Ближний порядок в сильно коррелированных системах (вариационный подход)

Ю.Б.Кудасов[*], Р.В.Козабаранов

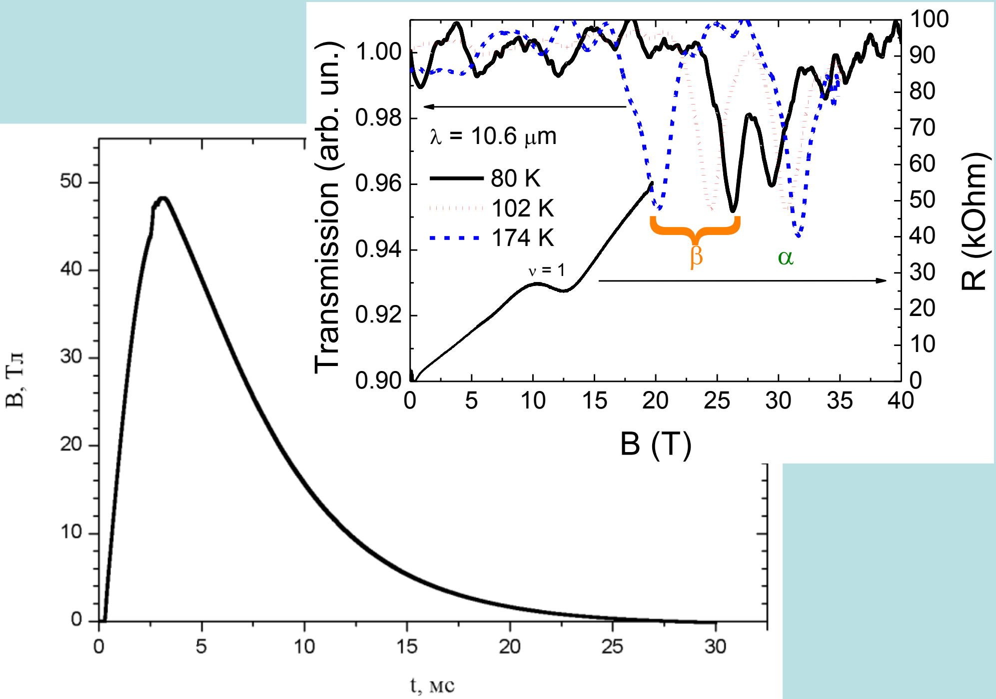
Лаборатория сильных магнитных полей
Саровский физико-технический институт НИЯУ «МИФИ»
6, ул. Духова, г.Саров, Нижегородская обл., 607186, Россия

Российский федеральный ядерный центр – ВНИИЭФ
37, пр. Мира, г.Саров, Нижегородская обл., 607188, Россия

*** yu_kudasov@yahoo.com**

Лаборатория сильных магнитных полей СарФТИ НИЯУ МИФИ

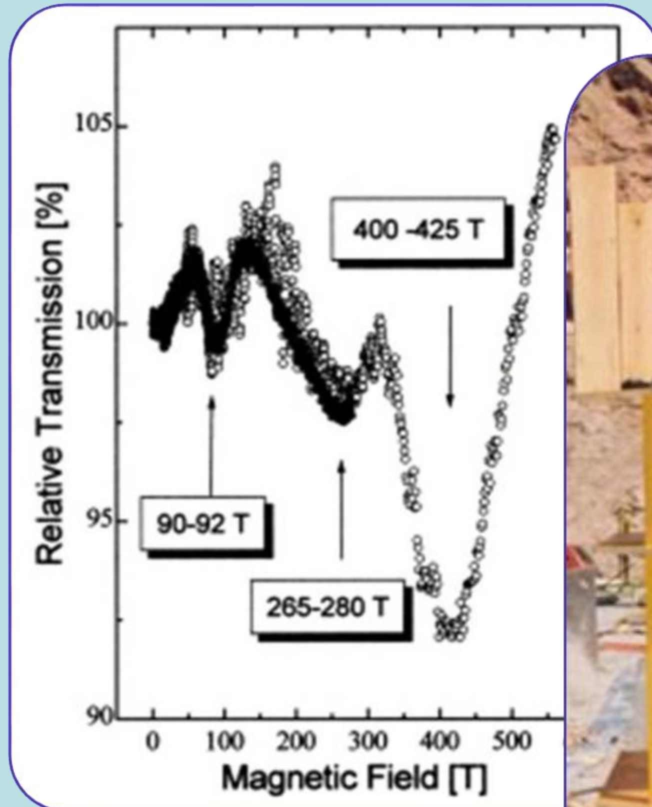
Циклотронный резонанс в гетероструктурах HgCdTe



50-Тл соленоид

Лаборатория сверхсильных магнитных полей РФЯЦ-ВНИИЭФ

Циклотронный резонанс в кубическом GaN p-типа



Генератор МК-1
рекордные магнитные поля

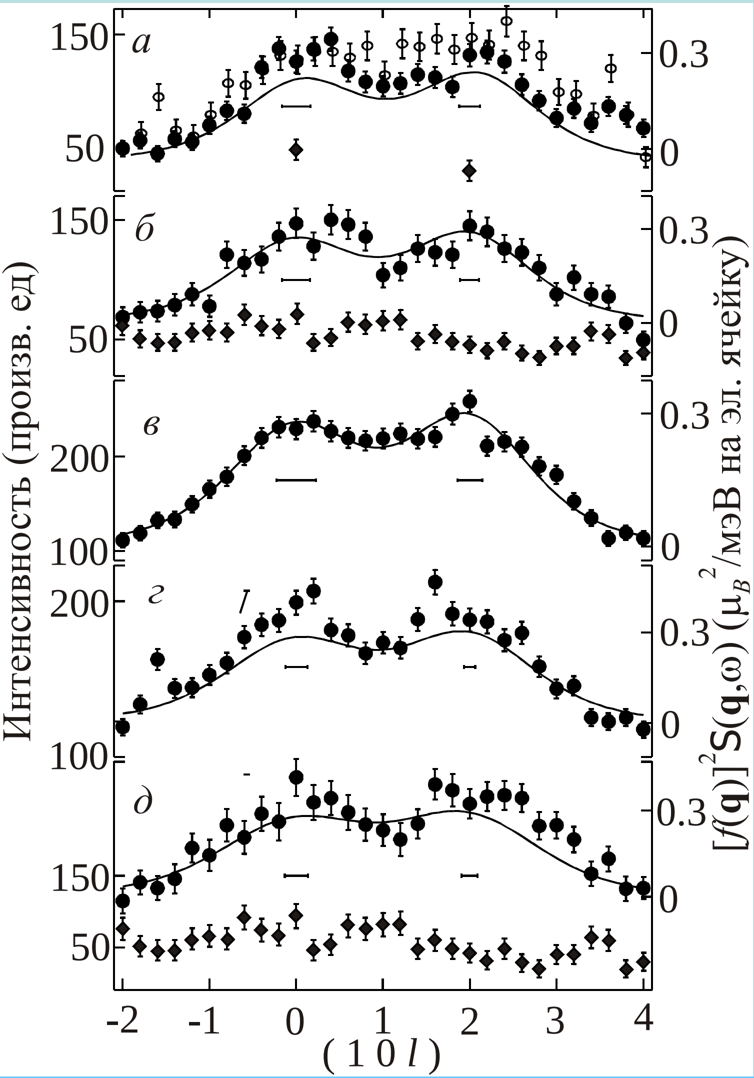
План доклада

1. Введение (наблюдение ближнего порядка, методы расчета сильно коррелированных ферми-систем)
2. Пробная волновая функция Гуцвиллера, энергия основного состояния, спектр возбуждений
3. Нелокальные пробные волновые функции
4. Ближний порядок в модели Хаббарда и Кондо-решетках
5. Низкоразмерные магнитные системы
6. Заключение

Наблюдение ближнего порядка
(сильно коррелированные ферми-системы)

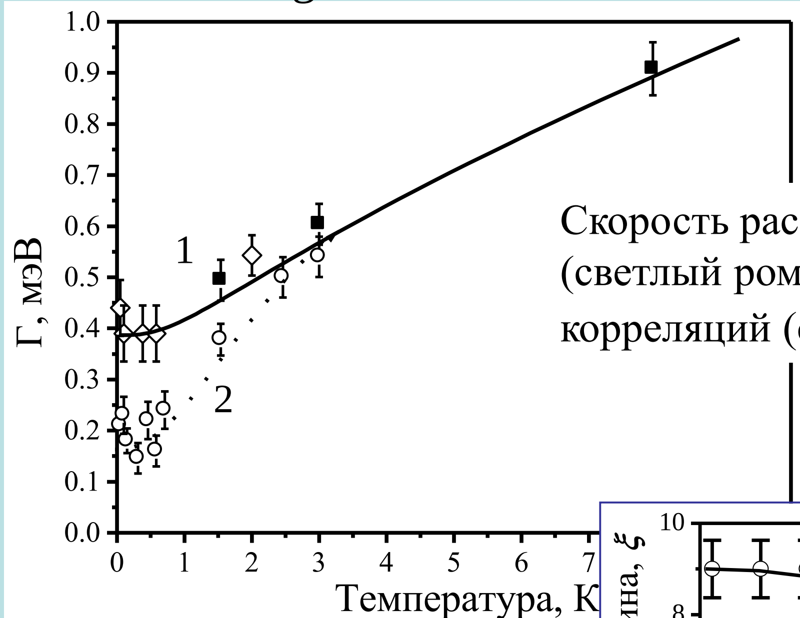
V_2O_3

W.Bao et al. *PRB* **58** 12727 (1998)

