

ПЕРЕХОД МОТТОВСКИЙ ИЗОЛЯТОР–СВЕРХТЕКУЧЕСТЬ В ОДНОМЕРНОЙ БОЗОННОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА: КВАНТОВЫЙ МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

*В.А.Кашурников, А.В.Красавин, Б.В.Свистунов**

*Московский государственный инженерно-физический институт (технический
университет)
115409 Москва, Россия*

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

Поступила в редакцию 24 мая 1996 г.

Квантовым траекторным алгоритмом Монте-Карло при низких температурах рассчитаны значения диэлектрической щели Δ в одномерных системах взаимодействующих бозонов, описываемых гамильтонианом Хаббарда. Исследована зависимость Δ от размера системы, температуры и параметров модели. Показано, что цепочка с числом узлов $N_a = 50$ уже достаточна для оценки термодинамического значения критической величины $(t/U)_c$, при которой в соизмеримой системе происходит переход из диэлектрического в сверхтекучее состояние. Эта величина, $(t/U)_c = 0.300 \pm 0.005$, в пределах погрешности расчета совпадает со значением, полученным ранее с помощью комбинированного метода "точная диагонализация плюс ренормгрупповой анализ", $(t/U)_c = 0.304 \pm 0.002$. Вблизи критической области продемонстрировано характерное костерлиц-таулессовское поведение диэлектрической щели: $\Delta \sim \exp[-b(1 - t/t_c)^{-1/2}]$.

PACS: 05.30.Jр, 05.70.Јк, 74.20.Мп

Одной из наиболее богатых по фазовой диаграмме моделей является бозонная модель Хаббарда [1]. Она с успехом используется для описания сверхтекучего гелия [1], для анализа бозонных возбуждений фермионных систем [2], квантовых спиновых возбуждений [3], для исследования вихревой решетки в ВТСП [4]. Даже в одномерном случае она представляет самостоятельный интерес в связи с существованием в ней фазовых переходов сверхтекучесть – изолятор и сверхтекучесть – бозе стекло костерлиц-таулессовского типа [1, 5–7]. Из-за сложности аналитических исследований в рамках данной модели интенсивно используются численные подходы, такие как метод точной диагонализации и Монте-Карло. Однако результаты расчета критического значения параметра модели $(t/U)_c$ для одномерного случая, соизмеримого заполнения (число бозонов N_b равно числу узлов N_a) и фазового перехода сверхтекучесть – изолятор сильно расходятся. Так, из чистой теории возмущений, усовершенствованная с помощью ренормгруппового анализа (РГ) дает $(t/U)_c = 0.265$ [9], прямая экстраполяция данных точной диагонализации для конечных систем к термодинамическому пределу приводит к $(t/U)_c = 0.275$ [10] и $(t/U)_c = 0.22$ [11], а в [12] из расчета квантовым методом Монте-Карло делается вывод, что $(t/U)_c = 0.215$. В то же время приближенным методом анзац Бете [13] получено $(t/U)_c = 0.289$, а ренормгрупповой анализ в реальном пространстве [14] "редуцированного" гамильтониана приводит, как и чистая теория возмущений, к $(t/U)_c = 0.215$.

Такое рассогласование результатов связано с особенностями одномерного случая, так как критические параметры стремятся к своему термодинамическому значению (то есть в пределе $N_a \rightarrow \infty$) логарифмически медленно (как степенные функции параметра $1/\ln(N_a)$). В этой ситуации для корректного скейлинга необходимо либо брать очень большие размеры системы (часто недостижимые для численных методов), либо точно знать зависимость параметров модели от размера системы. Такую зависимость дают для одномерного случая известные ренормгрупповые (РГ) уравнения [5-7]. Используя это обстоятельство, в работе [15] с помощью комбинированного подхода "точная диагонализация + РГ-анализ" удалось провести корректный скейлинг к термодинамическому пределу и, в частности, получить критическое значение с контролируемой точностью: $(t/U)_c = 0.304 \pm 0.002$. Очень близкое к этому значение $(t/U)_c = 0.3$ было также получено недавно методом ренормгруппы в реальном пространстве [16].

