/3 = N(N/2 + 1)/6$. В высокотемпературной области в обоих случаях $C_{T \gg U} = C_{T \ll U}^{\text{full}}/2$, что соответствует литературным данным. Необходимо отметить изменение константы Кюри в низкотемпературной области, которое происходит при учете только диагональных членов матрицы кулоновского взаимодействия: с 0.66 до 0.94 (42%) в двухорбитальном случае, с 1.25 до 2.21 (78%) в трехорбитальном случае. На рис. 6 приведены результаты сравнительных тестовых QMC расчетов функции Грина для одиночного атома, которые показали хорошее совпадение с результатами точной диагонализации.

На рис. 7 представлена зависимость обратной магнитной восприимчивости двухзонной модели Хаббарда на решетке Бете от температуры при $U/t = 4, J = t$ для случаев учета полной матрицы кулоновского взаимодействия и только ее диагональной части. Фазовый переход в обоих случаях происходит при величине температуры 0.4 – 0.5. При повышении температуры статическая магнитная восприимчивость системы в парамагнитной области принимает вид закона Кюри-Вейсса. Поправка к температуре Нееля от учета полной матрицы взаимодействия в обоих случаях составляет $\approx 15\%$.

Существенное отличие в поведении кривых намагниченности обнаруживается в изучаемой модели вдали от полузаполнения. На рис. 8 исследован случай $U/t = 8, J = 1.2t$ при заполнении $n = 1$ в двухорбитальной и $n = 2$ в трехорбитальной моделях. В случае заполнения $n = 1$ среднее значение

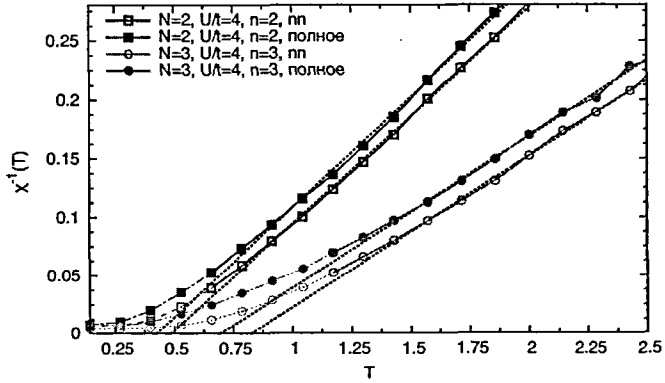


Рис. 7. Графики зависимостей обратной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ от температуры для двух- и трехорбитальной модели Хаббарда на решетке Бете при полузаполнении при $U/t = 4, J = t$. Пунктирные прямые - интерполяция линейных участков обеих кривых в металлической области. Температура Нееля для двухорбитальной модели равна $T_{N=2}^{\text{full}} = 0.43$ в случае полной U -матрицы и $T_{N=2}^{\text{nn}} = 0.49$ в случае взаимодействия плотность-плотность. В трехорбитальном случае $T_{N=3}^{\text{full}} = 0.83$ и $T_{N=3}^{\text{nn}} = 0.7$.

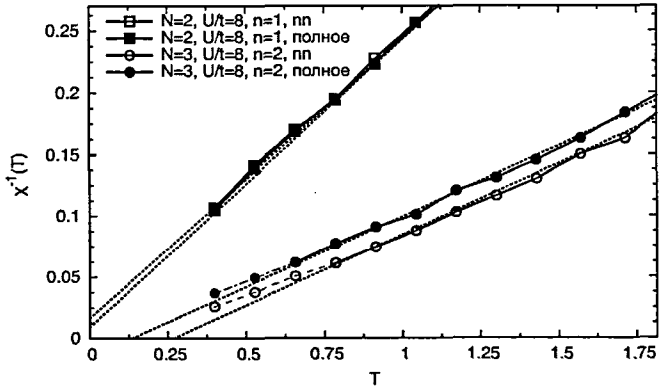


Рис. 8. Графики зависимостей обратной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ от температуры для двух- и трехорбитальной моделей Хаббарда на решетке Бете при $U/t = 8, J = t$ при заполнении $n = 1$ и $n = 2$ соответственно. Для случая $n = 1$ температуры Нееля и константа Кюри в случае полной матрицы взаимодействия и взаимодействия вида плотность-плотность совпадают, тогда как в трехорбитальной модели при $n = 2$ полученные температуры перехода различаются в два раза.

