

Коллективные свойства электронных возбуждений ниже 0,1 эВ в расширенной модели Хаббарда

С. Д. Мостовой,^{1,2*} О. В. Павловский^{1,2†}

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

² НИЦ «Курчатовский институт» — ИТЭФ. Россия, 117218, Москва, ул. Большая Черемушкинская, д. 25

(Поступила в редакцию 29.05.2023; подписана в печать 06.07.2023)

Исследуется температурное поведение энергетических величин — кинетической энергии и компонент потенциальной энергии — в области температур ниже 0,25 эВ в расширенной модели Хаббарда в фазе полуметалла. Установлено, что коллективные свойства электронных возбуждений проявляют различные особенности и зависят от температуры. Для анализа используются наблюдаемые размерности энергии и параметры порядка. Рассказано о технических сложностях моделирования и способах их преодоления.

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

Ключевые слова: метод Монте–Карло, модель Хаббарда, графен, энергия, экситоны.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе рассмотрена расширенная модель Хаббарда [1] на гексагональной решетке, применяемая для описания коллективных свойств электронов в графене [2] в режиме сильной связи. Одной из задач является теоретическое предсказание тепловых и электрических свойств такой системы при изменениях геометрии, введении подложки, изменении параметров взаимодействия электронов и температуры. К сожалению, аналитические вычисления в широких диапазонах параметров модели невозможны. Возникающие технические сложности приводят к необходимости разработки численных методов расчета средних значений квантово-механических наблюдаемых и корреляторов. Часто используются статическая и динамическая теории среднего поля [3], вспомогательные поля на решетке [4, 5], операторное вторичное квантование [6–8]. В случае решеточных вычислений применяются аппроксимацию статистической суммы.

Данная работа продолжает исследования, опубликованные в [9], где рассматриваются наблюдаемые размерности энергии с целью вычисления теплоемкости электронных возбуждений двумя методами и сравнения получаемых результатов. Дальнейшие исследования [10] показали преимущества использования дополнительных вспомогательных полей Хаббарда помимо уже ставших стандартными [11, 12] узловых полей в рамках метода Квантового Монте–Карло для фермионных систем, заданных гамильтонианом в терминах операторов рождения-уничтожения. Настоящая работа применяет указанный, расширенный, метод с целью преодоления вычислительных и статистических

трудностей, мешающих получению аккуратных средних в области температур ниже 0.3 эВ.

Целью работы является исследование поведения энергии в зависимости от температуры при значениях последней ниже 0.25 эВ. Полученные данные могут помочь в интерпретации низкотемпературных коллективных состояний электронов в расширенной модели Хаббарда.

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 κ характеризует интенсивность перескока электрона между соседними узлами, $\langle x, y \rangle$ обозначает пару соседних узлов, $\sigma = \pm 1$ — 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 σ 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 $\kappa = 2.8$ эВ, $V_{00} = 3.2\kappa$, $V_{01} = 0.8\kappa$.

Гамильтониан (1) соответствует нулевому химическому потенциалу модели и является симметричным относительно замены частиц со спином вверх на частицы со спином вниз и наоборот. Благодаря этому факту вероятностная мера, пропорциональная $e^{-\beta \hat{H}}$, положительно определена. Удобно воспользоваться данной симметрией и ввести два сорта частиц [13] (называемых «электронами» и «дырками»), операторы

* sd.mostovoy@physics.msu.ru

† pavlovsky@physics.msu.ru

рождения-уничтожения которых определяются правилами

$$\hat{a}_x = \hat{a}_{x,\uparrow}, \hat{a}_x^\dagger = \hat{a}_{x,\uparrow}^\dagger, \quad \hat{b}_x = \pm \hat{a}_{x,\downarrow}^\dagger, \hat{b}_x^\dagger = \pm \hat{a}_{x,\downarrow}.$$

Во второй паре операторов знак изменен на одной из подрешеток гексагональной решетки модели с целью восстановления общего знака «минус» в первой сумме

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

где $\hat{q}_x = \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x - \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x$.