Однако для полноты картины следовало бы убедиться, что квантовый метод Монте-Карло, позволяющий рассчитывать большие системы, приводит к такому же значению. К сожалению, результаты расчета [12] заметно отличаются от указанной величины $(t/U)_c$. Поэтому целью настоящей работы является корректный расчет методом Монте-Карло критического значения и сопоставление его с полученным комбинированным методом "РГ-анализ + точная диагонализация". Мы получили критическую величину $(t/U)_c = 0.300 \pm 0.005$, которая совпадает с результатами комбинированного метода [15] в пределах погрешности. Особенно отметим, что расчет основан на исследовании поведения моттовской щели (то есть диэлектрической фазы), в отличие от метода [15], где фазовый переход изучался со стороны сверхтекучего состояния.

Гамильтониан одномерной бозонной модели Хаббарда имеет вид [1, 8-15]

$$H = -t \sum_{i=1}^{N_a} (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1}) + (U/2) \sum_{i=1}^{N_a} n_i (n_i - 1), \quad (1)$$

где a_i^+ (a_i) - операторы рождения (уничтожения) бозона на узле i ; t - матричный элемент перескока; U - энергия отталкивания бозонов на узле; $n_i = a_i^+ a_i$ ($0 \leq n_i \leq N_b$, N_b - число бозонов в системе).

Основное состояние гамильтониана (1) является диэлектрическим лишь тогда, когда N_b кратно N_a , а величина t достаточно мала [1, 12]. При этом сверхтекучая плотность ρ_s равна нулю, и в спектре возбуждений имеется диэлектрическая щель $\Delta = \mu_+ - \mu_-$, где химпотенциалы μ_+ и μ_- определяются соотношениями $\mu_+ = E(N_a + 1) - E(N_a)$, $\mu_- = E(N_a) - E(N_a - 1)$, $E(N_b)$ - энергия системы из N_b бозонов. На фазовой диаграмме $\mu - t/U$ область диэлектрической фазы ограничена кривыми $\mu_+(t/U)$ и $\mu_-(t/U)$ [1, 12]. Увеличение t ведет к переходу в сверхтекучее состояние с $\Delta = 0$ и $\rho_s \neq 0$. На фазовой диаграмме $\mu - t/U$ ему соответствует трикритическая точка $(t/U)_c$ [1, 7-12].

Квантовым траекторным методом Монте-Карло (аналогичным [12]) мы считали энергию $E(N_b)$ как функцию t/U при $N_b = N_a - 1$, N_a , $N_a + 1$ для цепочек с различным числом узлов N_a и периодическими граничными условиями. Схема Монте-Карло была вполне устойчива даже при достаточно низких температурах $T \leq 0.03125t$ (см. таблицу).

Энергия системы, рассчитанная методом Монте-Карло и точной диагонализацией. Погрешность разбиения Троттера $\Delta\tau^2 tU = 0.02$ (звездочки - $\Delta\tau^2 tU = 0.01$). Все величины указаны в единицах t

Параметры одномерной бозонной системы			Квантовый траекторный метод Монте-Карло		Метод точной диагонализации	
N_a	N_b	U	Энергия	T	Энергия	T
6	6	0	-11.9664 ± 0.0037	0.0625	-12.00000	0
8	6	1	-10.4757 ± 0.0043	0.03125	-10.49209	0.0
8	6	0	-11.15414 ± 0.100	0.5	-11.38516	0.5
8	6	0	-9.83858 ± 0.100	1.0	-9.92721	1.0
6	6	2	-8.2068 ± 0.0045	0.0625	-8.22385	0
6	6	3	-6.8363 ± 0.0055	0.0625	-6.84017	0
8	8	3	-8.9976 ± 0.0070	0.0625	-9.00732	0
-	-	- **	-8.9973 ± 0.0070	0.0625	-	-
8	7	3	-8.9257 ± 0.0046	0.0625	-8.93211	0
8	9	4 **	-6.4927 ± 0.0038	0.03125	-6.49212	0
12	12	3.125	-13.06234 ± 0.0063	0.0625	-13.07270	0