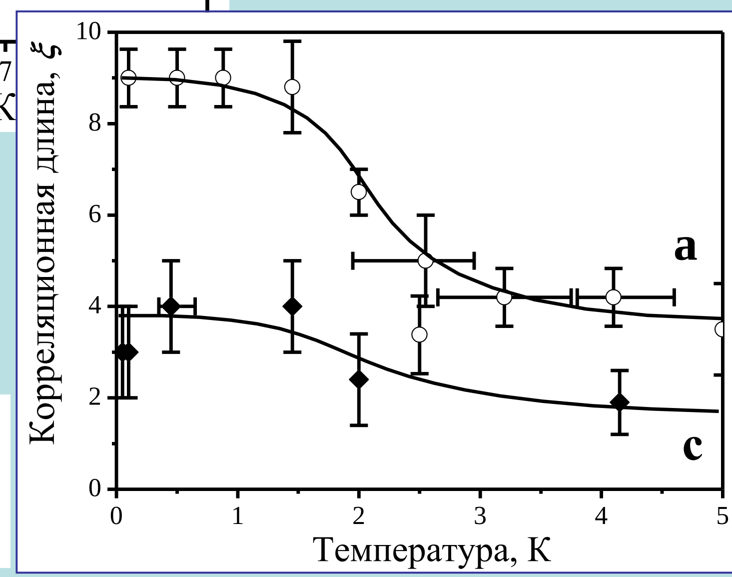


$CeCu_6$

J Rossat-Mignod et al. *JMMM* **76&77** 376 (1988)

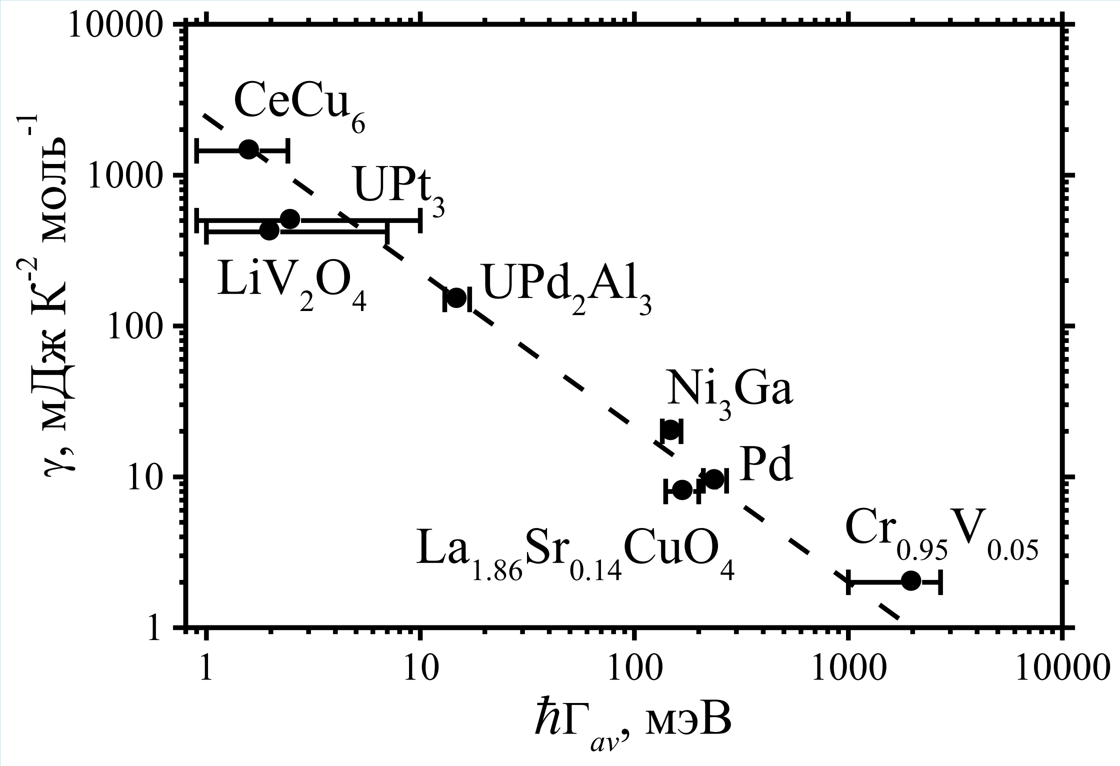


Скорость распада внутриузельных Γ_{SS} (светлый ромб) и межузельных Γ_{IS} корреляций (светлый кружок)



Корреляционная длина вдоль кристаллографических осей **a** и **c**

Константа Зоммерфельда как функция усредненного времени релаксации

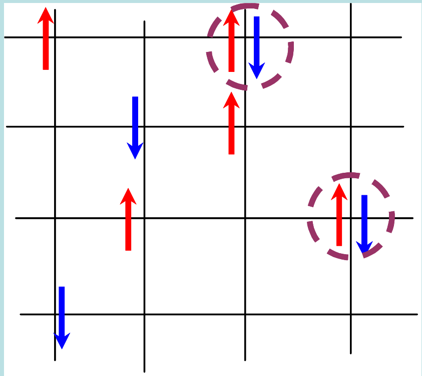


S.M.Hayden et al., PRL 84 (2000) 999
S.-H. Lee et al., PRL 86 (2001) 5554

Выводы:

- Развитие сильно коррелированного состояния практически всегда сопровождается возникновением сильного ближнего порядка
- Энергия спиновых флуктуаций и скорость их релаксации уменьшается с увеличением эффективной массы подвижных носителей заряда
- Сильные ближние корреляции нельзя трактовать как квазичастичные возбуждения, т.к. скорость их релаксации сравнима с энергией возбуждения.

Теоретическое описание сильно коррелированного состояния



1. Модель Хаббарда: $$H = t\sum_{ij,\sigma}\hat{a}^{+}_{i\sigma}\hat{a}_{j\sigma} + U\sum_{i}\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$$

Методы решения:

- Техника функций Грина (расцепление цепочек бесконечных уравнений и т.д.)
- Спин-волновая теория (Мория)
- Численные методы (квантовый Монте Карло и т.д.)
- Вариационный метод Гуцвиллера
- …

Сильно коррелированное состояние электронов в узких зонах с сильным локальным кулоновским взаимодействием
Переход металл-изолятор

2. Кондо-решетки
Взаимодействие электронов проводимости с локализованными примесями.

3. Системы с переменной валентностью

Пробная волновая функция Гутцвиллера

M.S.Gutzwiller, Phys.Rev. 137 (1965) A1726

$$\hat{X} = \sum_i \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$$

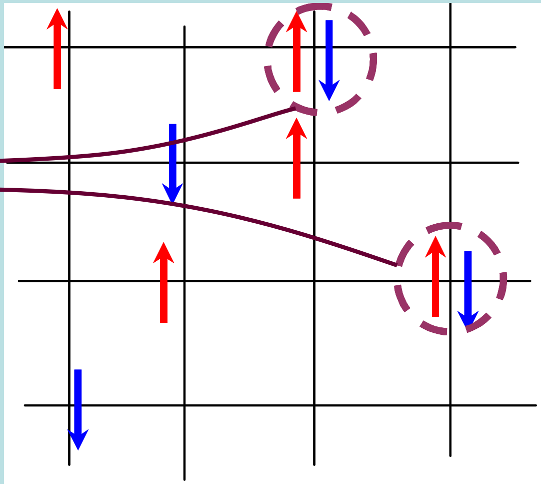
$$\left|\psi\right\rangle = g_0^{\hat{X}}\left|\varphi_0\right\rangle$$

g_0 – положительный параметр (0< $g0$ < 1 при U>0)

$$\left|\varphi_0\right\rangle = \prod_{\mathbf{k}<\mathbf{k}_{F\uparrow}} \hat{a}^+_{\mathbf{k}\uparrow} \prod_{\mathbf{k}<\mathbf{k}_{F\downarrow}} \hat{a}^+_{\mathbf{k}\downarrow}\left|0\right\rangle$$

$$\left|\varphi_0(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,...;\sigma_1,\sigma_2,...)\right\rangle = \sum_\Gamma A_\Gamma \left|\Gamma(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,...;\sigma_1,\sigma_2,...)\right\rangle$$

$$\left|\psi(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,...;\sigma_1,\sigma_2,...)\right\rangle = \sum_\Gamma g_0^{X_\Gamma} A_\Gamma \left|\Gamma(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,...;\sigma_1,\sigma_2,...)\right\rangle$$



Свойства пробной волновой функции:

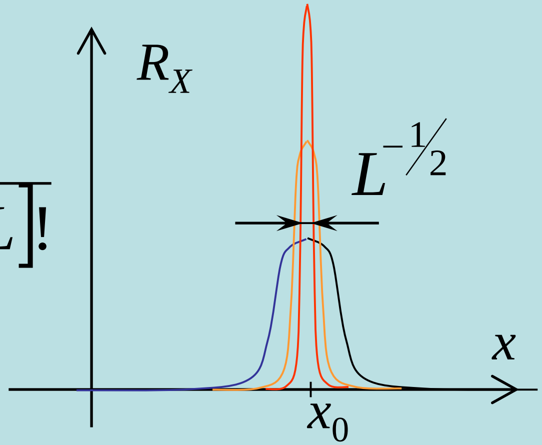
- Антисимметричная по перестановкам частиц
- Сохраняет трансляционную и точечную симметрию исходной волновой функции
- Уменьшает вероятность двухкратнозанятых узлов
- Преобразование $\varphi_0 \Rightarrow \psi$ неунитарное. Норма волновой функции не сохраняется.