Решеточная дискретизация статистической суммы приводит к формулам следующего вида [10, 11]:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \right\} = \int \mathcal{D}[\varphi, \chi, \xi] \exp \left\{ -S_{\text{HS}} \right\} |\det M|^2, \quad (2)$$

$$S_{\text{HS}} = \frac{\delta^{-2}}{2V'_{00}} \varphi^2 + \frac{(\chi - (1-\alpha)V'_{00}\delta^{3/2})^2}{2(1-\alpha)V'_{00}} \delta^{-2} + \sum_{\mu} (\xi^{(\mu)})^2 \frac{\delta^{-2}}{V_{01}}, \quad (3)$$

$$V'_{00} = V_{00} - 3V_{01}, \quad \delta = \beta/N_T \quad (4)$$

$$\varphi^2 = \sum_{x,t} \varphi_{xt}^2, \quad (5)$$

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -E_{2N_T-1}^{(f)} \\ E_0^{(k)} & 1 & 0 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & E_0^{(f)} & 1 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & E_1^{(k)} & 1 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_1^{(f)} & 1 & & 0 \\ \vdots & & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad (6)$$

$$E_t^{(k)} = -\exp \left\{ \kappa \delta \left\| \sum_{\mu} \delta_{y,x+\mu} \right\|_{N_s \times N_s} \right\}, \quad (7)$$

$$E_t^{(f)} = -\text{diag} \exp \left\{ -\delta^{-1/2} \left(i \left(\varphi_{xt} + \sum_{\mu} (\xi_{xt}^{(\mu)} + \xi_{x-\mu,t}^{(\mu)}) \right) + \chi_{xt} \right) \right\}, \quad (8)$$

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 φ_{xt} и χ_{xt} . Используются узловые поля Хаббарда φ_{xt} и χ_{xt} и линковые поля $\xi_{xt}^{(\mu)}$, $\mu = 1, 2, 3$. В наших расчетах $\beta = 1/T$, где температура T выражена в энергетических единицах: $k_B = 1$. Общее число временных слоев достигает $2N_T$, где $N_T = 60, 80, 120, 140, 180, 200$ в зависимости от температуры моделирования. Разумеется, выбор большого числа временных слоев вызван необходимостью поддержания величины $\delta = \beta/N_T$ достаточно малой для уменьшения остаточного члена в разложении Сузуки-Троттера.

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:

$$\langle S^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{L^4} \left(\sum_{x \in A} \hat{S}_{x,3} \right)^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{L^4} \left(\sum_{x \in B} \hat{S}_{x,3} \right)^2 \right\rangle, \quad (9)$$

$$\langle q^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{L^4} \left(\sum_{x \in A} \hat{q}_x \right)^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{L^4} \left(\sum_{x \in B} \hat{q}_x \right)^2 \right\rangle, \quad (10)$$

где $\hat{S}_{x,3} = \hat{a}_{x,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{x,\uparrow} - \hat{a}_{x,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{x,\downarrow} = \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x - 1$ представляет собой проекцию спина в узле x на выделенную ось квантования, L — линейный размер решетки.

Целью исследования является вычисление энергетических величин, составляющих два вклада в \hat{H} : средней кинетической энергии

$$\langle \hat{T} \rangle = -\kappa \sum_{x \neq y} \langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_y \rangle \quad (11)$$

и средней потенциальной энергии (состоящей из двух компонент)

$$\begin{aligned} \langle \hat{U} \rangle &= \langle \hat{U}_1 + \hat{U}_2 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{x,y} \left\langle \left(\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x - \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x \right) V_{xy} \left(\hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y - \hat{b}_y^\dagger \hat{b}_y \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

В последнем случае под $\langle \hat{U}_1 \rangle$ понимается взаимодействие двух электронов на одном узле, $\langle \hat{U}_2 \rangle$ — на соседних.

2. ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 1 показаны результаты расчетов для средней кинетической и потенциальной энергий. Отметим характерные особенности: эффект конечного объема решетки важен только при температурах ниже 0.24κ . В этой же области меняется поведение энергии электронных возбуждений: если при более высоких температурах кинетическая энергия растет линейно (это

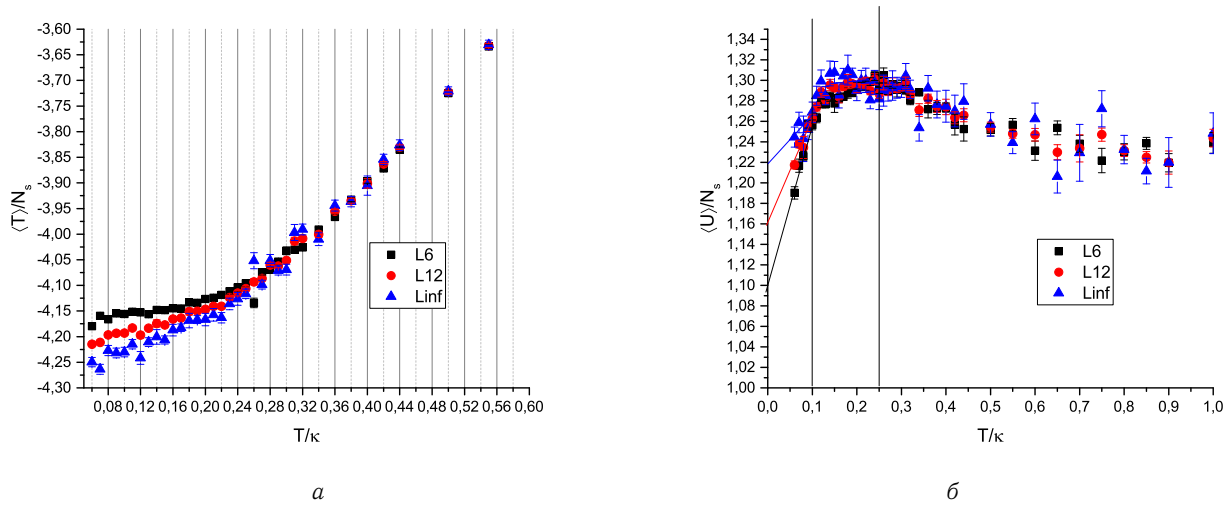


Рис. 1. Поведение средней кинетической и потенциальной энергий для решеток 6×6 и 12×12 в зависимости от температуры, а также экстраполяция к пределу бесконечного объема решетки

может быть интерпретировано как поведение «типа газа»), а потенциальная энергия при $T > 0.4\kappa$ практически постоянна, то при $T \approx 0.35\kappa$ начинает формироваться коллективное состояние за счет образования экситонов. Под экситоном понимается устойчивая пара электрон-дырка, когда на одном узле находятся преимущественно два электрона, а на соседнем — ни одного.

изведения в соседних узлах, наоборот, уменьшается. Поскольку пустой узел и узел с двумя электронами обладают зарядом $q_x = \pm 1$, то указанное поведение свидетельствует в пользу формирования пар электрон-дырка в соседних узлах. Коррелятор значений спинов в соседних узлах также убывает. Следует принять во внимание, что для состояний узла «электрон» и «дырка» $S_z = 0$, поэтому эта наблюдаемая также подтверждает формирование экситонных состояний.

