Письма в ЖЭТФ, том 61, вып.5, стр.375 - 379

СВЕРХТЕКУЧЕСТЬ В ОДНОМЕРНОЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ БОЗОННОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА: ЧИСЛЕННЫЙ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

*В.А.Кашурников, А.И.Подливаев, Б.В.Свистунов**

Московский государственный инженерно-физический институт
115409 Москва, Россия

**Российский научный центр "Курчатовский институт"*
123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 24 ноября 1994г.
После переработки 11 января 1995 г.

Исследована сверхтекучесть (при $T = 0$) и ее подавление беспорядком в одномерной бозе-системе методом точной диагонализации гамильтоновой матрицы с расчетом нижних возбужденных состояний. Продемонстрировано наличие в спектре помимо обычных фононных возбуждений еще и так называемых сверхтоковых состояний. Вблизи теоретической точки фазового перехода сверхтекучесть – бозе-стекло, отвечающей значению универсального параметра $K = 2/3$, наблюдается резкое изменение расщепления фононных уровней. Вместе с тем резкое возрастание расщепления сверхтоковых уровней имеет место при K, близком к 1/2, что не вписывается в рамки известных представлений.

Большинство численных исследований сверхтекучести имеет дело либо с термодинамическими характеристиками системы [1–4], либо со свойствами основного состояния [5, 6]. В одномерном случае, однако, проблема сверхтекучести в достаточно большой, но конечной системе, может быть исследована путем анализа спектра низколежащих возбужденных состояний. Действительно, добавочную энергию, связанную со сверхтоковым состоянием с топологическим квантовым числом M (нумерующим состояния с различными значениями циркуляции скорости) в одномерной замкнутой цепочке длиной L можно записать в виде

$$E_{SC}^{(M)} = 2\pi^2 M^2 \Lambda_S / L \;, \tag{1}$$

где Λ_S – сверхтекучая жесткость. При $|M| \sim 1$ энергия сверхтокового состояния имеет тот же макроскопический масштабный коэффициент L^{-1}, что и энергия фонона с минимальным импульсом:

$$E_{ph}^{(1)} = 2\pi c/L \;, \tag{2}$$

c – скорость звука. Более того, в самой интересной области, где разупорядоченная система близка к точке исчезновения сверхтекучести, эти энергии одного порядка (переход должен иметь место при $K = 2/3$, $K = c/\pi\Lambda_S$ [7], а из уравнений (1), (2) следует, что $E_{ph}^{(1)}/E_{SC}^{(1)} = K$). Таким образом, при $K \sim 1$ низкоэнергетическая часть спектра замкнутой бозонной цепочки должна содержать сверхтоковые уровни (СУ) наряду с фононными. "Сверхсвойства" этих уровней должны проявляться в стабильности относительно беспорядка: даже в сильно разупорядоченной системе их расщепление должно быть мало. Расщепление нижних фононных уровней также должно быть малым, однако можно ожидать, что оно будет больше, чем у СУ. Таким образом, исследование расщеплений может дать качественную информацию о наличии сверхтекучести, а энергии низколежащих состояний позволяют получить значения макроскопических параметров, характеризующих сверхтекучую систему: Λ_S, c и K (см. уравнения (1), (2)).

Перейдем к анализу численных результатов. Мы изучали бозонную модель Хаббарда с диагональным беспорядком:

$$H = \sum_{i=1}^{N_a} \left\{ -(a_i^+ a_{i+1} + a_{i+1}^+ a_i) + \varepsilon_i n_i + \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) \right\} . \qquad (3)$$

Здесь a_i – оператор уничтожения бозона на узле i; $n_i = a_i^+ a_i$; ε_i – случайная величина, равномерно распределенная на интервале от $-W/2$ до $W/2$. Замкнутость цепочки означает, что $a_{N_a+1} \equiv a_1$. Большинство расчетов проводилось в системе с числом узлов $N_a = 11$ и числом бозонов $N_b = 7$ (размерность гильбертова пространства равна 19448). Специально выбиралось несоизмеримое заполнение $N_b \neq N_a$, чтобы исключить интерференцию с переходом Мотта.

Параметр взаимодействия U обычно выбирался в интервале от 2 до 6, так как в этом случае $K \sim 1$, то есть близко к области фазового перехода, который может происходить при увеличении W или U (при $W \neq 0$). Характерный спектр представлен на рис.1*a* и 2*a*. Уровни 1*a* и 1*b* – суперпозиция однофононных состояний с минимальным импульсом $\pm k_0$, $k_0 = 2\pi/L$; уровни 2*a* и 2*b* – суперпозиция двухфононных состояний $\{k_0, k_0\}$ и $\{-k_0, -k_0\}$, уровень *3* – двухфононное состояние $\{k_0, -k_0\}$, уровни 4*a* и 4*b* – суперпозиция сверхтоковых уровней с $M = \pm 1$. Значения уровней отнормированы следующим образом. Отсчет идет от основного состояния, и система единиц выбирается так, что полусумма уровней 1*a* и 1*b* равна единице. В такой нормировке значение первого СУ совпадает с $1/K$.

