

ПЕРЕХОД МОТТОВСКИЙ ДИЭЛЕКТРИК - СВЕРХТЕКУЧАЯ ЖИДКОСТЬ В ОДНОМЕРНОЙ БОЗОННОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

В.Ф.Елесин, В.А.Кашурников, Л.А.Опенос

Московский государственный инженерно-физический институт (технический университет),

115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 8 июня 1994 г.

Методом точной диагонализации гамильтоновой матрицы численно рассчитаны значения диэлектрической щели Δ в конечных одномерных системах взаимодействующих бозонов, описываемых гамильтонианом типа Хаббарда. Путем экстраполяции на бесконечную систему определена критическая величина $(t/U)_c = 0,275 \pm 0,005$, при которой в цепочке с числом бозонов, равным числу узлов, происходит переход из диэлектрического в сверхтекучее состояние. Эта величина $(t/U)_c$ близка к точному результату, полученному аналитически для редуцированного гамильтониана. Показано, что редуцированная модель является хорошим приближением при $t/U \approx (t/U)_c$. В критической области $\Delta \sim \exp[-b(1 - t/t_c)^{-1/2}]$, где $b \approx 0,2$.

В последние годы большое внимание уделяется изучению низкоразмерных систем взаимодействующих бозонов на решетках [1], что связано как с самостоятельным значением, которое эти системы представляют для теории квантовых фазовых переходов, так и с необходимостью интерпретации конкретных экспериментов (см. ссылки в [1]). Интерес к проблеме стимулируется еще и тем, что одномерная бозонная модель Хаббарда остается одной из немногих одномерных задач, для которой отсутствует аналитическое решение [2].

Гамильтониан одномерной бозонной модели Хаббарда имеет вид [1]

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

где $a_i^\dagger (a_i)$ – операторы рождения (уничтожения) бозона на узле i ; t – матричный элемент перескока бозонов между ближайшими узлами; U – энергия отталкивания двух бозонов на узле; N_a – число узлов в цепочке; $n_i = a_i^\dagger a_i$ ($0 \leq n_i \leq N_b$, где N_b – полное число бозонов в системе). Далее мы полагаем $U = 1$, то есть измеряем все величины с размерностью энергии в единицах U .

Как известно [1], фазовый переход из диэлектрического в сверхтекучее состояние в модели (1) происходит только при соразмерном заполнении решетки бозонами (N_b кратно N_a), когда t достигает некоторого критического значения t_c . В работах [3] величина t_c вычислялась для случая $N_b = N_a$ методом Монте-Карло и оказалась равной $t_c = 0,215 \pm 0,01$. В то же время в [4] для несколько упрощенного "редуцированного" (см. ниже) гамильтониана удалось найти точное аналитическое решение $t_c = 1/2\sqrt{3} \approx 0,2887$, существенно отличающееся от результатов, полученных в [3]. Ренормгрупповой анализ [5] "редуцированного" гамильтониана при $N_b = N_a$ дал, как и метод Монте-Карло, $t_c = 0,215$. Если иметь в виду известную ограниченность метода Монте-Карло, связанную с большой погрешностью при низких температурах, то представляет

интересное нахождение t_c методом точной численной диагонализации гамильтоновой матрицы [6] и разрешение таким образом отмеченных противоречий.

В настоящей работе метод точной диагонализации использован (насколько нам известно, впервые) для расчета энергий основного состояния конечных одномерных систем взаимодействующих бозонов, описываемых гамильтонианом (1). Найдена величина $t_c = 0,275 \pm 0,005$, которая близка к точному значению для "редуцированной" модели. Показано также, что "редуцированный" гамильтониан является хорошим приближением при $t \approx t_c$.

Как показано в [1], основное состояние гамильтониана (1) является диэлектрическим лишь тогда, когда N_b/N_a — натуральное число, а величина t достаточно мала. При этом плотность ρ_s сверхтекучей компоненты равна нулю, и в спектре возбуждений имеется диэлектрическая щель $\Delta = \mu_+ - \mu_-$, где значения μ_+ и μ_- определяются соотношениями (далее мы рассматриваем, как и в [4,5], конкретный случай $N_b/N_a = 1$ в термодинамическом пределе) $\mu_+ = E(N_a + 1) - E(N_a)$, $\mu_- = E(N_a) - E(N_a - 1)$, $E(N_b)$ — энергия основного состояния системы из N_b взаимодействующих бозонов (точно так же, то есть как разность энергий возбуждений при добавлении и удалении одной частицы, Δ вводится и в фермионной модели Хаббарда [7]). На фазовой диаграмме $\mu - t$ (μ — химпотенциал) область диэлектрической фазы ограничена кривыми $\mu_+(t)$ и $\mu_-(t)$ [1]. Увеличение t ведет к переходу в сверхтекучее состояние с $\Delta = 0$, $\rho_s \neq 0$. На фазовой диаграмме $\mu - t$ ему соответствует трикритическая точка. Одна из координат этой точки определяет критическую величину t_c , при которой в цепочке с числом бозонов, кратным числу узлов, происходит переход из диэлектрического в сверхтекучее состояние [1, 3-5].