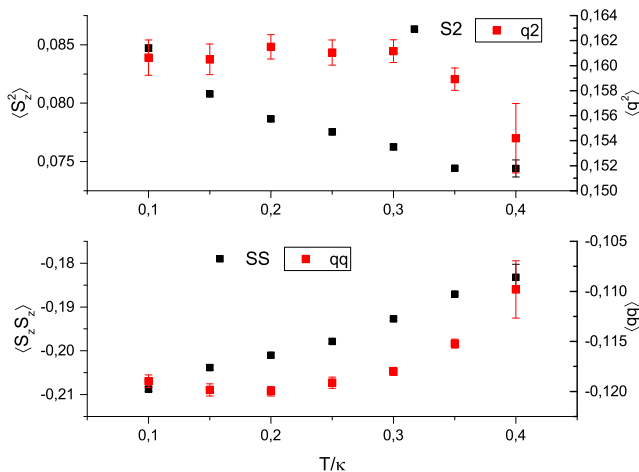


Рис. 2. Поведение параметров порядка и корреляторов для решетки 6×6

Формирование экситонов может быть доказано путем расчета наблюдаемых порядка (см. (9) и (10)), коррелятора проекции спина и коррелятора заряда в соседних узлах. Соответствующие результаты приведены на рис. 2. Легко видеть, что при уменьшении температуры от 0.4κ до 0.3κ резко возрастает средний квадрат заряда на узле, а среднее значение про-

высказанная интерпретация подтверждается и анализом поведения компонент потенциальной энергии, что показано на рис. 3: в области от 0.12κ до 0.22κ среднее значение потенциального взаимодействия в одном узле велико, это означает, что $q_x = \pm 1$, что соответствует наличию пустых узлов и узлов с двойным заполнением. Среднее значение потенциальной энергии взаимодействия зарядов на соседних узлах также сильно отрицательно, что соответствует заметному экситонному вкладу.

Особое внимание привлекает эффект в области $T < 0.15\kappa$ на рис. 1. Потенциальная энергия резко уменьшается, причем объемный эффект (проиллюстрированный в виде экстраполяции аппроксимирующих точки линий) становится весьма существенным. Последнее явно указывает на формирование коллективных состояний с дальним порядком. Для интерпретации результата обратимся к рис. 3. Потенциальная энергия взаимодействия электронов в соседних узлах по модулю уменьшается (будучи отрицательной, приближается к 0). Если два экситона устойчиво находятся близко друг к другу, то к отрицательной энергии взаимодействия электрона и дырки добавляется положительная энергия взаимодействия соседних двух электронов и соседних двух дырок. Этот фактор повышает значение $\langle U_2 \rangle$. Уменьшение $\langle U_1 \rangle$ свидетельствует об уменьшении общего количества узлов с однократ-

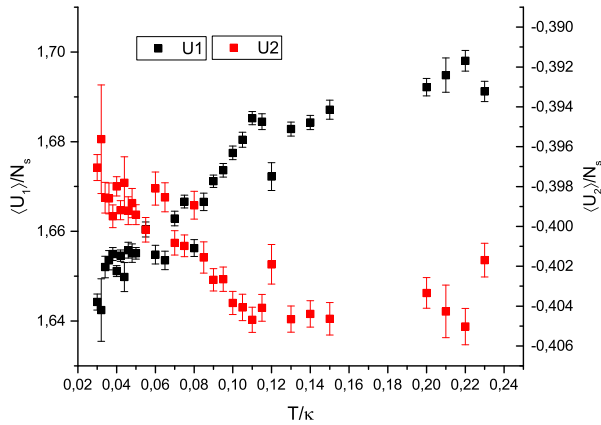


Рис. 3. Компоненты потенциальной энергии демонстрируют область существования экситонов и смену коллективного состояния в окрестности $T = 0.07k$

ным заполнением, поскольку большая их часть пусты или имеют двукратное заполнение.

Отдельный научный и технический интерес представляет определение поведения энергии при температурах ниже $0.1k$, потому что величина k существенно превышает комнатные температуры. В данной работе представлены данные вплоть до $0.022k$, что соответствует $715\text{ K} = 442\text{ C}$. Результаты для потенциальной энергии представлены на рис. 4.