Энергия основного состояния

Приближение Гуцвиллера: соседние узлы статистически независимы

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{\Gamma} g_0^{2X_\Gamma}|A_\Gamma|^2 = \sum_X g_0^{2X}|\bar{A}_X|^2 W_X = \sum_X R_X|\bar{A}_X|^2$$

Весовой множитель



$$R_X = g_0^{xL}W_X = \frac{g_0^{xL}L!}{(xL)!\,[(n_\uparrow - x)L]!\,[(n_\downarrow - x)L]!\,[(1-n_\uparrow - n_\downarrow + x)L]!}$$

$$x = X/L, \qquad n_\sigma = N_\sigma / L$$

$$\frac{\partial[\ln R_x]}{\partial x} = 0 \quad\Rightarrow\quad g_0(x)$$

Энергия основного состояния $\quad E = \sum_\sigma q_\sigma \bar{\varepsilon}_\sigma + xU, \qquad q \le 1$

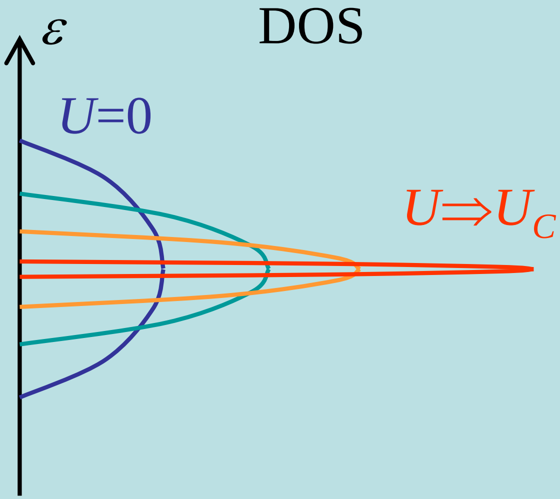
$$\bar{\varepsilon}_\sigma^0 = \sum_{\mathbf{k}<\mathbf{k}_F} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^0 \qquad\qquad q_\sigma = \frac{\left\{[(n_\sigma - x)(1-n_\sigma - n_{-\sigma} + x)]^{1/2} + [x(n_{-\sigma}+x)]^{1/2}\right\}^2}{n_\sigma(1-n_\sigma)}$$

Одночастичные спектры, переход металл-изолятор

F.Gebhard, The Mott Metal-Insulator transition, Model and Methods,Springer,1997

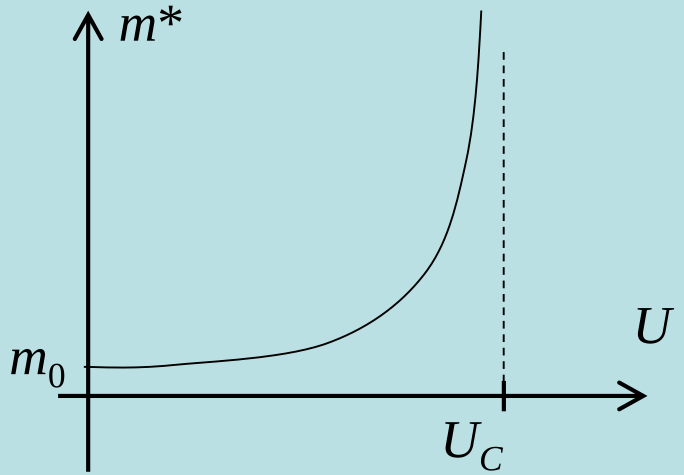
Спектр возбуждений
(перенормировка исходного спектра)

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = q_\sigma \varepsilon^0_{\mathbf{k}\sigma}$$



Перенормировка эффективной массы

$$m^*_\sigma = m_0 / q_\sigma$$



Переход металл-изолятор Бринкмана-Райса: масса квазичастиц стремится к ∞ (локализация).

Принципиально отличается от перехода в приближении Хаббард III

В приближении Гуцвиллера отсутствуют нелокальные корреляции

Применение пробной волновой функции Гуцвиллера

- Точное решение модели Хаббарда D=∞
- Многозонные и расширенные модели (N.Lanata et al., PRB **85** (2012) 035133)
- Функционал плотности Гутцвиллера (K. M. Ho et al., PRB **77** (2008) 073101)

$$E[n(\mathbf{r})] = \sum_{\sigma} q_{\sigma}[n(\mathbf{r})]\bar{\varepsilon}_{\sigma}[n(\mathbf{r})] + x[n(\mathbf{r})]U$$

- Предельный случай $g_0 \Rightarrow 0$ RVB состояние, теория сверхпроводимости (B.Edegger et al., arXiv:cond-mat/0512646 (2005))
- Численные расчеты с пробной волновой функцией Гуцвиллера без привлечения приближения Гуцвиллера – вариационный Монте Карло (H. Yokoyama, H. Shiba, J. Phys. Soc. Jap. **56 (**1987) 3582)
- Неоднородные сильно коррелированные металлы и мотт-хаббардовские изоляторы, интерфейсы, поверхности и т.д. (G. Borghi, PhD Gutzwiller Approximation applied to inhomogeneous lattice models and solid state system, thesis, SISSA, Italy, 2011)
- Магнитные системы, модель Гейзенберга (F.Gebhard, D.Vollhardt, PRB37 (1988) 6911)

Основной недостаток:

Нелокальные корреляции либо практически совсем игнорируются (приближение Гуцвиллера) либо переносятся из исходной волновой функции. Но структура исходного и сильно коррелированного состояния сильно отличаются!

Вариационная теория ферми-систем с ближним порядком

Ю.Б.Кудасов УФН 173 (2003) 121

Пробная функция общего вида:

$$\left|\psi\right\rangle = \hat{G}\left|\varphi_0\right\rangle = \prod_{\lambda} g_{\lambda}^{\hat{P}_{\lambda}}\left|\varphi_0\right\rangle$$

$$\hat{Y}_1 = \sum_{<ij>}(1-n_{i\uparrow})(1-n_{i\downarrow})(1-n_{j\uparrow})(1-n_{j\downarrow}),$$

$$\hat{Y}_2 = \sum_{<ij>} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}n_{j\uparrow}n_{j\downarrow}$$

С учетом условий нормировки и симметрии всего 4 независимых переменных: x, y_3, y_4 и y_7 в ПМ фазе

$$\left|\psi\right\rangle = g_0^{\hat{X}} g_3^{\beta_3\hat{Y}_3} g_4^{4\beta_4\hat{Y}_4} g_7^{\beta_7\hat{Y}_7}\left|\varphi_0\right\rangle$$
$$= \hat{G}\left|\varphi_0\right\rangle$$

Возможные конфигурации пары ближайших соседей (ПМ фаза, половинное заполнение)

Оператор	Конфигурация		Кратность вырождения
	Узел *i*	Узел *j*	
$\hat{Y}_1$			1
$\hat{Y}_2$	↑↓	↑↓	1
$\hat{Y}_3$	↑↓		2
$\hat{Y}_4$	↑		2
$\hat{Y}_5$	↓		2
$\hat{Y}_6$	↑	↑	1
$\hat{Y}_7$	↑	↓	2
$\hat{Y}_8$	↑↓	↑	2
$\hat{Y}_9$	↑↓	↓	2
$\hat{Y}_{10}$	↓	↓	1

Вычисление числа размещений пар по решетке:

метод псевдоансамбля Кикучи (вариационный кластерный метод)

