Письма в ЖЭТФ, том 94, вып. 2, с. 130 – 132

Роль вращательной симметрии в магнетизме многозонных моделей

А. Е. Антипов[1)*], *М. С. Алейников*[*], *В. И. Анисимов*[∇]

[*] *Физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, 119992 Москва, Россия*

[∇] *Институт физики металлов РАН, 620041 Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 25 мая 2011 г.

Роль учета полной матрицы кулоновского взаимодействия в определении магнитной восприимчивости двухзонной модели Хаббарда исследована при помощи динамической теории среднего поля. Обнаружено, что вклад недиагональной компоненты U-матрицы приводит к понижению температуры Нееля, что соответствует имеющейся картине экспериментальных данных. Обсуждается величина этого эффекта при изменении размерности U-матрицы. Произведено сравнение полученных результатов с термодинамическими характеристиками одиночного хаббардовского атома.

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: сложного упорядочения одновременно спина и орбитального момента валентных электронов [1]. 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 (Orbital selective Mott transition) [2]. Такой тип фазового перехода был теоретически исследован [3] и экспериментально обнаружен в $Ca_{2-x}RuO_4$ [4] и $La_{n+1}Ni_nO_{3n+1}$ [5].

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 [6] могли рассматривать только взаимодействия вида плотность–плотность, имеющие *диагональный* вид в пространстве кубических гармоник. Учет недиагональных матричных элементов в общем случае приводил к экспоненциальному увеличению времени расчета [7]. Появление алгоритмов квантового метода Монте-Карло в непрерывном времени позволило решить эту проблему [8]. Учет полного многоорбитального характера единичной примеси на металлической поверхности приводит к сдвигу кондовского пика в плотности состояний примеси [9] и подавлению такого пика для Sr_2RuO_4 [10, 11].

Представляет интерес вопрос о влиянии структуры матрицы кулоновского взаимодействия на термодинамические характеристики системы. Расчеты LDA-DMFT, выполненные для взаимодействия типа плотность–плотность, приводят к завышению температуры Кюри железа [12] и различных манганитов [13] в 1.5–2 раза. Характер ошибки может быть связан как с орбитальными эффектами, так и с пренебрежением нелокальными корреляциями в динамической теории среднего поля [6]. В данной работе изучается влияние типа матрицы кулоновского взаимодействия в *двухзонной* модели Хаббарда при полузаполнении (электронно-дырочной симметрии) на температуру Нееля. 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[14]. Отметим, что схожая модель была исследована в работе [7]. Однако ее авторы рассмотрели случай электронного заполнения $\approx 30\%$, соответствующего *ферромагнитному* упорядочению.

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

$$\hat{H} = -t\sum_{\langle i,j\rangle,\sigma}(\hat{c}^{+}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}+\hat{c}^{+}_{j\sigma}\hat{c}_{i\sigma}) - \mu\sum_{i\sigma}\hat{n}_{i\sigma} + \sum_{i}\hat{H}^{\rm int}_{i}, \tag{1}$$

$$\hat{H}^{\rm int} = \frac{U}{2}\sum_{p\sigma} n_{p\sigma}n_{p\bar{\sigma}} + \frac{U-2J}{2}\sum_{p\neq p',\sigma} n_{p\sigma}n_{p'\bar{\sigma}} + \frac{U-3J}{2}\sum_{p\neq p',\sigma} n_{p\sigma}n_{p'\sigma} - \frac{J}{2}\sum_{p\neq p',\sigma}(c^{\dagger}_{p\sigma}c^{\dagger}_{p'\bar{\sigma}}c_{p'\sigma}c_{p\bar{\sigma}} + c^{\dagger}_{p'\sigma}c^{\dagger}_{p'\bar{\sigma}}c_{p\sigma}c_{p\bar{\sigma}}). \tag{2}$$

Индексы p, p' пробегают номера гармоник ($0, 1$ для двухзонной модели), σ означает проекцию спина.

[1)]e-mail: antipov@ct-qmc.org

Первые 3 члена в формуле (2) описывают взаимодействие типа плотность–плотность.

В рамках динамической теории среднего поля в лагранжево действие системы вводится эффективное поле, действующее на каждый узел решетки, которое определяется самосогласованно. Эффективное одноузельное действие имеет вид примесной модели Андерсона:

$$S^{\text{imp}} = \sum_{\omega}(\Delta_{\omega\sigma} - i\omega - \mu)c^*_{\omega\sigma}c_{\omega\sigma} - \\ - \sum_{\omega} mH(n_{\uparrow\omega} - n_{\downarrow\omega}) + \int_0^{\beta} d\tau H^{\text{int}}[c, c^*], \quad (3)$$