Идентификацию уровней легко провести, если рассмотреть спектральную картину в предельных случаях $U \to \infty$ и $U \to 0$ ($W = 0$). Предел $U \to 0$ удобен для идентификации фононных линий, так как фононы превращаются в обычные невзаимодействующие частицы, а СУ резко уходят в верх спектра. В этом случае гамильтониан диагонализуется аналитически и найденные численно уровни могут быть легко идентифицированы путем сравнения значений энергий с аналитическими результатами. При включении и увеличении взаимодействия к квазичастичным элементарным возбуждениям (фононам) спускаются СУ, которые таким образом могут быть выявлены по остаточному принципу. Дополнительным критерием для определения СУ может служить то обстоятельство, что в пределе $U \to \infty$ модель (3) при $W = 0$ эквивалентна идеальному ферми-газу. При этом основное состояние всегда невырождено (в случае четного числа частиц необходима добавочная калибровочная фаза π), а кратность вырождения первого возбужденного состояния равна четырем. Два состояния из квартета являются предельным случаем фонона с минимальным импульсом $\pm k_0$, а два других – не что иное как предельный случай сверхтокового состояния с $M = \pm 1$ (сдвижка ферми-поверхности как единого целого). Альтернативный путь для отличия СУ от фононных линий – расчет коррелятора плотность–плотность. В сверхтоковых состояниях, в противоположность фононным возбуждениям, он демонстрирует монотонное поведение как функция расстояния. Более того, коррелятор плотность-плотность для СУ количественно очень близок к аналогичному коррелятору для основного состояния, в полном соответствии с фундаментальными принципами сверхтекучести.

щественной малости расщеплений фононных и сверхтоковых линий. Поэтому можно ожидать, что наблюдаемые в ней эффекты, пусть даже связанные с конечностью размера, должны иметь место и в гораздо больших системах.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 94-02-05755 и 95-02-06191а) и Международного научного фонда (проект MAA000), а также при частичном финансировании по грантам INTAS-93-2834 [Европейского сообщества] и NWO-07-30-002 [Голландской организации научных исследований].

---

1. G.G.Batrouni and R.T.Scalettar, Phys. Rev. B **46**, 9051 (1992).
2. W.Krauth and N.Trivedi, Europhys. Lett. **14**, 627 (1991).
3. W.Krauth, N.Trivedi, and D.Ceperley, Phys. Rev. Lett. **67**, 2307 (1991).
4. M.Makivic, N.Trivedi, and S.Ullah, Phys. Rev. Lett. **71**, 2307 (1993).
5. K.J.Runge, Phys. Rev. B **45**, 1316 (1992).
6. В.Ф.Елесин, В.А.Кашурников, Л.А.Опенов, Письма в ЖЭТФ **60**, 174 (1994).
7. T.Giamarchi and H.J.Schulz, Phys. Rev. B **37**, 325 (1988).
8. E.Dagotto, Preprint 02527, Florida State University, National High Magnetic Field Laboratory, 1983.
9. S.Pissanetzky, Academic, Orlando, 1984, ch.6.

расщеплений свидетельствует о существенно различной природе сверхтоковых состояний и нормальных возбуждений.

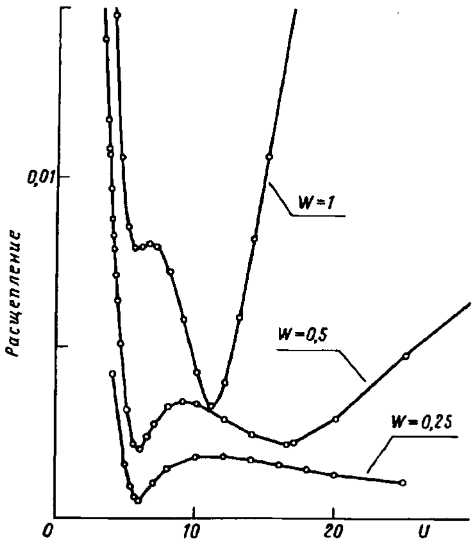

Рис.3. Зависимость расщепления первого фононного уровня от U при различных W

Кратко опишем численный метод. Сначала, исходя из некоторой начальной волновой функции, модифицированным методом Ланцоша [8] определяется необходимое число энергетических уровней. Затем из трехдиагональной матрицы Релея [9] восстанавливается система приближенных функций, и исходная волновая функция разлагается по ним. Как известно, получившаяся система содержит паразитные состояния из-за численных ошибок. Эти состояния легко идентифицировать по малому вкладу в исходную функцию и исключить. После этого система переортогонализуется и корректируется методом Ньютона. Относительные ошибки расчета энергетических уровней $10^{-13} \div 10^{-11}$ для основного состояния и $10^{-9} \div 10^{-5}$ для первых десяти возбужденных состояний. (Под относительной ошибкой мы понимаем отношение абсолютной погрешности вычисления собственных значений, устанавливаемой по невязке волнового вектора, к характерному расстоянию между уровнями.) Проблема вырождения уровней решается повторением процедуры с новой исходной функцией, ортогонализованной ко всем предварительно полученным состояниям. Суммарная система состояний опять переортогонализуется и корректируется методом Ньютона.