R. Kikuchi, Phys. Rev. ***81*** *(1951) 988* *Дж. Займан , Модели беспорядка, Мир, 1982*

Число размещений пар по связям без учета связей

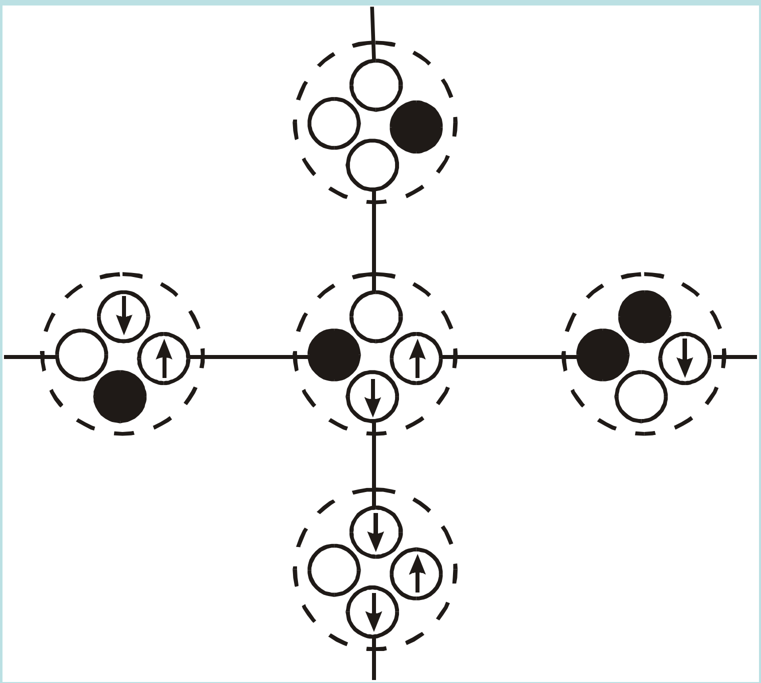
$$Q = \frac{\left(zL/2\right)!}{\prod_{\lambda}\left[\left(zy_{\lambda}L/2\right)!\right]^{\beta_{\lambda}}}$$

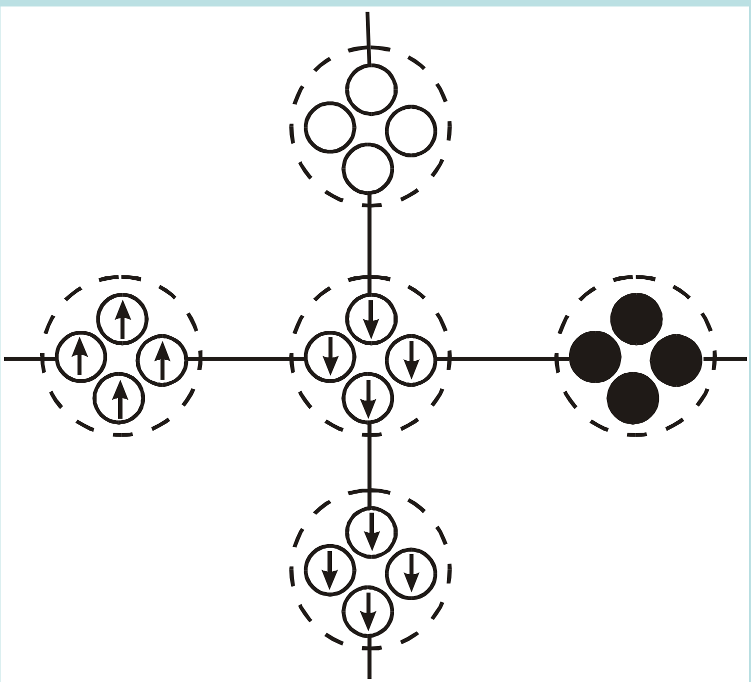
Доля правильных конфигураций

$$\Gamma = \frac{L!\prod_{\lambda}\left(x_{\lambda}zL\right)!}{(zL)!\prod_{\lambda}\left(x_{\lambda}L\right)!}$$

Число размещений пар по связям

$$W = \Gamma Q$$





Энергия основного состояния в модели Хаббарда

(ПМ фаза половинное заполнение)

$$E = \frac{1}{L}\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = q\varepsilon_0 + xU \qquad q = \rho_1 / \rho_1^0$$

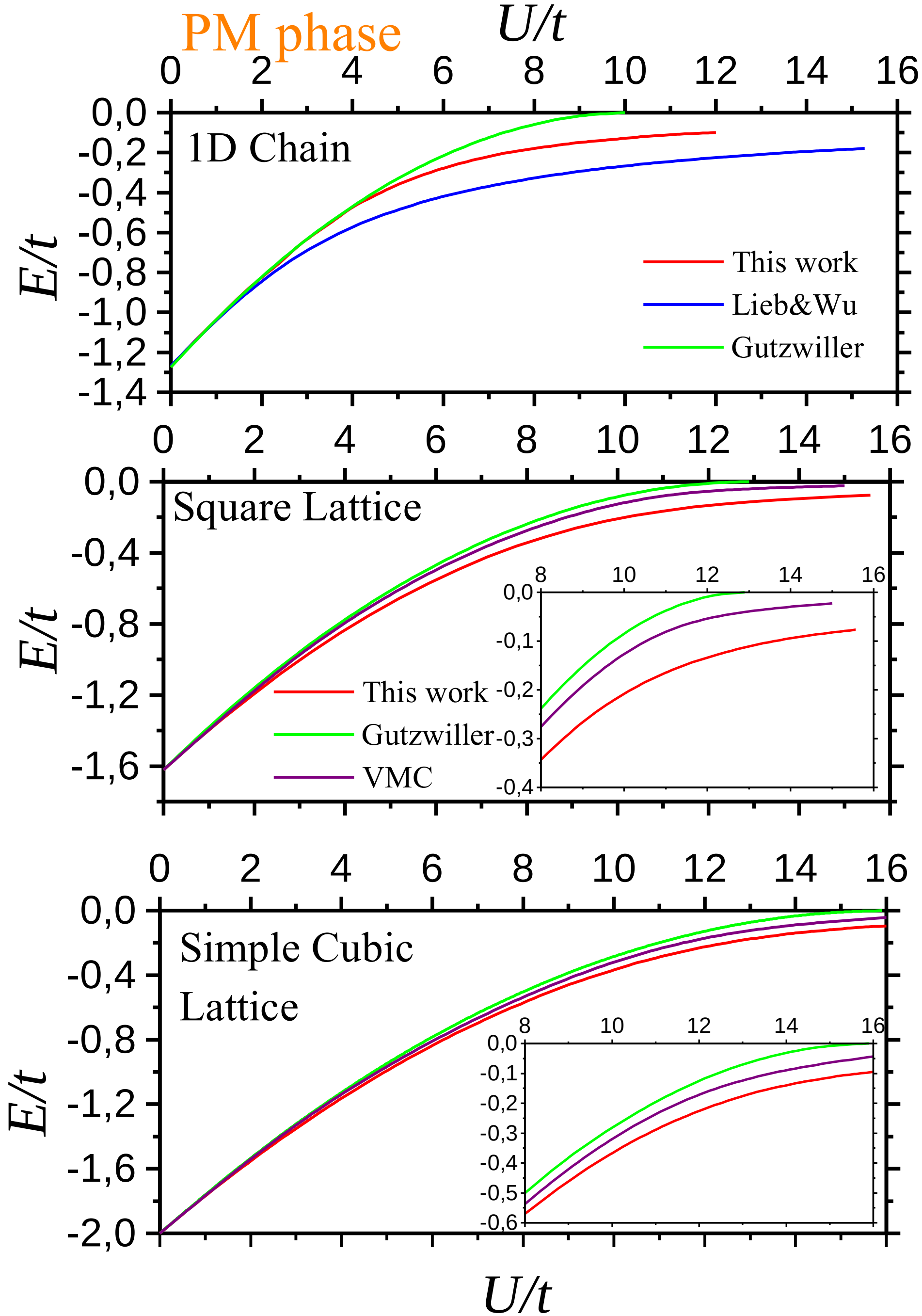
$$\rho_1 = L^{-1}\frac{\langle\psi|\sum_{<ij>,\sigma}(a_{i\sigma}^{+}a_{j\sigma} + \mathrm{h.c.})|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

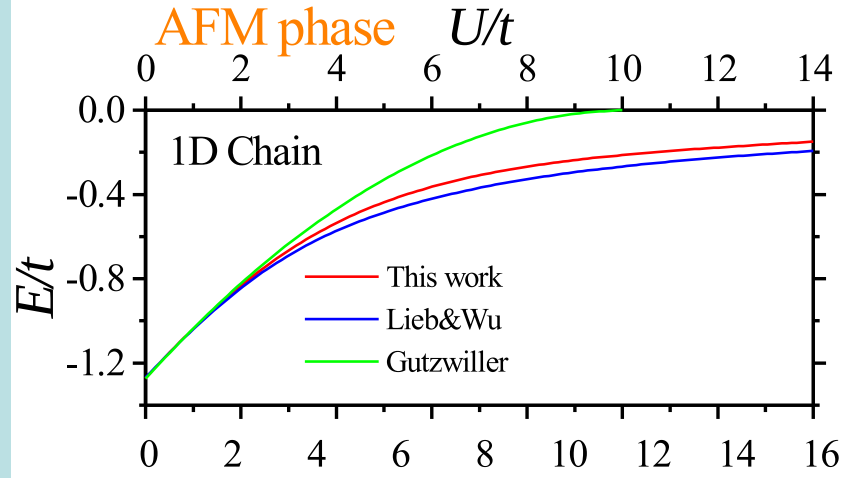
$\rho_1^{\,0}$ – значение при U=0

$$\rho_1 = 8\left(y_4 + \sqrt{y_3 y_7}\right)\left[\frac{y_4}{x\left(1/2 - x\right)}\left(\sqrt{y_2} + \sqrt{y_3} + \sqrt{y_6} + \sqrt{y_7}\right)^2\right]^{z-1}$$

Энергия системы вычисляется в аналитическом виде.

