

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО

Д.В. Берков, С.В. Мешков

Предложен новый метод восстановления плотности состояний систем фермионов по мацубаровской функции Грина, получаемой квантовыми методами Монте-Карло. Метод отличается отсутствием подгоночных параметров и возможностью контролировать точность решения. Исследована одночастичная плотность состояний в одно- и двумерной модели Хаббарда.

Основной интерес при изучении систем взаимодействующих фермионов представляет энергетический спектр возбуждений. В связи с неадекватностью аналитических методов наиболее целесообразным представляется использование квантовых методов Монте-Карло, позволяющих измерять мацубаровские функции Грина для различных модельных гамильтонианов¹. Однако для получения достоверной информации об энергетическом спектре требуются также надежные методы аналитического продолжения гриновских функций на вещественную ось частот, разработке которых посвящена настоящая работа.

Восстановление плотности состояний $\rho(\epsilon)$ по мацубаровской температурной функции Грина $G(\tau, \tau)$ требует решения интегрального уравнения (см., напр.,²)

$$G(\tau = 0, \tau) = \pi^{-1} \int \frac{\rho(\epsilon) \exp(-\epsilon\tau) d\epsilon}{1 + \exp(-\epsilon\beta)} \quad (1)$$

Решение этого уравнения есть некорректная по Адамару задача: за счет неустойчивости по коротковолновым гармоникам малые ошибки в исходных данных $G(\tau)$ приводят к сколь угодно большим осцилляциям в решении $\rho(\epsilon)$. Для уравнений (1) с экспоненциальным ядром ни один из известных методов решения некорректных задач не дает надежных результатов. В работах²⁻⁵, непосредственно посвященных восстановлению плотности состояний квантовых систем, отсутствует удовлетворительный критерий выбора параметров сглаживания α и не приводится никакого способа оценки погрешности результата, хотя известно, что при ошибке в выборе α полученное решение может отличаться от истинного очень сильно.

Нами предложен новый метод решения некорректной обратной задачи вида (1), свободный от подгоночных параметров сглаживания и позволяющий оценить точность результата. С точки зрения вычислительных затрат наш метод существенно экономнее применявшихся в²⁻⁵, поскольку сводится к минимизации квадратичных функций с линейными ограничениями, для которой известны очень эффективные алгоритмы⁶.

Метод. После перехода к конечно-разностной аппроксимации уравнения (1) $\hat{A}\rho = g$ используется *SVD*-разложение матрицы $A = USV^T$ (матрицы U и V - ортогональные, S - диагональная с сингулярными числами s_i ; матрицы A на диагонали). После замены $\rho = \hat{V}y$ и $b = \hat{U}^T g$ и перехода к диагональной системе $y_i s_i = b_i$, мы полагаем $y_i = 0$ при s_i , меньших машинного ϵ . На вектор y накладывается две системы неравенств: условие неотрицательности $\rho(\epsilon)$, имеющее вид $\hat{V}y \geq 0$, и условие близости y_i к точному решению $y_i^0 = b_i/s_i$:

$$y_i^0 - \psi \delta_i / s_i \leq y_i \leq y_i^0 + \psi \delta_i / s_i$$

где δ_i - величины ошибок в b , определяемые с учетом ковариационной матрицы ошибок компонент g . После этого ищется минимальное значение ширины интервала ψ_{min} , ниже которого системы неравенств становятся несовместными.

Для получения результата описанная процедура применяется к серии реализаций гриновской функции $G(\tau)$, построенных из экспериментальной добавление к ней гауссова шума той же амплитуды, что и статистическая погрешность. Среднее $\bar{\rho}(\epsilon)$ по полученному таким образом набору $\rho(\epsilon)$ считается решением задачи, точность которого характеризуется амплитудой разброса $\langle [\rho(\epsilon) - \bar{\rho}(\epsilon)]^2 \rangle^{1/2}$ результатов для различных реализаций. Подробности плотности состояний, высота которых меньше разброса, естественно считать нефизическими. Прямое тестирование показывает, что решение оказывается достаточно гладким и никакой добавочной регуляризации не требуется.

Результаты. Мы изучали модель Хаббарда

$$H = - \sum (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma}) + U \sum n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})$$

при различных заполнениях в одномерном случае и при половинном заполнении в двух измерениях (половинному заполнению $\bar{n} = 0,5$ отвечает химпотенциал $\mu = U/2$) с числом узлов $N = 16$. Для получения одночастичной температурной функции Грина использовался стандартный вариант "детерминантного" алгоритма ¹ с числом "временных" интервалов $M = 64$ и расстоянием между ними $\Delta\tau = 0,25/U$. Число "измерений" гриновской функции бралось достаточно большим, так что погрешность результатов моделирования не превышала 0,002.