На рис.1 изображены фазовые диаграммы $\mu - t/U$ для $N_a = 16$ и 50 при низкой температуре $T = 0.0625t$. Здесь же для сравнения отмечены МК-данные [12] для $N_a = 16$ и на порядок большей температуре $T = 0.5t$. Нам не ясно, из каких соображений фазовая диаграмма в [12] не продолжена в область $t/U > 0.2$, так как щель Δ еще не равна нулю в этой точке.

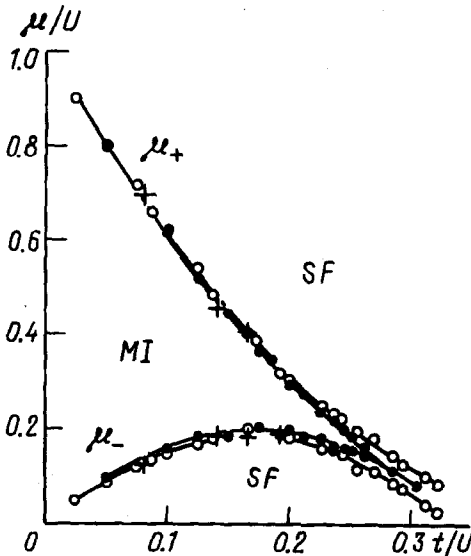


Рис.1. Фазовая диаграмма для бозонной цепочки с $N_b = N_a$ и $N_a = 16$ (o) и 50 (•), $T = 0.0625t$; MI - фаза моттовского диэлектрика; SF - фаза сверхтекучей жидкости. Показаны также данные из [8] для $N_a = 16$ (+) и $T = 0.5t$

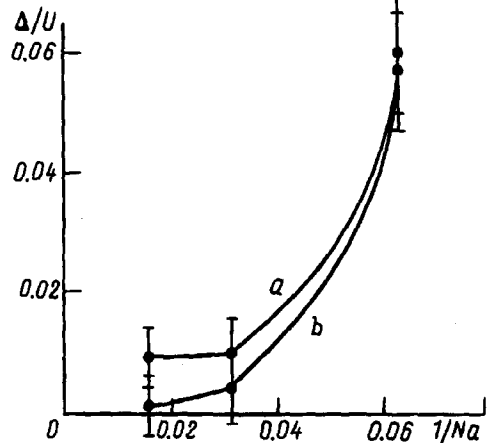


Рис.2. Зависимость диэлектрической щели Δ от размера системы при $t/U = 0.294$ (a) и $t/U = 0.315$ (b). Показаны точки для $N_a = 16; 32; 64$, $T = 0.03125t$

Так же, как и при расчете методом точной диагонализации [10], мы наблюдаем сужение моттовской области при увеличении размера системы. Видно, что фазовые границы большей системы практически сливаются в точке

$(t/U)_c = 0.3$. Сильная зависимость фазовых границ в критической области от размера системы диктует необходимость убедиться в том, что Δ при $N_a = 50$ уже слабо чувствительна к N_a в этом диапазоне t/U . Рис.2 показывает, что система с числом узлов $N_a > 30 - 40$ уже является макроскопически большой для расчета критического значения в термодинамическом пределе, и точка перехода локализована в диапазоне $0.294 < t/U < 0.315$.

Чтобы убедиться, что температура достаточно низка для анализа, на рис.3 мы приводим температурную зависимость Δ близко к критической области ($t/U = 0.225$). Виден довольно резкий спад диэлектрической щели при возрастании температуры до $T \sim \Delta$, что объясняется экспоненциальным ростом вероятности возбуждения системы. При более низких температурах величина Δ стабилизируется, то есть мы при $0.225 < t/U < 0.3$ находимся в устойчивой моттовской фазе (в отличие от данных [12]).

