

## Влияние нарушения подрешеточной симметрии на фазовую диаграмму расширенной модели Хаббарда

С. Д. Мостовой,<sup>1\*</sup> О. В. Павловский<sup>2†</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра квантовой статистики и теории поля, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт» ИТЭФ, Россия, 117218, Москва,

ул. Большая Черемушкинская, д. 25

(Поступила в редакцию 14.05.2022; подписана в печать 23.05.2022)

Исследуется влияние нарушения подрешеточной симметрии в расширенной модели Хаббарда на положение фазового перехода полуметалл-антиферромагнетик. Показывается, что задание отличающихся на подрешетках значений интенсивности взаимодействия электронов на одном узле приводит к сдвигу точки фазового перехода. Обсуждается связь с формированием спинового конденсата на подрешетках. Демонстрируются изменения в кинетической и потенциальной энергиях электронов.

PACS: 05.50.+q, 02.70.-c, 02.70.Uu. УДК: 538.9

Ключевые слова: метод Монте-Карло, модель Хаббарда, графен, нарушение симметрии, фазовый переход.

### ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе рассмотрена расширенная модель Хаббарда [1], применяемая для описания коллективных свойств релятивистских электронов в графене [2] в режиме сильной связи. Одной из задач является теоретическое предсказание тепловых и электрических свойств такой системы при изменениях геометрии, количества и вида атомов примесей, введении подложки. К сожалению, аналитические вычисления с правильным электростатическим потенциалом взаимодействия электронов невозможны. Также необходим учет подрешеточной и спиновой степеней свободы. Перечисленные технические трудности приводят к необходимости разработки численных методов расчета наблюдаемых и корреляторов. Часто используются статическая и динамическая теория среднего поля [3], вспомогательные поля на решетке [4, 5], операторное вторичное квантование [6, 7, 8]. В случае решеточных вычислений применяют аппроксимацию статистической суммы.

Настоящая работа была выполнена при помощи метода Гибридного Монте-Карло со вспомогательными полями Хаббарда с использованием преобразования Хаббарда-Стратоновича согласно методике, изложенной в работах [9, 10]. Целью работы является исследование эффектов, вызываемых нарушением подрешеточной симметрии двух подрешеток графена путем задания отличных друг от друга значений потенциала взаимодействия электронов на одном узле. Это приводит к тому, что электронам энергетически выгодно занимать преимущественно одну из подрешеток. Указанный эффект можно получить на практике при ис-

пользовании подложек со специальной структурой, такой как у нитрида бора. Одной из экспериментальных работ, описывающих изменение зонной структуры электронов при введении подложки, является [11]. В частности, в ней указано, что использование данной подложки приводит к открытию энергетической щели в электронных состояниях, что может позволить применить графен совместно с полупроводниками для создания электронных устройств.

### 1. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ

В качестве теоретической модели используется расширенная модель Хаббарда на гексагональной решетке с  $2 \times L \times L$  узлами. Заданы периодические граничные условия. Гамильтониан модели имеет вид

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\kappa \sum_{\langle x,y \rangle, \sigma} (\hat{a}_{x,\sigma}^\dagger \hat{a}_{y,\sigma} + \text{h.c.}) + \frac{1}{2} \sum_{x,y} V_{xy} \hat{q}_x \hat{q}_y, \quad (1)$$

где  $\kappa$  характеризует интенсивность перескока электрона между соседними узлами,  $\langle x, y \rangle$  обозначает пару соседних узлов,  $\sigma$  – проекция спина,  $\hat{q}_x = \hat{a}_{x,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{x,\uparrow} + \hat{a}_{x,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{x,\downarrow} - 1$  есть электрический заряд, и  $\hat{a}_{x,\sigma}$  представляет оператор уничтожения электрона со спином  $\sigma$  в узле  $x$ .  $V_{xy}$  обозначает матрицу электростатического взаимодействия электронов и содержит в своих элементах значения  $V_{00}$  (электроны на одном узле),  $V_{01}$  (электроны на соседних узлах) или 0. Для вычислений выбрано  $\kappa = 2.8$ ,  $V_{01} = 0.8$ , а  $V_{00}$  меняется в некоторой окрестности значения 3.0. Решеточная дискретизация статистической суммы приводит к формулам следующего вида:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \right\} = \int \mathcal{D}[\zeta, \zeta^*] \mathcal{D}[\phi, \chi] \times \exp \left\{ -S_{\text{HS}} - \zeta^* (M M^\dagger)^{-1} \zeta \right\}, \quad (2)$$