где $\Delta_{\omega\sigma}$ – эффективное поле, ω – мацубаровская частота, μ – химический потенциал, $m = \mu_{\text{B}}g$ – магнитный момент электрона, принятый равным 1 (μ_{B} – магнетон Бора, g – спиновый g-фактор электрона), H – внешнее статическое магнитное поле. Химический потенциал, соответствующий одинаковому заполнению электронов и дырок, равен $\mu = 1.5U - 2.5J$. Примесная модель Андерсона решалась при помощи квантового метода Монте-Карло, действующего в непрерывном времени, с разложением по величине кулоновского взаимодействия [15]. Этот метод обладает слабым шумом при больших значениях мацубаровских частот, что позволяет аккуратно проводить фурье-преобразование и получать термодинамические характеристики. Для учета недиагональных элементов использовался кластерный тип шагов, который дает возможность добавления и уничтожения сразу пары частиц. Это делает возможным учет членов $c_1c_2^*c_3c_4^*$ общего вида [9].

Условие самосогласования DMFT на решетке Бете имеет вид

$$\Delta_{\omega\sigma} = t^2 g_{\omega\overline{\sigma}}, \quad (4)$$

где спиновая поляризация в эффективном поле введена для получения антиферромагнитного упорядочения на решетке. Для каждого набора параметров (U, t, β, H) функция Грина определялась итеративно численным решением модели (3) и подстановкой в (4). Сходимость схемы наблюдалась после ≈ 5 итераций. Всего для каждого набора параметров проводилось 10 итераций. Статическая магнитная восприимчивость определяется при помощи варьирования системы слабым внешним магнитным полем ($mH < 0.08$):

$$\chi_{\text{AF}} = \frac{1}{N}\frac{\partial M}{\partial H}\Big|_{H\to 0} = -\frac{1}{2}\frac{\partial\langle n_\uparrow - n_\downarrow\rangle}{\partial H}\Big|_{H\to 0}. \quad (5)$$

Температура Нееля определяется из интерполяции линейного участка температурной зависимости обратной статической магнитной восприимчивости:

$$\chi_{\text{AF}} = \frac{\langle m^2\rangle}{3(T + T_N)}. \quad (6)$$

Предварительно рассмотрим 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. 1 изображено

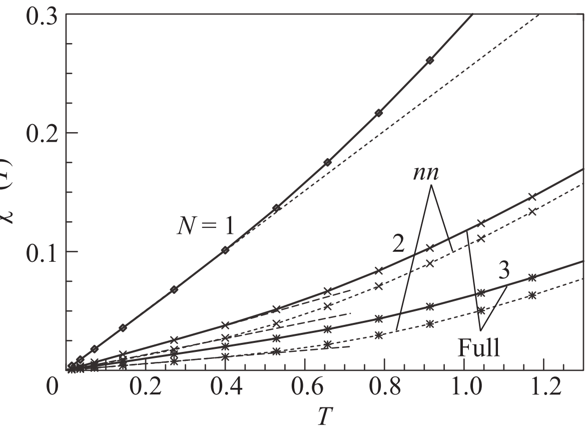

Рис. 1. Зависимости обратной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ одиночного хаббардовского атома, описываемого (2), при $U = 3.6$, $J = 1$ для разных размерностей валентной орбитали $(1, 2, 3)$. Константы Кюри C определяются углом наклона прямых в области $T < 0.6$ к оси $\chi^{-1} = 0$. Полученные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

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 $\chi = C/T$. 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 [16] $C = \mathbf{S}(\mathbf{S} + 1)/3 = N(N/2 + 1)/6$. В высокотемпературной области в обоих случаях $C_{T\gg U} = C^{\text{full}}_{T\ll U}/2$, что соответствует [17]. 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. Были произведены тестовые QMC-расчеты функции Грина для одиночного атома, которые показали хорошее совпадение с результатами точной диагонализации.

На рис. 2 представлены зависимости обратной магнитной восприимчивости двухзонной модели Хаббарда на решетке Бете от температуры при

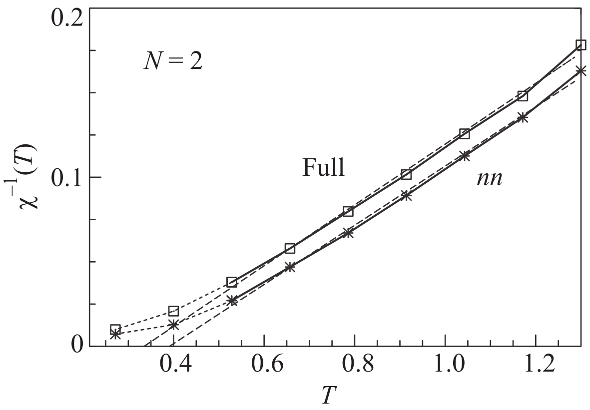

Рис. 2. Зависимость обратной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ для двухорбитальной модели Хаббарда на антиферромагнитной решетке Бете при $U/t = 3.6$, $J = t$. Верхняя кривая соответствует учету полной матрицы кулоновского взаимодействия, нижняя – только диагональных членов. Прямые – интерполяция линейных участков обеих кривых в металлической области. Температура Нееля определяется точкой пересечения этих прямых с осью $\chi^{-1}(T) = 0$ и равна 0.33 в случае полной U-матрицы и 0.39 в случае взаимодействия плотность–плотность