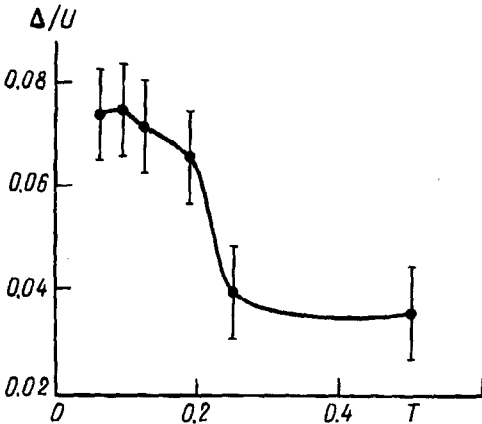


Рис.3. Температурная зависимость диэлектрической щели Δ при $t/U = 0.225$, $N_a = 50$

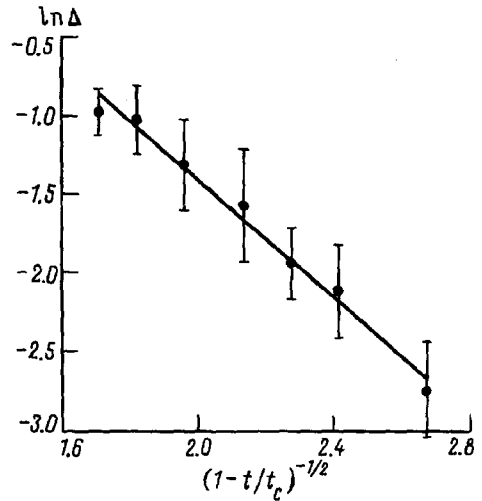


Рис.4. Костерлиц-таулессовское поведение диэлектрической щели Δ вблизи критической точки $(t/U)_c = 0.304$; $N_a = 50$, $T = 0.0625t$

В критической области $t/U \sim 0.3$ моттовская щель резко уменьшается в достаточно широкой области по t/U (рис.1), так что уточнить критическое значение параметра t/U непосредственно не представляется возможным. Более того, согласно РГ-уравнениям [5-7], для прямой экстраполяции к термодинамическому пределу необходима экспоненциально низкая температура при экспоненциально большом размере системы и, соответственно, экспоненциально высокой точности расчета!

Поэтому для окончательного уточнения критического значения мы воспользуемся известным в одномерной ситуации универсальным костерлиц-таулессовским поведением Δ вблизи точки перехода. Так, в окрестности t_c зависимость Δ от t должна иметь вид $\Delta \sim \exp[-b(1 - t/t_c)^{-1/2}]$ [1, 5-7], где b - некоторый неуниверсальный численный коэффициент. Такая зависимость Δ от t в критической области действительно имеет место (рис.4), причем $(t/U)_c = 0.300 \pm 0.005$ (при больших отклонениях $(t/U)_c$ от приведенного значе-

ния линейность заметно нарушается). Заметим, что соответствующая величина $b \sim 1.9$ близка к результату [9].

По-видимому, неточность определения критического значения из данных Монте-Карло [12] связана с тем, что искомую критическую точку определяли непосредственно из условия равенства нулю сверхтекучей плотности ρ_s , а не из обращения в нуль щели Δ . Для конечной системы в одномерной ситуации размер переходной области, в которой $\rho_s \rightarrow 0$, крайне медленно сокращается с увеличением масштаба системы (как $1/\ln(N_a)$). Это означает, что область, в которой $\rho_s \rightarrow 0$ для конечной системы, достаточно велика в единицах t/U .