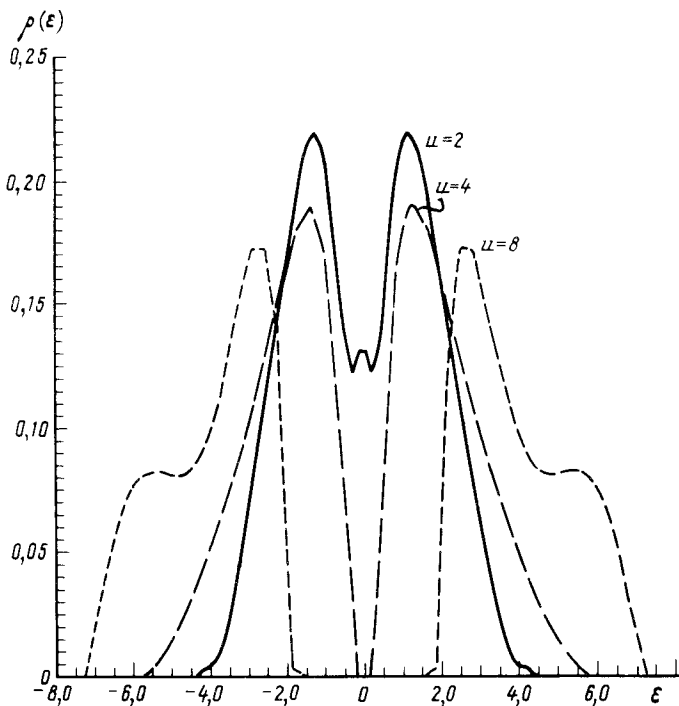


Рис. 1. Нормированная плотность состояний одномерной модели Хаббарда при половинном заполнении для различных значений U

Для одномерной модели ($d = 1$) Либ и Ву ⁷ показали, что при $\bar{n} = 0,5$ и $U > 0$ спектр одночастичных возбуждений распадается на две подзоны, щель между которыми растет с увеличением U . Известно также, что в пределе $U \rightarrow \infty$ в каждой подзоне форма $\rho(\epsilon)$ совпадает с формой плотности состояний при $U = 0$ ⁸.

Наши результаты для $\rho(\epsilon)$ при $d = 1$ и $\bar{n} = 0,5$ суммированы на рис.1. При $U = 2$ щель в $\rho(\epsilon)$ не проявляется, т.к. даже при $T = 0$ ее ширина $\Delta(U = 2) \approx 0,17$ очень мала и сравнима с температурой $T = 0,125$, при которой производилось моделирование для $U = 2$. При $U = 4$ появляется щель, близкая к точному результату $\Delta(U = 4) \approx 1,29$ при $T = 0$. При $U = 8$ щель становится ярко выраженной и, с учетом возможных температурных хвостов ($\approx 2T$), удовлетворительно совпадает с результатом Либа и Ву $\Delta(U = 8) \approx 4,68$. Обратим внимание также на начало появления при $U = 8$ второго пика в каждой подзоне, что демонстрирует стремление $\rho(\epsilon)$ к описанной выше асимптотической форме при $U \rightarrow \infty$.

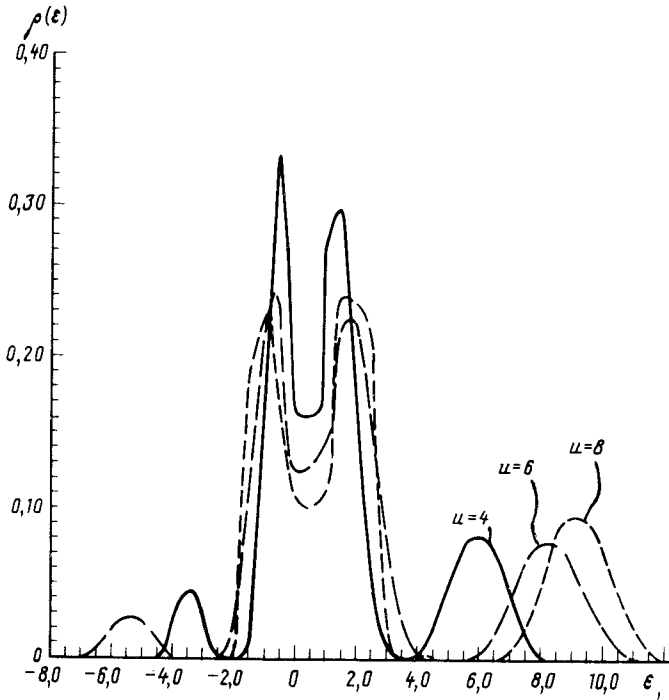


Рис. 2. Нормированная плотность состояний одномерной модели Хаббарда при неполновинном заполнении ($\mu = 0$) для различных значений U