$U/t = 3.6$, $J = t$ для случаев учета полной матрицы кулоновского взаимодействия и только ее диагональной части. Фазовый переход в обоих случаях происходит при величине температуры 0.3–0.4. При повышении температуры статическая магнитная восприимчивость системы в парамагнитной области принимает вид закона Кюри-Вейсса (6). Рассчитанные значения температур Нееля равны $T_{\rm N}^{\rm full} = 0.33$, $T_{\rm N}^{\rm nn} = 0.39$. Константы Кюри в боих случаях отличаются незначительно: $C_{\rm N=2}^{\rm full} = 0.36$, $C_{\rm N=2}^{\rm nn} = 0.35$.

Разница между полученными температурами перехода в антиферромагнитное состояние для решетки Бете, равная 18%, меньше, чем аналогичная ошибка в 1.5–2 раза в работах [12, 13]. Необходимо отметить, что данная разница рассчитана для двухзонной модели, в которой количество недиагональных членов в матрице кулоновского взаимодействия равно количеству диагональных членов. В то же время количественно точное описание систем, рассматриваемых в работах [12, 13], требует рассмотрения случая валентной d-оболочки, U-матрица которой обладает 5 диагональными и 20 недиагональными членами. Косвенно об усилении эффекта говорит изменение константы Кюри одиночного хаббардовского атома в ≈ 2 раза при изменении размерности валентной орбитали с 2 до 3 (рис. 1). Увеличение числа орбиталей в настоящий момент доступно для QMC-алгоритмов [9, 18]. Также необходимо отметить, что величины температур Кюри и Нееля существенно зависят от электронного заполнения в системе. В работе [7] добавление недиагональных членов в матрицу взаимодействия в рамках алгоритма Хирша–Фая при заполнении $n = 1.25$ приводит к смене знака температуры Кюри, т.е. к разрушению ферромагнитного состояния.

Итак, модель Хаббарда на двухорбитальной решетке Бете рассмотрена при помощи динамической теории среднего поля. Использование диагональной матрицы взаимодействия, применявшейся до настоящего времени в большинстве работ, приводит к заметному (18% в рассмотренной модели) завышению температуры перехода. Показано, что этот эффект усиливается при увеличении размерности матрицы кулоновского взаимодействия, что позволяет рассчитывать на уменьшение расхождения между результатами расчетов и экспериментальными данными.

Авторы благодарны А.Н. Рубцову и А.И. Потеряеву за плодотворные обсуждения, НИЦ "Курчатовский институт" за предоставление суперкомпьютерных мощностей. Данная работа была выполнена при поддержке гранта РФФИ # 11-02-01443-а.

1. P. Fazekas, Foundations of Physics **30**, 1999 (2000).
2. A. Koga, N. Kawakami, T. M. Rice, and M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. **92**, 216402 (2004).
3. V.I. Anisimov, I.A. Nekrasov, D.E. Kondakov et al., Eur. Phys. J. B **25**, 191 (2002).
4. M. Neupane et al., Phys. Rev. Lett. **103**, 097001 (2009).
5. K. Sreedhar et al., Journal of Solid State Chemistry **110**, 208 (1994).
6. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and, M.J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
7. S. Sakai, R. Arita, K. Held, and, H. Aoki, Phys. Rev. B **74**, 155102 (2006).
8. E. Gull et al., Rev. Mod. Phys. **83**, 349 (2011).
9. E. Gorelov, T.O. Wehling, A.N. Rubtsov et al., Phys. Rev. B **80**, 155132 (2009).
10. J. Mravlje et al., arXiv:1010.5910v1 (2010).
11. A.H. Nevidomskyy and P. Coleman, Phys. Rev. Lett. **103**, 147205 (2009).
12. A.I. Lichtenstein, M.I. Katsnelson, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **87**, 067205 (2001).
13. K. Held and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **84**, 5168 (2000).
14. W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
15. A.N. Rubtsov, V.V. Savkin, and A.I. Lichtenstein, Phys. Rev. B **72**, 035122 (2005).
16. F. Schwabl, *Statistical Mechanics*, Advanced Texts in Physics, Springer Berlin Heidelberg, 2006.
17. A. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge University Press, N.Y., 1993.
18. C.-K. Chan, P. Werner, and, A.J. Millis, Phys. Rev. B **80**, 235114 (2009).