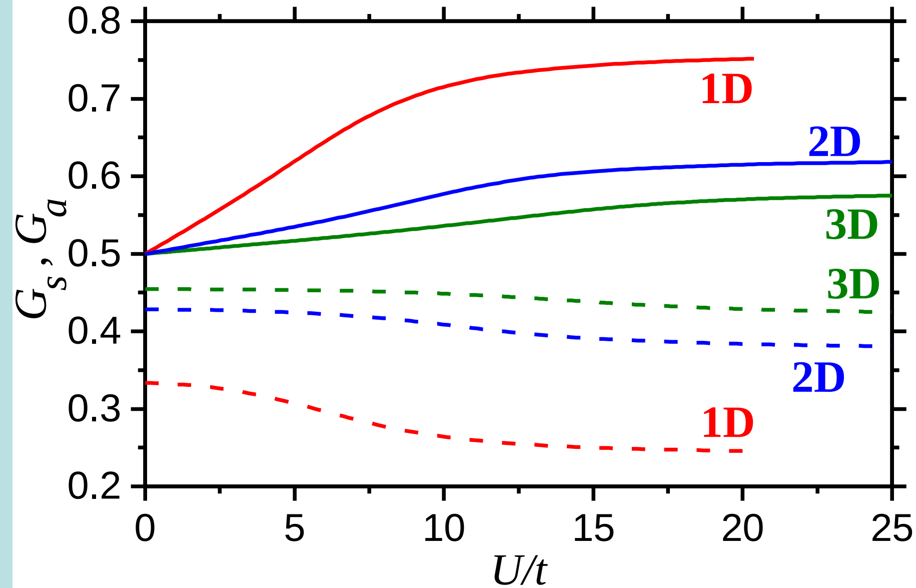
Энергия основного состояния – через численную минимизацию по вариационным переменным (усовершенствованный симплекс-метод Нелдера-Мида)





Correlation functions:

$G_a = \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle + \langle n_\downarrow n_\uparrow \rangle$, $G_s = \langle n_\uparrow n_\uparrow \rangle + \langle n_\downarrow n_\downarrow \rangle$



$$G(r) \propto \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right) \text{ где } \xi = \frac{a}{\left|\ln\left|G(1)-G(0)\right|\right|}$$

Спектр элементарных возбуждений

Адиабатическое взаимодействие включение

Когерентные

$$\left|\psi_C\right\rangle \;\Rightarrow\; g_0^{\hat{X}} a_{\mathbf{k}\sigma}^{+}\left|\varphi_0\right\rangle$$

$$\delta E = q\sum_{\mathbf{k}\sigma}\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^{0}\delta n_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_0\sum_{\mathbf{k}\sigma}\frac{\partial q}{\partial n_\sigma}\delta n_{\mathbf{k}\sigma}$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = q\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^{0}.$$

$$\left\langle \psi_N \middle| \psi_C \right\rangle \to 0$$

внезапное включение

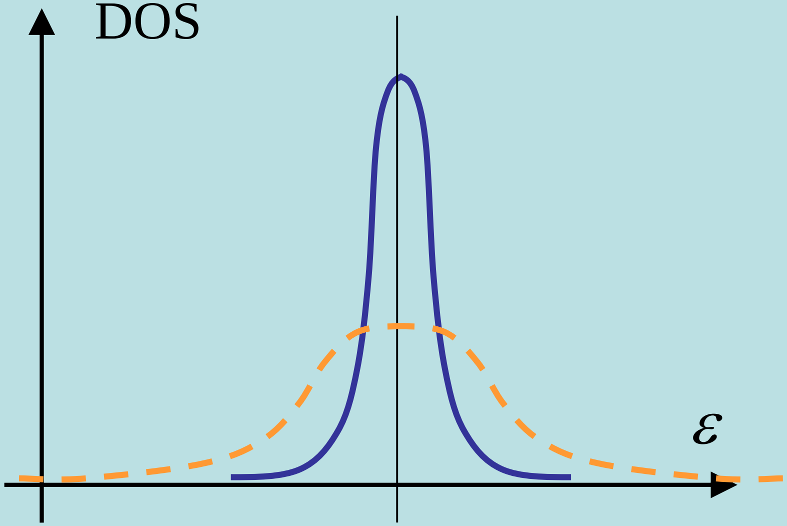
Некогерентные

$$\left|\psi_N\right\rangle \;\Rightarrow\; a_{\mathbf{k}\sigma}^{+} g_0^{\hat{X}}\left|\varphi_0\right\rangle$$

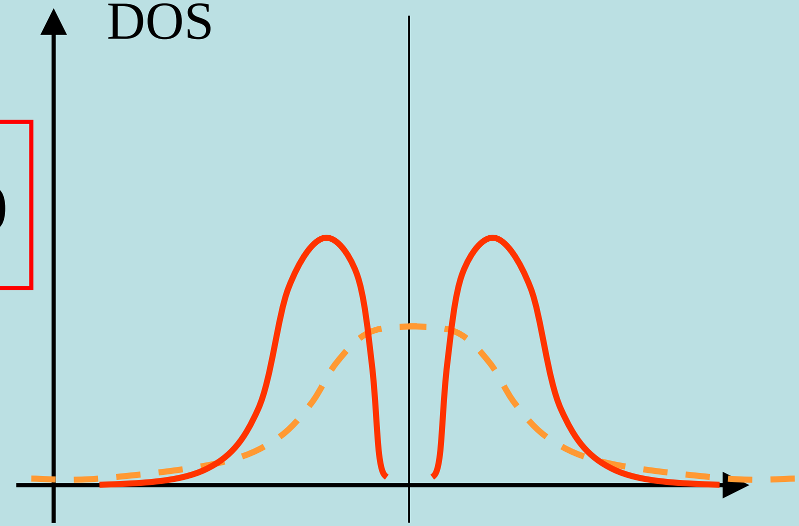
Хаббард-I и т.д.

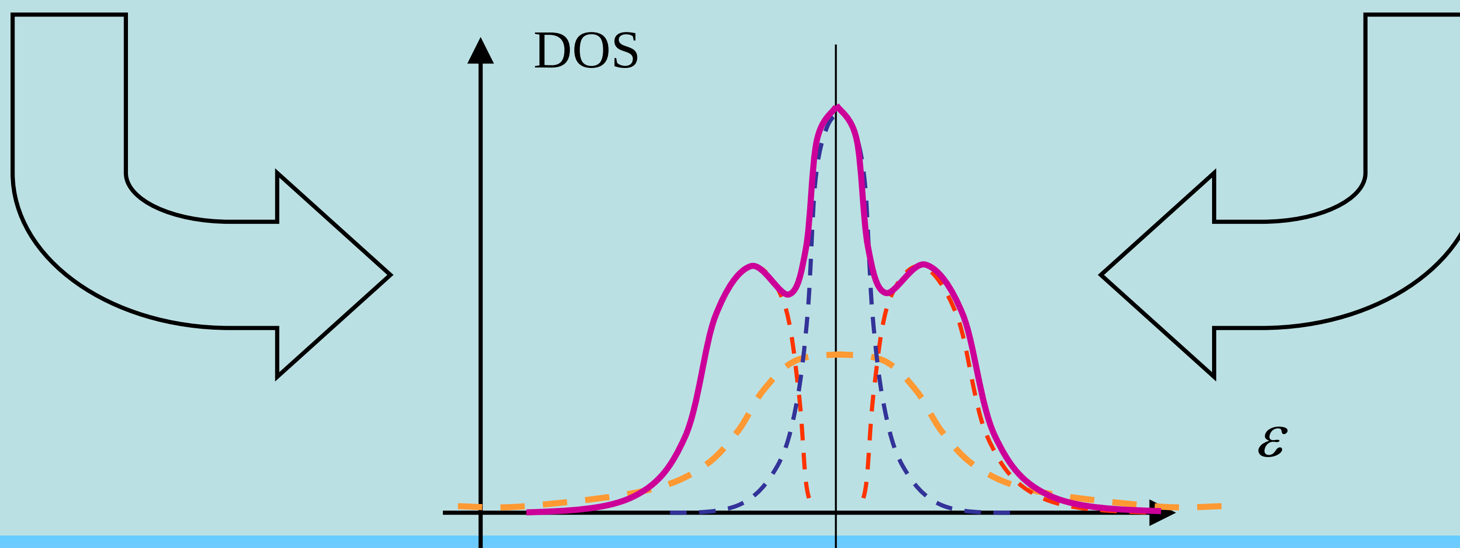
$$E\Gamma_{ij}^{\sigma} = \frac{1}{2\pi}\delta_{ij}\left\langle n_{i,-\sigma}\right\rangle + U\Gamma_{ij}^{\sigma} + \sum_{l\neq i} t_{il}\left\langle\left\langle n_{i,-\sigma}a_{l\sigma};a_{j\sigma}^{+}\right\rangle\right\rangle_E$$
$$+\sum_{l\neq i} t_{il}\left(\left\langle\left\langle a_{i,-\sigma}^{+}a_{l,-\sigma}a_{i\sigma};a_{j\sigma}^{+}\right\rangle\right\rangle_E - \left\langle\left\langle a_{l,-\sigma}^{+}a_{i,-\sigma}a_{i\sigma};a_{j\sigma}^{+}\right\rangle\right\rangle_E\right)$$