При исследовании одномерной модели для $n \neq 0,5$, мы ограничились фиксированным значением химпотенциала $\mu = 0$. При этом с ростом U заполнение падает от $\bar{n} = 0,5$ при $U = 0$ до $\bar{n} = 0,25$ при $U = \infty$. Известно ¹, что при $\bar{n} \neq 0,5$ система представляет собой парамагнитный металл, так что $\rho(\mu) > 0$. Кроме того, при $U = \infty$ модель эквивалентна задаче о свободных бесспиновых фермионах с той же полной плотностью частиц на узле.

Восстановленная нами $\rho(\epsilon)$ для $U = 4, 6, 8$ при $\mu = 0$ представлена на рис.2. Основной вклад в $\rho(\epsilon)$ дает зона вблизи $\epsilon = 0$, форма которой с ростом U действительно стремится к плотности состояний невзаимодействующих фермионов. Пик при $\epsilon \approx U$ соответствует попаданию добавляемого электрона на уже занятый узел. Для не слишком больших U существует заметная вероятность нахождения двух электронов на одном узле. Удаление одного из таких электронов должно приводить к понижению энергии системы на величину $\sim U$. Пик при $\epsilon \approx -U$ для $U = 4$ и (меньшей площади) для $U = 6$ действительно наблюдается.

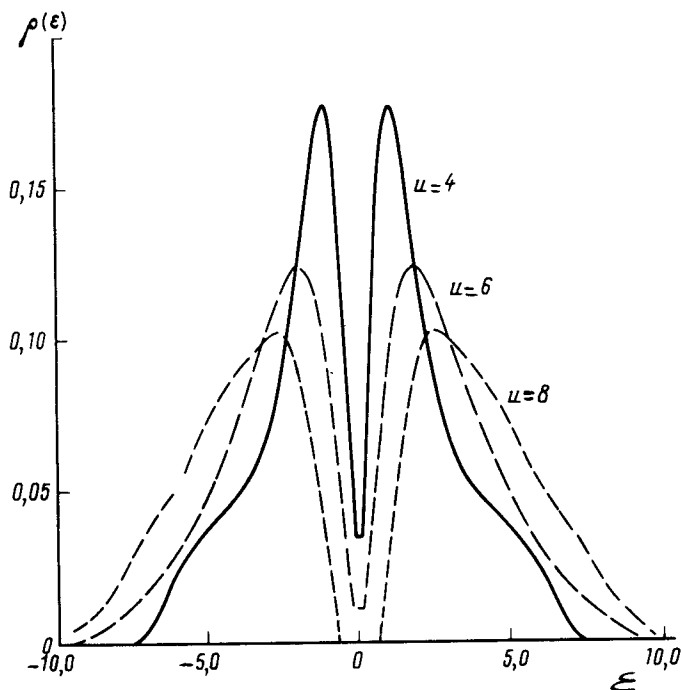


Рис. 3. Нормированная плотность состояний двумерной модели Хаббарда при половинном заполнении для различных значений U

Для двумерной модели Хаббарда точный вид $\rho(\epsilon)$ неизвестен даже в пределе $U \rightarrow \infty$. Взаимодействие электронов на узле должно при некотором $U > 0$, как и в одномерном случае, приводить к возникновению щели в $\rho(\epsilon)$ вблизи $\epsilon = 0$. Восстановленная нами $\rho(\epsilon)$ при $U = 6$ и $U = 8$ приведена на рис.3. В плотности состояний при $U = 8$ действительно видна щель, величина которой согласуется с результатами ².

Литература

1. Hirsch J.E. Phys. Rev. B, 1985, 31, 4403.
2. White S.R., Scalapino D.J. et al. Phys.Rev. Lett., 1989, 63, 1523.
3. Silver R.N., Silva D.S., Gubernatis J.E. Preprint LA-UR-89-3021.
4. Jarrell M., Biham O. Phys. Rev. Lett., 1989, 63, 2504.
5. White S.R. Preprint
6. Лоусон Ч., Хенсон Р. Численное решение задач метода наименьших квадратов. М.: Наука, 1986.
7. Lieb E.H., Wu F.Y. Phys. Rev. Lett., 1968, 20, 1445.
8. Brinkman W.F., Rice T.M. Phys. Rev. B, 1970. 2, 1324.