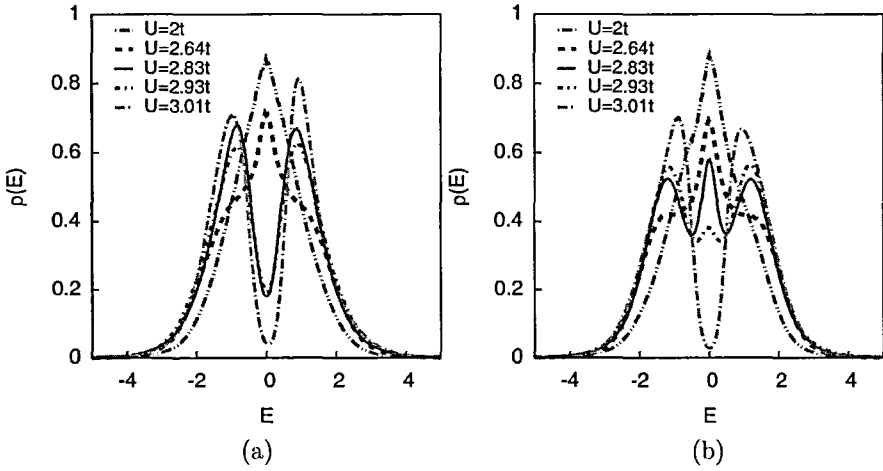


Рис. 9. Семейство графиков плотности состояний двухорбитальной модели Хаббарда на бесконечномерной решетке Бете при полузаполнении $n = 2$ для взаимодействия плотность-плотность (а) и полной матрицы кулоновского взаимодействия (б).

недиагональных операторов парного переброса и парного переворота спинов (последних двух членов в формуле (2)) оказывается равным 0, и кривые намагниченности в обоих исследуемых случаях совпадают. В случае $n = 2$ при тех же параметрах в трехзонной модели указанные два процесса являются эффективными, что приводит к уменьшению температуры перехода в два раза.

На рис. 9 изображено семейство плотностей состояний в двухзонной модели при $\beta t = 5$, $J = U/4$. Обнаружено, что учет полной матрицы взаимодействия приводит к повышению критического U , а фазовый переход происходит с образованием центрального кондовского пика в плотности состояний. В случае гамильтониана с матрицей взаимодействия вида плотность-плотность такого пика нет.

Обнаруженный эффект понижения критической температуры аналогичен изменению критических параметров в модели Изинга при добавлении слабых гейзенберговского типа. Разница между полученными температурами перехода в антиферромагнитное состояние при полузаполнении для решетки Бете, равная $\sim 15\%$, меньше, чем аналогичная ошибка в 1.5–2 раза в работе [10], и столь существенное отклонение от экспериментально найденного значе-

ния связано с нелокальными корреляциями, вызванными решеткой. Однако при изменении заполнения системы вклад от взаимодействия вида плотность-плотность оказывается не столь доминирующим, что делает учет недиагональных компонент матрицы кулоновского взаимодействия необходимым. Отметим, что в работе [12] добавление недиагональных членов в матрицу взаимодействия в рамках алгоритма Хирша-Фая при заполнении $n = 1.25$ в двухорбитальной модели Хаббарда приводит к смене знака температуры Кюри, т.е. к разрушению ферромагнитного состояния. Рассмотренный эффект будет наиболее заметным в случае рассмотрения полной пятиорбитальной валентной d -оболочки, количество вариантов заполнения которой является большим по сравнению с рассмотренными случаями двух- и трехорбитальной моделей. Рассмотрение таких задач является доступным для современных QMC -алгоритмов.

Результаты третьей главы опубликованы в работе [A2].

В заключении изложены выводы к диссертационной работе.

В приложении А приведен вывод гамильтониана кулоновского взаимодействия электронов многозонной валентной орбитали в представлении вторичного квантования: при помощи явного вида оператора кулоновского взаимодействия и атомных волновых функций определены и классифицированы матричные элементы взаимодействия в фоковском пространстве. Рассмотрены случаи s, p и d -орбиталей.

Основные результаты и выводы диссертации

- Исследована роль нелокальных корреляций в определении фазовой диаграммы модели Хаббарда на треугольной решетке. Исследование проводилось численно, методом дуальных фермионов. Установлено, что при температуре $T = 0.1t$ учет динамических синглетных корреляций существенно понижает энергию изоляторного состояния без дальнего магнитного порядка и не изменяет энергию антиферромагнитного состояния.
- Обнаружена область $9.6 < U/t < 14$ параметров модели Хаббарда на треугольной решетке при полузаполнении, в которой неколлинеарный антиферромагнитный порядок разрушается при температуре $T = 0.1t$, в результате чего образуется фаза без дальнего магнитного упорядо-

чения — спиновая жидкость. Данная фаза характеризуется наличием локализованного магнитного момента и обладает меньшей полной энергией, чем металлическое и антиферромагнитное состояния.