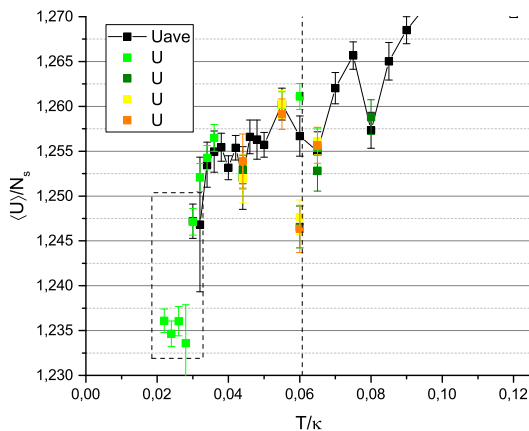


Рис. 4. Полная потенциальная энергия в диапазоне температур от $0.022k$ до $0.1k$. Кривые U_{ave} и первая из U показывают основные данные, тогда как третий, четвертый и пятый графики суть пересчеты при одних и тех же условиях для демонстрации существования метастабильных состояний около $0.06k$. Решетка 6×6

Отметим основные особенности. Во-первых, многократное повторение вычислений в точке $T = 0.06k$

подтверждает наличие метастабильных состояний, что часто соотносится с фазовым переходом. Более того, поведение кривой также меняется в окрестности этой точки: при температуре от $0.036k$ до $0.06k$ вычисления свидетельствуют о наличии плато, тогда как при температуре между $0.06k$ и $0.11k$ имеет место ярко выраженный рост.

Во-вторых, состояния при $T < 0.08k$ представляют существенные трудности для вычислений методом Квантового Монте-Карло. Требуется находить среднее по большому числу временных слоев, чем это достаточно при более высоких температурах. Анализ автокорреляций временных рядов значений наблюдаемых, вычисленных программой Монте-Карло с марковской цепью показывает, что конфигурационное пространство приобретает более сложный ландшафт, движение марковского процесса в которых сильно затруднено. Поэтому при вычислениях в области $T < 0.1k$ применение метода пяти полей (включающих линковые поля согласно [10]) существенно улучшает статистические результаты. Следует отметить, что в силу технических трудностей именно обсуждаемая область хорошо подходит для тестирования и улучшения методов преодоления метастабильных состояний в конфигурационном пространстве модели. Например, результаты вычислений показывают недостаточность метода псевдофермионных полей для получения статистически достоверного результата. В данной работе использован детерминантный метод Монте-Карло.

В-третьих, при вычислении на решетке в области $T < 0.03k$ играет роль дискретность нижних возбужденных уровней энергии электронных состояний в силу конечности размера L решетки. Разумеется, все дальнейшие вычисления в этой области должны быть выполнены при размерах решетки $L > 6$, что требует существенных вычислительных ресурсов и является нашей целью на будущее.

Вычислительная сложность в области низких температур проявляется также следующим образом. Как известно, разложение Сузуки-Троттера не является точным, но имеет остаточный член порядка δ^2 . При малых T величина $\beta = 1/T$ возрастает, следовательно, растет и $\delta = \beta/N_T$. При превышении некоторого порога алгоритм расходится. Для сохранения сходимости и аккуратного результата моделирования следует увеличивать количество временных слоев N_T . Это существенно увеличивает размерность матриц, описывающих состояние модели, (потому что $N_s \times N_s$ чисел повторяются $2N_T$ раз) что повышает вычислительное время.

Определение вклада в теплоемкость за счет взаимодействия электронов можно оценить следующим способом. Рассматривая область от $0.035k$ до $0.14k$, мы применили две функции для фиттинга (см. рис. 5): параболу $\langle U \rangle = A + BT + CT^2$ и степенную $\langle U \rangle = a + bT^c$. Результаты приведены в таблице

Рис. 5 показывает, что текущий уровень вычислений не позволяет сделать выбор в пользу одной из зависи-

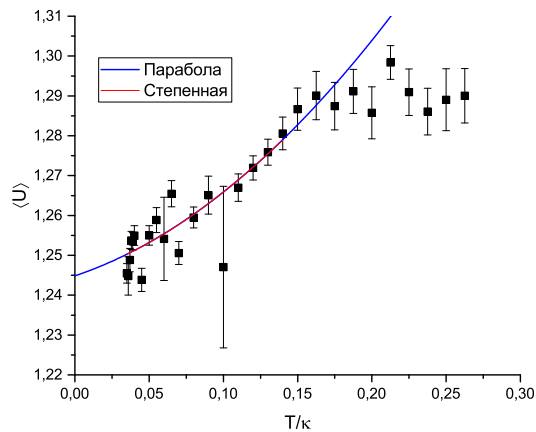


Рис. 5. Потенциальная энергия $\langle U \rangle$ как функция температуры в области низких и средних температур. Показаны результаты фиттинга при помощи параболы и степенной функции. Обе гипотезы на данный момент описывают точки вычислений, поэтому требуется дальнейшее исследование. Решетка 6×6

Таблица. Значения коэффициентов фиттинга значений, показанных на рис. 5.