Когерентные **Некогерентные**



$$\boxed{\langle \psi_N | \psi_C \rangle \to 0}$$

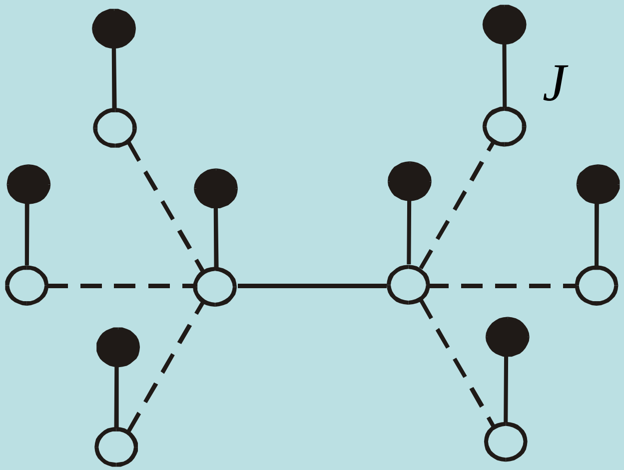


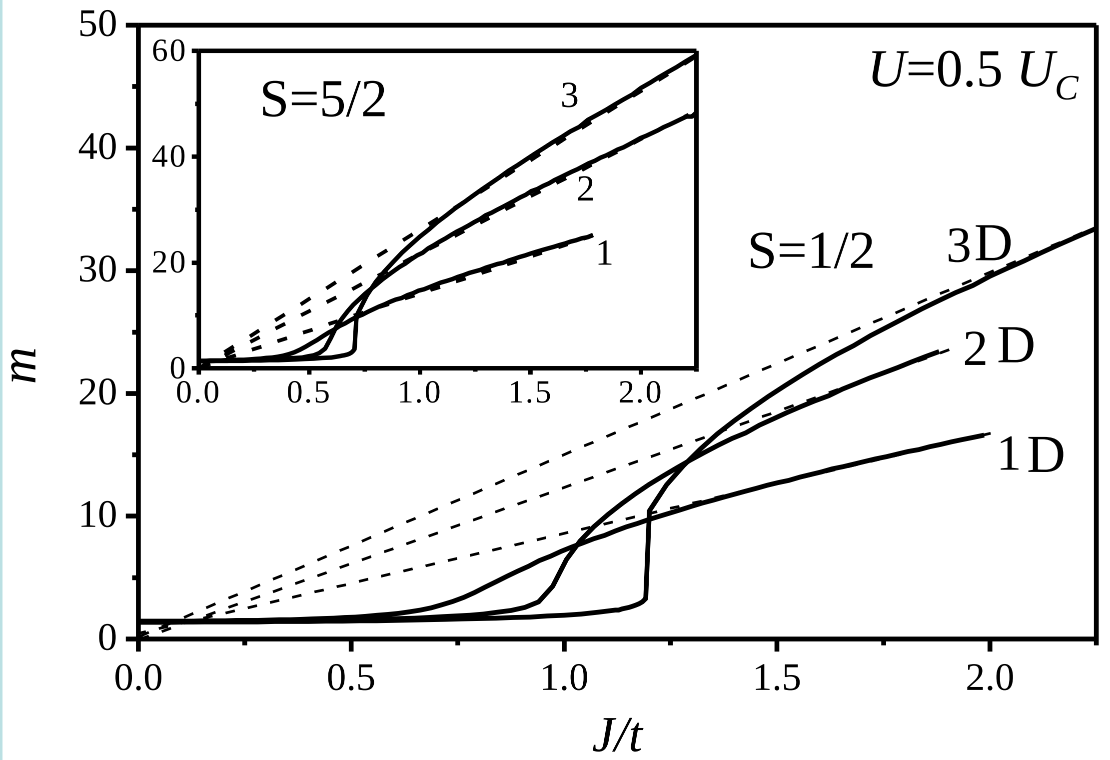


Модель Кондо-Хаббарда (Кондо-решетки)

$$H_{KH} = H_H + J\sum_i \hat{\mathbf{S}}_i^l \hat{\mathbf{S}}_i^c$$

Модель Хаббарда + локализованные состояния





Некоторые выводы

Метод позволяет:

• проводить расчет основного состояния (модели Хаббарда и расширенные, Кондо-решетки и т.д.)

• расчет спектров возбуждений

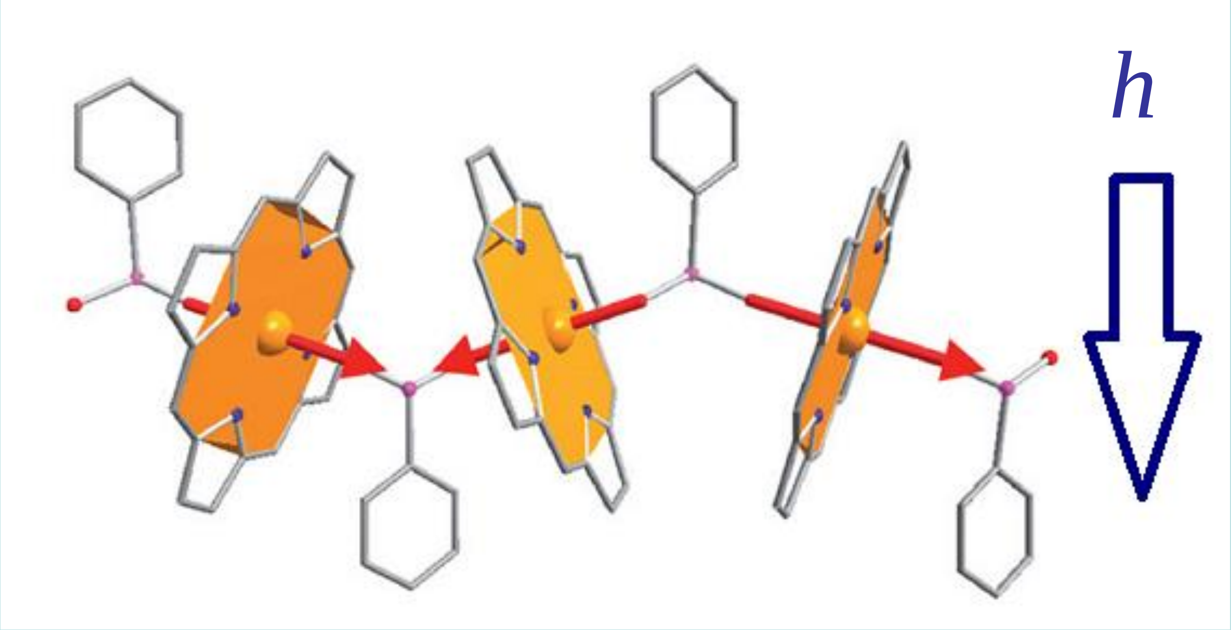
Процедура практически точная для дерева (решетка без замкнутых путей).

Низкоразмерные магнитные системы

Анизотропная гейзенберговская цепочка в альтернирующем магнитном поле

S. Paul, A. K. Ghosh, JMMM **362** *(2014) 193*
(Теория среднего поля с поправками до 2-ого порядка теории возмущений)

$$\hat{H} = \sum_{i}^{N} [J(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + \Delta \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z) + h_z (-1)^i \hat{S}_i^z]$$



Либо «альтернирующее» внутреннее эффективное поле за счет взаимодействия Дзялошинского-Мория либо внешнее поле:

Yb_4As_3, $KCuCaF_6$ и органические магнетики

L. Bogani, Jour. Mat. Chem. **18** *(2008) 4733*

Преобразование Йордана – Вигнера

(P.Jordan,E.Wigner,Z.Phys. **47** (1928) 631)

$$\hat{S}_i^+ = \hat{c}_i^+ e^{i\pi\sum_j^{i-1}\hat{n}_j}$$

$$\hat{S}_i^- = e^{-i\pi\sum_j^{i-1}\hat{n}_j}\hat{c}_i$$

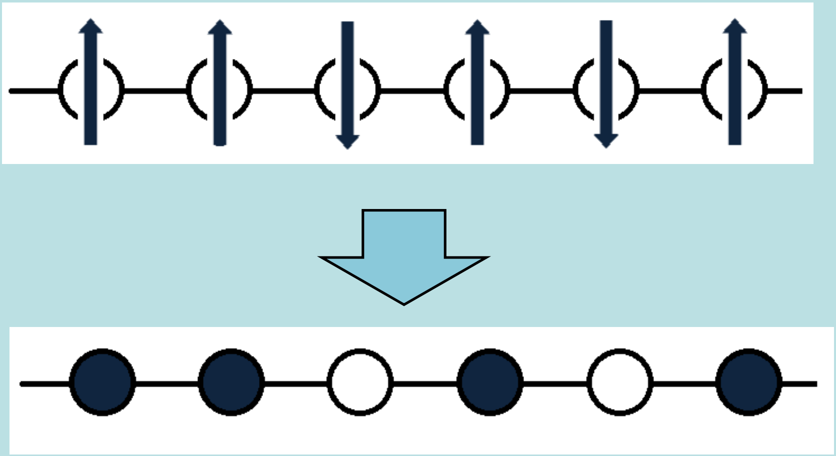
$$\hat{S}_i^z = \hat{n}_i - \frac{1}{2}$$

c_i^+ и c_i – операторы рождения и уничтожения, подчиняющиеся статистике Ферми, n_i – оператор числа частиц.