\* sd.mostovoy@physics.msu.ru

† pavlovsky@physics.msu.ru

## 2. ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

$$S_{\text{HS}} = \frac{\delta^{-2}}{2} \phi \tilde{V}^{-1} \phi + \frac{(\chi - (1 - \alpha)V_{00}\delta^{3/2})^2}{2(1 - \alpha)V_{00}} \delta^{-2}, \quad (3)$$

$$\tilde{V}_{xy} = \alpha V_{00} \delta_{xy} + (1 - \alpha)V_{xy}, \quad (4)$$

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -E_{T-1}^{(f)} \\ E_0^{(k)} & 1 & 0 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & E_0^{(f)} & 1 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & E_1^{(k)} & 1 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_1^{(f)} & 1 & & 0 \\ \vdots & & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad (5)$$

$$E_t^{(k)} = -\exp\left\{\kappa\delta \sum_{\substack{x,y, \\ (a,b)}} (\delta_{ax}\delta_{by} + \delta_{ay}\delta_{bx})\right\}, \quad (6)$$

$$E_t^{(f)} = -\text{diag} \exp\{-\delta^{-1/2}(i\varphi_{xt} + \chi_{xt})\}, \quad (7)$$

где  $E_t^{(f)}$  – диагональные матрицы размером  $N_s \times N_s$ ,  $N_s = 2L^2$ ,  $E_t^{(k)}$  – плотные матрицы  $N_s \times N_s$ ,  $\alpha = 0.95$  – параметр относительного вклада полей Хаббарда  $\varphi_{xt}$  и  $\chi_{xt}$ . В наших расчетах  $\beta = 1/(0.2\kappa)$ . Общее число временных слоев достигает  $2T$ , где  $T = 60$ .

В качестве наблюдаемых использовались стандартные параметры порядка: средний квадрат спина на подрешетке, приведенный к одному узлу, и аналогичная величина заряда. Их можно определить следующим образом:

$$\langle S^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{L^4} \left( \sum_{x \in A} \hat{S}_{x,3} \right)^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{L^4} \left( \sum_{x \in B} \hat{S}_{x,3} \right)^2 \right\rangle, \quad (8)$$

$$\langle q^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{L^4} \left( \sum_{x \in A} \hat{q}_x \right)^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{L^4} \left( \sum_{x \in B} \hat{q}_x \right)^2 \right\rangle, \quad (9)$$

где  $\hat{S}_{x,3} = \hat{a}_{x,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{x,\uparrow} - \hat{a}_{x,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{x,\downarrow}$  представляет собой проекцию спина в узле  $x$  на выделенную ось квантования,  $L$  – линейный размер решетки.

Нарушение подрешеточной симметрии вводится путем выбора для каждой из подрешеток своего значения интенсивности взаимодействия  $V_{00}$  двух электронов на одном узле. В настоящей работе принято обозначить эти два значения через  $V_{00} \pm \Delta$ . Таким образом, “ширина” разделения составляет  $2\Delta$ , а нарушение является симметричным относительно невозмущенной ситуации (когда  $\Delta = 0$ ). В работе проводились вычисления для  $\Delta \leq 0.25$ .

На Рис. 1 представлен результат расчета квадратного корня из параметра порядка (8) для решеток двух размеров ( $L = 6$  и  $L = 8$ ) в ситуациях, когда нарушение подрешеточной симметрии отсутствует, либо составляет  $\Delta = 0.2$  для диапазона центрального значения  $V_{00}$  от 2.6 до 4.3. Из графика можно предположить, будто различие результатов имеет место при всех  $V_{00}$ , но это лишь артефакт конечного объема решетки, на которой производятся вычисления. Действительно, этот же график демонстрирует существенное влияние эффекта конечного объема ( $L$  мало) на получаемые результаты, поэтому требуются дополнительные действия для обработки получаемых результатов. Это может быть выполнено, например, путем проведения ряда расчетов одной и той же величины на решетках разного размера с последующей экстраполяцией по величине обратного линейного размера решетки  $1/L$  к нулю. Получаемый результат считается оценкой значения данной величины при работе с бесконечным листом графена.

Нужно отметить, что применение данной методики для  $\Delta = 0$  приводит к правильной оценке положения фазового перехода полуметалл-антиферромагнетик, полученной, например, в работе [12]. Эта величина составляет порядка  $V_{00} = 3.8$ .