A	1.245 ± 0.007	a	1.246 ± 0.006
B	0.1 ± 0.2	b	0.6 ± 1.0
C	0.9 ± 1.3	c	1.5 ± 0.8

мостей. Требуется дополнительные соображения. После того, как функция $\langle U \rangle(T)$ определена, вклад в теплоемкость может быть найдена простым дифференцированием.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе исследованы энергетические свойства электронных возбуждений в расширенной модели Хаббарда на гексагональной решетке при $V_{00} = 3.4k, V_{01} = 0.8k$ в области температур ниже $0.4k = 1.12$ эВ. Использовался детерминантный метод Монте-Карло с пятью полями Хаббарда: двумя узловыми и тремя линковыми. Этот метод [10] проявляет большую статистическую устойчивость и позволяет получить результаты с меньшим временем автокорреляции.

Целью работы являлось вычисление кинетических и потенциальных энергий ниже типичной температуры моделирования $0.56 - 1.12$ эВ. Представлены графики зависимости компонент энергии вплоть до значений 0.06 эВ. Анализ показывает изменения коллективных состояний электронов в окрестности температур 0.84 эВ и 0.168 эВ. Приведены аргументы в пользу формирования экситонных состояний. Указывается, что вычисления в низкотемпературной области требуют внимания к автокорреляционным свойствам получаемых значений наблюдаемых и отличаются вычислительной сложностью. Показано влияние конечного объема на получаемые результаты, а также обсуждаются технические приемы, использованные для преодоления сложностей при вычислениях в области низких температур.

Благодарности

Работа выполнена с использованием вычислительных ресурсов кластера ИЯИ РАН.

[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] Mostovoy S.D., Pavlovsky O.V. // Physics of Atomic Nuclei. 2022. **85**, P. S73–S79.
 [10] Mostovoy S., Pavlovsky O. // Physical Review E. 2023. **107**, 25307.
 [11] Buividovich P., Smith D., Ulybyshev M., Von Smekal L. // Phys. Rev. B. 2018. **98**, 235129.
 [12] Buividovich P., Smith D., Ulybyshev M., Von Smekal L. // Phys. Rev. B. 2019. **99**, 205434.
 [13] Buividovich P.V., Polikarpov M.I. // Phys. Rev. B. 2012. **86**, 245117.
 [14] Wu W. and Tremblay A.-M. S. // Phys. Rev. B. 2014. **89**, 205128.
 [15] Wehling T. O., Sasoglu E., Friedrich C. // Phys. Rev. Lett. 2011. **106**, 236805.

Collective properties of electronic excitations below 0.1 eV in the extended Hubbard model

S. D. Mostovoy^{1,a}, O. V. Pavlovsky^{2,b}

¹*Department of Quantum statistics and field theory, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
Moscow 119991, Russia.*

²*National Research Centre «Kurchatov Institute» — ИТЭР. Moscow 117218, Russia
E-mail: ^asd.mostovoy@physics.msu.ru, ^bpavlovsky@physics.msu.ru*

The temperature behaviour of the energy quantities — kinetic energy and potential energy components — is studied in the temperature range below 0.25 eV in the semimetal phase of the extended Hubbard model. It has been established that the collective properties of electronic excitations exhibit various features and depend on temperature. The quantities of energy and order parameters are used for the analysis. The technical difficulties of modeling are mentioned as well as the ways to overcome them.

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

Keywords: Monte-Carlo method, Hubbard model, graphene, energy, excitons.

Received 29 May 2023.

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, ст. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-12-90, e-mail: pavlovsky@physics.msu.ru.