Переход от спиновой цепочки к эквивалентной фермионной

$s_i^z = \frac{1}{2}$ фермион находится в узле i (n_i =1)

$s_i^z = -\frac{1}{2}$ фермион отсутствует в узле i (n_i =0)



Гейзенберговская цепочка с альтернирующим магнитным полем в фермионном представлении

Невзаимодействующие бесспиновые фермионы на цепочке

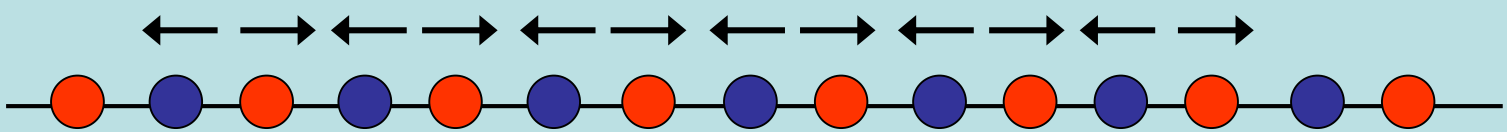
$$\hat{H}_{xy} = \frac{J}{2}\sum_{i}^{N}\left(\hat{a}_i^{+}\hat{b}_{i+1} + H.c.\right) \qquad \hat{H}_{stag} = h\sum_{i}^{N}\left(\hat{a}_i^{+}\hat{a}_{i+1} - \hat{b}_{i+1}^{+}\hat{b}_{i+1}\right)$$

Для *xy*-цепочки с альтернирующим магнитным полем преобразование Йордана-Вигнета позволяет получить точное решение (I.Titvinidze,G.I.Japaridze, Eur.Phys.J.B **32** (2003) 383)

Взаимодействие фермионов на соседних узлах

$$\hat{H}_{zz} = J\sum_{i}^{N}\left(\hat{a}_i^{+}\hat{a}_i\,\hat{b}_{i+1}^{+}\hat{b}_{i+1} + \hat{b}_{i+1}^{+}\hat{b}_{i+1}\hat{a}_{i+2}^{+}\hat{a}_{i+2} - \frac{1}{2}\left[\hat{a}_i^{+}\hat{a}_i + 2\hat{b}_{i+1}^{+}\hat{b}_{i+1} + \hat{a}_{i+2}^{+}\hat{a}_{i+2}\right]\right)$$

Цепочка из двух сортов узлов

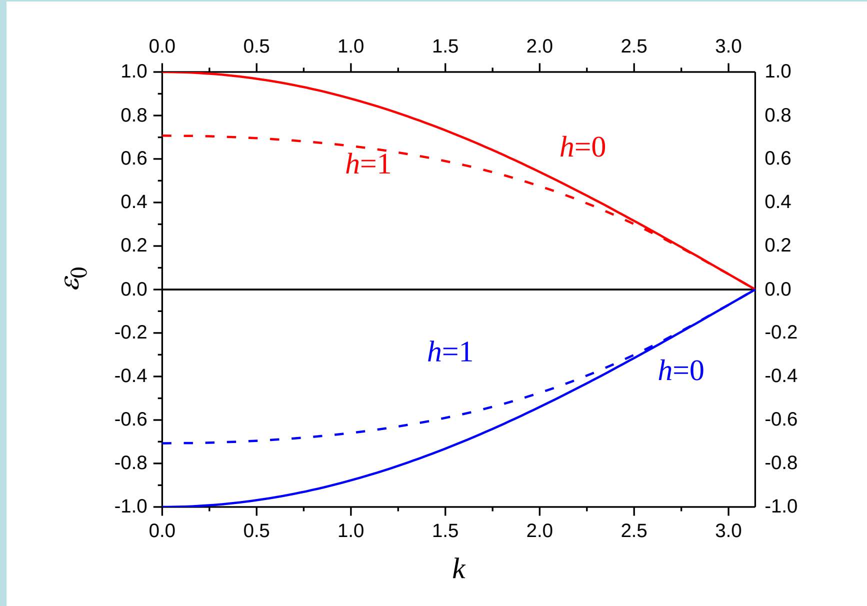


a *b*

Пробная волновая функция для эквивалентных фермионов

Дисперсия невзаимодействующих фермионов

$$\varepsilon_0(k) = \frac{\cos\left(k/2\right)}{\sqrt{h^2 + \cos^2\left(k/2\right)}}$$



Пробная функция:

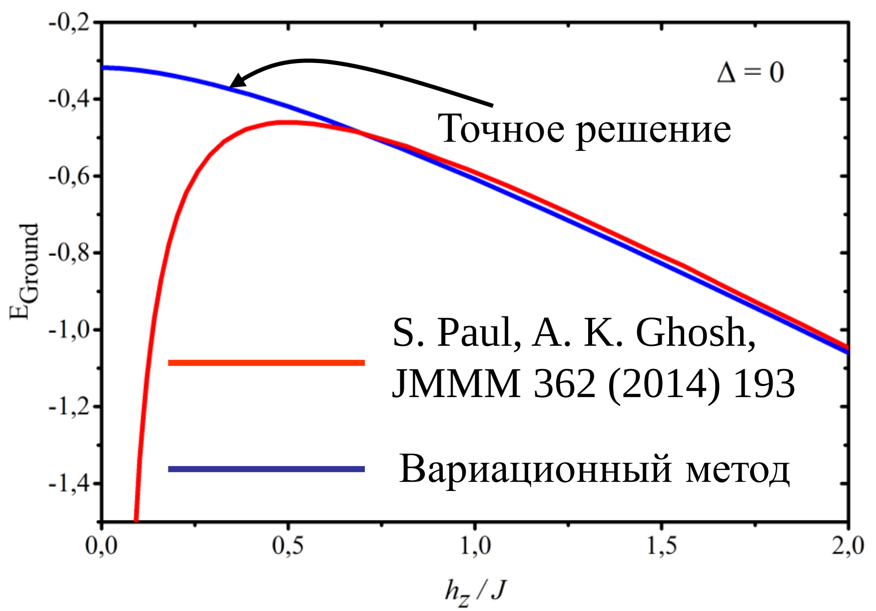
$$|\psi\rangle = g_M{}^{\hat{M}} g_P{}^{\hat{P}} |\varphi_0\rangle$$

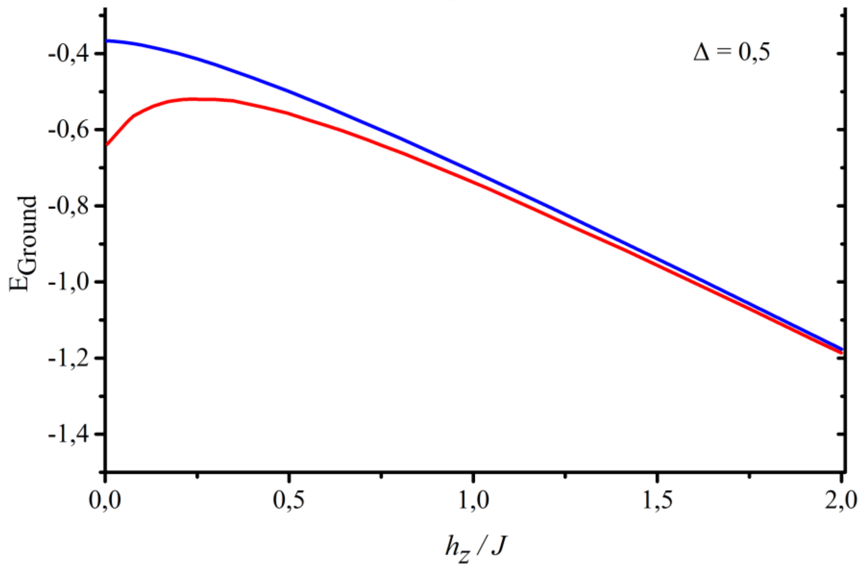
Из 4 параметров – два независимые:

$$\hat{P} = \frac{1}{2}\left[\hat{Y}_3 + \hat{Y}_2\right] \qquad \hat{M} = \frac{1}{2}\left[\hat{Y}_3 - \hat{Y}_2\right]$$