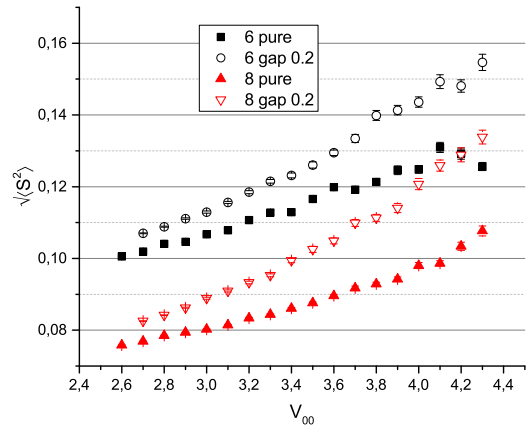


Рис. 1. Поведение параметра порядка (8) для решеток  $6 \times 6$  и  $8 \times 8$  для ситуаций с («gap») и без («pure») нарушения подрешеточной симметрии

Выполненный по экстраполяции переход к пределу бесконечного объема для данных, полученных в результате работы вычислительной программы, дает результат, показанный на Рис. 2. Каждая из приведенных кривых имеет два характерных поведения – в областях малых и больших значений  $V_{00}$ . Хотя сильные температурные флуктуации не позволяют точно судить о зависимости параметра порядка после фазового перехода, область изменения поведения может

быть локализована достаточно точно. Это позволяет отметить примерное положение точки фазового перехода для каждого значения  $\Delta$ . Соответствующие  $V_{00}$  отмечены вертикальными линиями на Рис. 2. Набор линий показывает устойчивое смещение границы двух фаз влево, в область малых значений параметра  $V_{00}$ .

Данный результат может быть объяснен, если учесть, что подрешетка с интенсивностью взаимодействия  $V_{00} - \Delta$  перетягивает на себя электроны, которые могут образовать спиновый конденсат на этой подрешетке раньше, чем это произойдет на другой. Под спиновым конденсатом подразумевается ситуация, когда два электрона с противоположными направлениями спинов находятся на одном узле, тогда как на соседнем узле электрона нет (образуется положительный ион атома углерода). Электроны переходят на первую из упомянутых подрешеток в силу энергетической выгоды, поскольку параметр  $V_{00} \pm \Delta$  on-site взаимодействия характеризует величину работы по расположению электрона на данном узле. Таким образом, формирование упорядоченной фазы начинается, с точки зрения значений  $V_{00}$ , раньше, чем это было бы при  $\Delta = 0$ . На другой же подрешетке (с интенсивностью on-site взаимодействия  $V_{00} + \Delta$ ) конденсат еще не сформирован, поэтому возникает целая область параметров  $V_{00}$ , при которых электроны упорядочены лишь частично, на одной подрешетке.

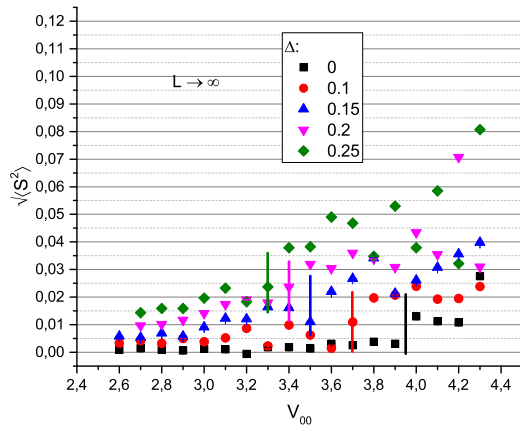


Рис. 2. Смещение границы двух фаз в область меньших  $V_{00}$  при возрастании величины  $\Delta$ . Границы в каждом конкретном случае выбраны приблизительно, но тенденция к смещению выражена достаточно ярко

Данный факт находит отражение в характере изменения кинетической и потенциальной энергий системы в рассматриваемой области. Рис. 3 демонстрирует, что в области  $V_{00}$  от 3.9 до 4.1 электроны обладают повышенной кинетической энергией. Кинетическая энергия  $K = \langle \hat{T} \rangle$  вычислена путем нахождения квантово-механического среднего первого слагаемого в гамиль-

тониане (1). Это можно объяснить активным перемещением электронов между двумя подрешетками. Также очевиден скачок потенциальной энергии  $\Pi = \langle \hat{U} \rangle$  после установления конденсатов на обеих подрешетках, то есть с правой стороны от фазового перехода (начиная с  $V_{00} \approx 4.2$ ).