В заключение суммируем основные результаты. Мы представили численный анализ сверхтекучести в одномерной бозонной модели Хаббарда, исследуя низколежащие спектральные линии и их расщепления в присутствии беспорядка. Мы обнаружили, что расщепления сверхтокового уровня резко возрастают при $K \sim 1/2$, в то время как особенности в расщеплении фононного уровня проявляются при $K = 2/3$. Если поведение фононного уровня укладывается в известные теоретические предсказания [7], то поведение СУ-расщепления трудно обьяснить имеющимся ренорм-анализом. Разумеется, такое поведение (а также особенности фононного расщепления после точки фазового перехода при $U > 5,8$, $K > 2/3$) можно отнести на счет конечности системы. Заметим, однако, что система с $N_a = 11$ уже достаточно велика, что проявляется в су-

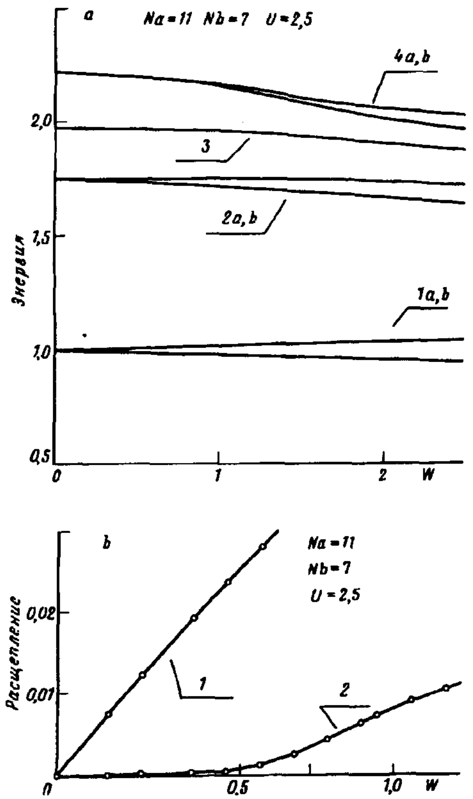

Рис.1

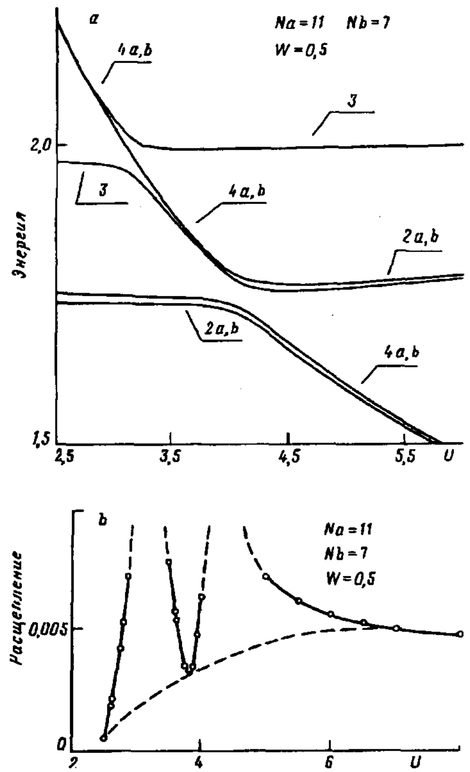

Рис.2

Рис.1. Эволюция спектра при увеличении W: *a* – общая картина, *b* – расщепления первого фононного *(1)* и первого сверхтокового *(2)* уровней

Рис.2. Эволюция спектра при увеличении U: *a* – общая картина, *b* – расщепление первого сверхтокового уровня

Рис.1*a* показывает эволюцию спектра с увеличением степени беспорядка W. На рис.1*b* показано качественное отличие поведения СУ-расщепления от фононного. СУ-расщепление существенно нелинейно, в то время как фононное прямо пропорционально W. СУ-расщепление очень мало вплоть до $W = 0,6$, а затем резко возрастает и становится сравнимым с фононным, что напоминает некий фазовый переход. Интересно, что при этом параметр K близок к $1/2$, т.е. согласно [7] в этой области система должна оставаться сверхтекучей.

Эволюция спектра с увеличением U показана на рис.2. Картина здесь более сложная из-за гибридизации СУ с фононными уровнями. Однако, если отвлечься от гибридизационных резонансов с уровнями 2 и 3, поведение СУ-расщепления (рис.2*b*, штриховая линия) очень похоже на представленное на рис.1*b*, и особенности возникают при K близком к $1/2$. Расщепление первого фононного уровня (рис.3) демонстрирует явно выраженный экстремум при $U = 5,8$, имеющий место при любой степени беспорядка, при этом K очень близко к значению $2/3$ (см. рис.2*a*), где согласно [7] должен иметь место переход в состояние бозе-стекла. Такое различие поведения СУ- и фононного