- Показано, что спектральная функция спиновой жидкости при температуре $T = 0.067t$ имеет синглетный характер, что делает ее энергетическую щель шире, чем в антиферромагнитном случае.
- Исследована зависимость магнитной восприимчивости от температуры в двухорбитальной и трехорбитальной модели Хаббарда на решетке Бете с помощью динамической теории среднего поля. Обнаружено, что при $U/t = 4$, $J = t$ при полузаполнении в случае наличия вращательной симметрии примесного гамильтониана температура Нееля понижается на $\sim 15\%$ по сравнению со случаем гамильтониана взаимодействия вида плотность-плотность. При $U/t = 8$, $J = 1.2t$ в трехорбитальной модели при заполнении $n = 2$ аналогичное отличие температур перехода является двукратным, а в двухорбитальной модели при заполнении $n = 1$ температуры перехода в обоих случаях совпадают.
- Установлено, что в двухорбитальной модели Хаббарда различная степень вырождения основного состояния полного гамильтониана и гамильтониана с взаимодействием плотность-плотность приводит к принципиальному различию в характере металлических фаз: в первом случае в плотности состояний одночастичных возбуждений в двухорбитальной модели Хаббарда при полузаполнении присутствует центральный «кондовский» пик, во втором такого пика нет.
- Показано, что при $\beta t = 5$ учет недиагональных членов в гамильтониане взаимодействия в двухорбитальной модели Хаббарда при полузаполнении приводит к повышению экспериментально наблюдаемой величины критического хаббардовского U , при котором происходит фазовый переход Мотт-Хаббарда.

Список публикаций

- A1. Antipov A. E., Rubtsov A. N., Katsnelson M. I., Lichtenstein A. I. Electron energy spectrum of the spin-liquid state in a frustrated Hubbard model // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 83, no. 11. P. 115126.
- A2. Антипов А. Е., Алейников М. С., Анисимов В. И. Роль вращательной симметрии в магнетизме многозонных моделей // Письма в ЖЭТФ. 2011. Том. 94, вып. 2. с. 130–133.

Цитированная литература

1. Kotliar G., Savrasov S. Y., Haule K. et al. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory // Reviews of Modern Physics. 2006. Vol. 78, no. 3. P. 865.
2. Hewson A. The Kondo Problem to Heavy Fermions. New York, N.Y.: Cambridge University Press, 1993.
3. Rubtsov A. N., Katsnelson M. I., Lichtenstein A. I. Dual fermion approach to nonlocal correlations in the Hubbard model // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 77, no. 3. P. 033101.
4. Rubtsov A. N., Savkin V. V., Lichtenstein A. I. Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72, no. 3. P. 035122.
5. Anderson P. W. Resonating valence bonds: A new kind of insulator? // Materials Research Bulletin. 1973. Vol. 8, no. 2. Pp. 153–160.
6. Fazekas P., Anderson P. W. On the ground state properties of the anisotropic triangular antiferromagnet // Philosophical Magazine. 1974. Vol. 30, no. 2. Pp. 423 – 440.
7. Katsura S., Ide T., Morita T. The ground states of the classical heisenberg and planar models on the triangular and plane hexagonal lattices // Journal of Statistical Physics. 1986. — 02. Vol. 42, no. 3. Pp. 381–404.

8. Shimizu Y., Miyagawa K., Kanoda K. et al. Spin Liquid State in an Organic Mott Insulator with a Triangular Lattice // *Phys. Rev. Lett.* 2003. Vol. 91, no. 10. P. 107001.
9. Pruschke T., Bulla R. Hund's coupling and the metal-insulator transition in the two-band Hubbard model // *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems.* 2005. Vol. 44. Pp. 217–224.
10. Lichtenstein A. I., Katsnelson M. I., Kotliar G. Finite-Temperature Magnetism of Transition Metals: An ab initio Dynamical Mean-Field Theory // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 87, no. 6. P. 067205.
11. Gull E., Millis A. J., Lichtenstein A. I. et al. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models // *Rev. Mod. Phys.* 2011. Vol. 83, no. 2. Pp. 349–404.
12. Sakai S., Arita R., Held K., Aoki H. Quantum Monte Carlo study for multi-orbital systems with preserved spin and orbital rotational symmetries // *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 74, no. 15. P. 155102.

Подписано в печать: 18.09.2011

Объем: 1.5 усл. печ. л.

Тираж: 100 экз. Заказ № _____

Отпечатано в типографии "Реглет"
119526, г. Москва, пр-т Вернадского, 39
(495) 363-78-90; www.reglet.ru