Таким образом, с помощью квантового траекторного метода Монте-Карло мы провели анализ критической точки для перехода моттовский диэлектрик – сверхтекучесть в соизмеримой бозонной системе со стороны диэлектрической фазы и получили величину $(t/U)_c = 0.300 \pm 0.005$. Это значение совпадает в пределах ошибки с полученными недавно результатами: $(t/U)_c = 0.304 \pm 0.002$ [15] ("РГ-анализ + точная диагонализация"; со стороны сверхтекучей фазы); $(t/U)_c = 0.3$ [16] (ренормгруппа в реальном пространстве). Вблизи критической точки продемонстрировано типичное костерлиц-таулессовское поведение моттовской щели $\Delta \sim \exp[-b(1 - t/t_c)^{-1/2}]$, при этом значение численного коэффициента $b \sim 1.9$ также близко к полученному методом ренормгруппы в реальном пространстве [16]. Заметим, что из ренормгрупповых уравнений следует, что существует простая связь между параметром b , описывающим критическое поведение моттовской щели, и параметром b_1 , входящим в выражение для критической зависимости параметра K – универсальной характеристики системы в сверхтекучей фазе ($K = 1/2 - b_1 \sqrt{t/t_c - 1}$). Эта связь дается универсальным отношением $b/b_1 = \pi/4$ (*). Параметр b_1 может быть получен с хорошей точностью из результатов точной диагонализации для конечных кластеров. Используя метод, описанный в работе [15], мы нашли: $b_1 = 2.88$. Таким образом, в рамках точности определения параметра b (около 25%, см. рис.4) мы видим, что соотношение (*) действительно выполняется.

Мы благодарны Дж.Фририксу (J.Freericks) и Л.А.Опену за полезные дискуссии. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект 94-02-05755 и 95-02-06191).

1. M.P.A.Fisher, P.B.Weichman, G.Grinstein, and D.S.Fisher, Phys. Rev. B **40**, 546 (1989).
2. M.C.Cha, M.P.A.Fisher, S.M.Girvin et al., Phys. Rev. B **44**, 6883 (1991). T.C.Choy and F.D.M.Haldane, Phys. Lett. A **90**, 83 (1982).
3. R.T.Scalettar, G.G.Batrouni, A.P.Kampf, and G.T.Zimanyi, Phys. Rev. B **51**, 8467 (1995).
4. U.C.Tauber and D.R.Nelson, Phys. Rev. B **52**, 16106 (1995).
5. T.Giamarchi and H.J.Schulz, Phys. Rev. B **37**, 325 (1988).
6. F.D.M.Haldane, Phys. Rev. Lett. **47**, 1840 (1981).
7. J.M.Kosterlitz and D.J.Thouless, J. Phys. C **6**, 81 (1973); J.M.Kosterlitz, J. Phys. C **7**, 1046 (1974).
8. J.K.Freericks and H.Monien, Europh. Lett. **26**, 545 (1994).
9. J.K.Freericks and H.Monien, Phys. Rev. B **53**, 2691 (1996).
10. В.Ф.Елесин, В.А.Кашурников, Л.А.Опен, Письма в ЖЭТФ **60**, 174 (1994).
11. L.A.Openov, Phys. Low-Dim. Struct. **10/11**, 365 (1995).
12. G.G.Batrouni, R.T.Scalettar, and G.T.Zimanyi, Phys. Rev. Lett. **65**, 1765 (1990); G.G.Batrouni and R.T.Scalettar, Phys. Rev. B **46**, 9051 (1992).
13. W.Krauth, Phys. Rev. B **44**, 9772 (1991).
14. K.G.Singh and D.S.Rokhsar, Phys. Rev. B **46**, 3002 (1992).
15. V.A.Kashurnikov and B.V.Svistunov, Phys. Rev. B **53**, 11776 (1996).
16. Ramesh V.Pai, Rahul Pandit, H.R.Krishnamurthy, and S.Ramasesha, Phys. Rev. Lett. **76**, 2937 (1996).