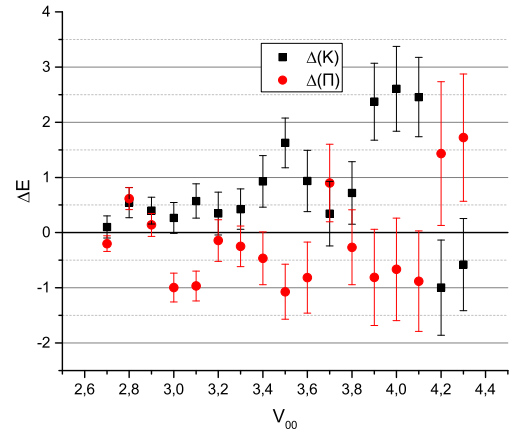


Рис. 3. Превышение составляющих энергий (в расчете на один узел решетки) в ситуации с  $\Delta = 0.1$  над случаем  $\Delta = 0$ . Можно заметить, что в области параметров от 3.9 до 4.1 происходит перестройка электронной плотности, вызванная последовательным установлением спинового конденсата на каждой из подрешеток

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе показано, что нарушение подрешеточной симметрии в расширенной модели Хаббарда путем введения различия на  $2\Delta$  между значениями интенсивности взаимодействия электронов на одном узле приводит к направленному смещению границы фазового перехода полуметалл-антиферромагнетик в область малых значений  $V_{00}$ . Это наблюдение представляет интерес, потому что именно в этой области параметров модели, как оценивают, существует точка физического состояния графена. Ее положение может быть описано [13] значениями  $V_{00} \approx 3.27, V_{01} \approx 0.8$ . Поскольку, с физической точки зрения, подрешеточная симметрия может быть нарушена путем выбора подходящей подложки (в качестве примера можно привести работу [11]), то сказанное означает, что, возможно, существует способ получить графен в фазе, отличной от полуметалла. Это может быть использовано в области нанoeлектроники и спинтроники.

## Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 21-12-00237).

- 
- [1] *Smith D., Von Smekal L.* // Phys. Rev. B. 2014. **89**, 195429.  
[2] *Novoselov K., Geim A., Morozov S., Jiang D. et al.* // Science. 2004. **306**. P. 666.  
[3] *Raczkowski M. et al.* // Phys. Rev. B. 2020. **101**, 125103.  
[4] *Drut J. E., Lahde T. A.* // Phys. Rev. B. 2009. **79**, 165425.  
[5] *Classen L., Herbut I. F., Janssen L., Scherer M. M.* // Phys. Rev. B. 2015. **92**, 035429.  
[6] *Peters R., Kawakami N.* // Phys. Rev. B. 2014. **89**, 155134.  
[7] *Murakami M.* // J. Phys. Soc. Jpn. 2000. **69**, 1113.  
[8] *Paki J., Terletska H., Isakov S., Gull E.* // Phys. Rev. B. 2019. **99**, 245146.  
[9] *Buividovich P., Smith D., Ulybyshev M., Von Smekal L.* // Phys. Rev. B. 2018. **98**, 235129.  
[10] *Buividovich P., Smith D., Ulybyshev M., Von Smekal L.* // Phys. Rev. B. 2019. **99**, 205434.  
[11] *Mao J., Jiang Y., Moldovan D., Li G., Watanabe K., Taniguchi T. et al.* // Nature Physics. 2016. **12**. P. 545.  
[12] *Wu W. and Tremblay A.-M. S.* // Phys. Rev. B. 2014. **89**, 205128.  
[13] *Wehling T. O., Sasloglu E., Friedrich C.* // Phys. Rev. Lett. 2011. **106**, 236805.
- 

## Effect of sublattice symmetry breaking on the phase diagram of the extended Hubbard model

S. D. Mostovoy<sup>1a</sup>, O. V. Pavlovsky<sup>2b</sup>

<sup>1</sup>*Department of Quantum statistics and field theory, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University  
Moscow 119991, Russia*

<sup>2</sup>*National Research Centre «Kurchatov Institute» – ITEP. Moscow 117218, Russia  
E-mail: <sup>a</sup>sd.mostovoy@physics.msu.ru, <sup>b</sup>pavlovsky@physics.msu.ru*

The effect of sublattice symmetry breaking in the extended Hubbard model on the position of semimetal-antiferromagnet phase transition is considered. It is shown that setting different values of on-site interaction intensity on the sublattices leads to a shift of the phase transition point. The formation of spin condensate on sublattices is discussed. Changes in kinetic and potential energies of electrons are demonstrated.

PACS: 05.50.+q, 02.70.-c, 02.70.Uu.

*Keywords:* Monte Carlo method, Hubbard model, graphene, symmetry breaking, phase transition.

*Received 14 May 2022.*

### Сведения об авторах

1. Мостовой Сергей Дмитриевич — аспирант; тел.: (495) 939-12-90, e-mail: sd.mostovoy@physics.msu.ru.
  2. Павловский Олег Владимирович — канд. физ.-мат. наук, снс; тел.: (495) 939-12-90, e-mail: pavlovsky@physics.msu.ru.
-