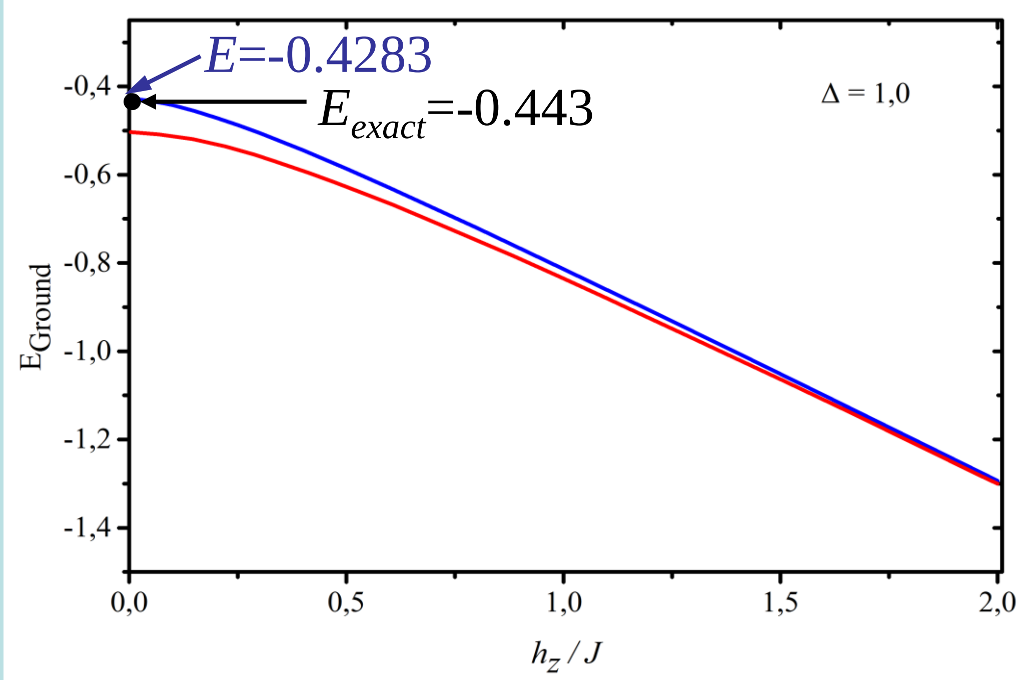
Вероятность	Конфигурация пар узлов A и B	A	B
y_1	○—○	0	0
y_2	●—○	1	0
y_3	○—●	0	1
y_4	●—●	1	1

Энергия основного состояния цепочки



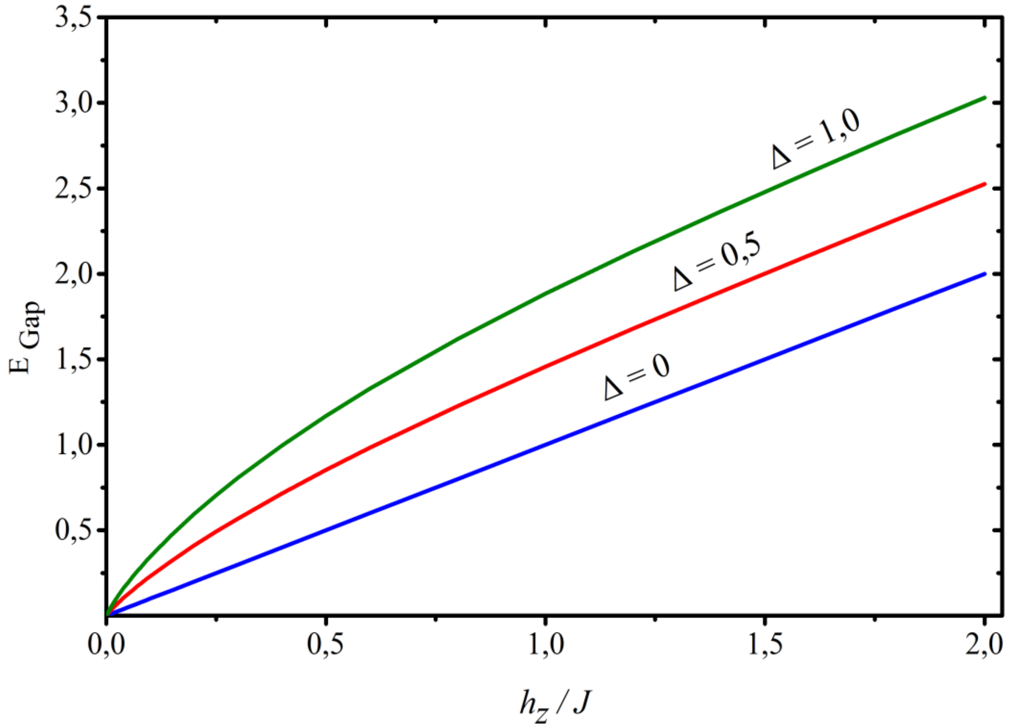


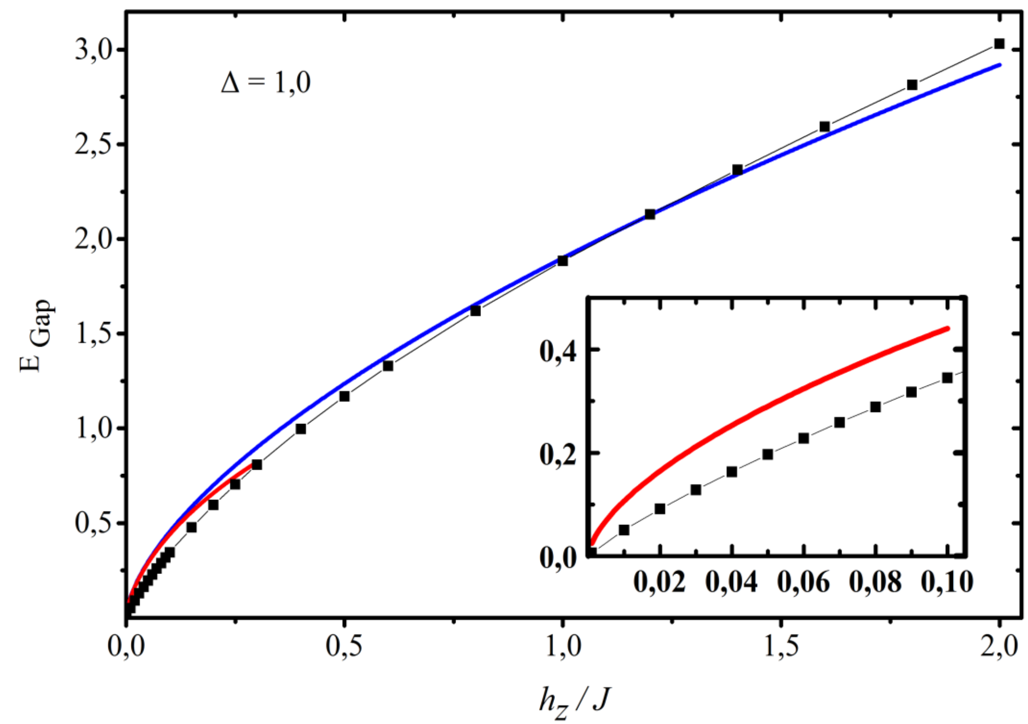
Изотропная цепочка



Щель в спектре состояний цепочки

Сравнение с известными решениями
для изотропной цепочки





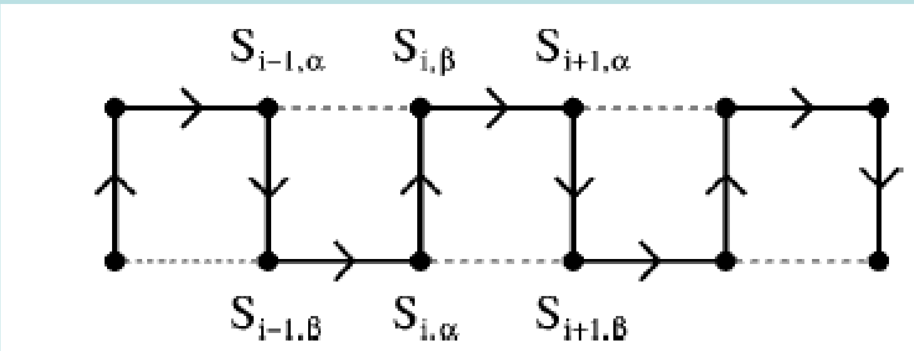
I.Affleck, M.Oshikawa, PRB **60** (1999) 1038 (sine-Gordon model)

N.Shibata, KUeda, J.Phys.Soc.Jpn. **70** (2001) 3690 (finite-T DMRG)

Дальнейшее развитие вариационной теории низкоразмерных магнитных систем

1. Преобразование Йордана-Вигнера для сложных структур

Параметризация лестничных структур (T.S.Nunner, T.Kopp, PRB **69** (2004) 104419)



$$S^+_{i,\alpha} = \alpha_i^\dagger \exp\left[i\pi \sum_{j<i} (\alpha_j^\dagger \alpha_j + \beta_j^\dagger \beta_j)\right],$$

$$S^+_{i,\beta} = \beta_i^\dagger \exp\left[i\pi \sum_{j<i} (\alpha_j^\dagger \alpha_j + \beta_j^\dagger \beta_j)\right] e^{i\pi \alpha_i^\dagger \alpha_i},$$

Параметризация 2D и 3D решеток (A.M.Tsvelik. Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics - Cambridge University Press (2003))

2. Увеличение длины кластера (улучшение приближения в пределе $\Delta=1$, $h\to 0$)

Заключение

- Вариационный метод исследования сильно коррелированных систем на основе нелокальных пробных волновых функций позволяет вычислять энергию основного состояния, спектры элементарных возбуждений, корреляционные функции
- Возможно исследование различных низкоразмерных магнитных систем
- Многозонные модели с нелокальными корреляциями
- Дальнейшее развитие: гуцвиллеровские и нелокальные волновые функции как функционал плотности; совмещение с первопринципными расчетами (LGA+)

Спасибо за внимание!