Мы численно рассчитали энергии $E(N_b)$ как функции t при $N_b = N_a - 1$, N_a , $N_a + 1$ для цепочек с $N_a = 4; 5; 6; 7; 8; 9$ узлами и периодическими граничными условиями. Относительная погрешность счета во всех случаях была не хуже 10^{-10} . Это позволило нам найти μ_+ , μ_- и Δ для различных N_a и путем экстраполяции к $N_a = \infty$ определить зависимость $\Delta(t)$ в термодинамическом пределе ($N_a \rightarrow \infty$, $N_b \rightarrow \infty$, $N_b/N_a = 1$).

На рис.1 изображены фазовые диаграммы $\mu - t$ для $N_a = 4$ и 9. Видно, что при малых t фазовые границы практически совпадают, то есть Δ почти не зависит от размеров системы. При $t > 0,15$ зависимость Δ от N_a очень сильная. Для определения $\Delta_0 \equiv \Delta(N_a = \infty)$ мы аппроксимировали Δ как функцию $1/N_a$ полиномом пятой степени (по шести точным значениям Δ при различных N_a) и нашли зависимость Δ_0 от t . Пример такой аппроксимации приведен на рис.2, а на рис.3 изображена кривая $\Delta_0(t)$. Критическая величина t_c , при которой Δ_0 обращается в нуль, равна $0,275 \pm 0,005$. Отметим, что для корректного определения Δ_0 при $\Delta_0 < 10^{-3}$ (вблизи t_c) проводилась более тщательная аппроксимация $\Delta(N_a)$ по степеням $1/N_a^\alpha$, где величина α подбиралась из условия наилучшего совпадения значений t_c , полученных экстраполяцией по шести ($N_a = 4 \div 9$), пяти ($N_a = 5 \div 9$), четырем ($N_a = 6 \div 9$) и трем ($N_a = 7 \div 9$) точкам. Мы получили $\alpha = 0,95 \pm 0,01$.

Известно [1], что фазовый переход, имеющий место при увеличении t в одномерной системе бозонов с $N_b = N_a$, принадлежит к универсальному классу двумерной XY-модели, то есть является переходом Березинского-Костерлица-Таулеса. Следовательно (см., например, [8]), в окрестности t_c зависимость Δ_0 от t должна иметь вид $\Delta_0 \sim \exp[-b(1 - t/t_c)^{-1/2}]$ (при $t < t_c$), где b — неуниверсальный численный коэффициент. Как видно из вставки на рис.3,

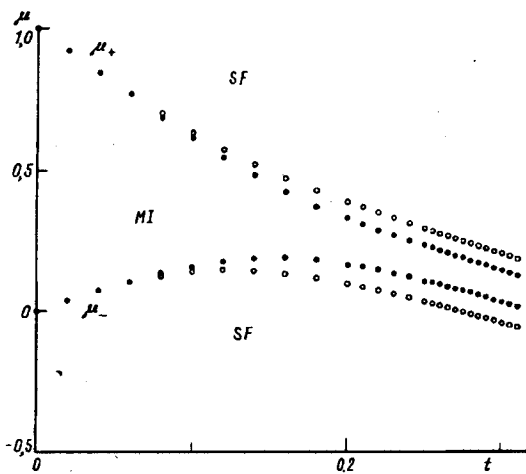


Рис.1. Зависимости μ_+ и μ_- (см. определения в тексте) от t для цепочек из $N_a = 4$ (○) и $N_a = 9$ (●) узлов ($U = 1$). MI – фаза моттовского диэлектрика; SF – фаза сверхтекучей жидкости

такая зависимость Δ_0 от t в критической области действительно имеет место: логарифм Δ_0 является линейной функцией величины $(1 - t/t_c)^{-1/2}$ в широком диапазоне значений $\ln(\Delta_0)$. При этом $b \approx 0,2$.

Найденное нами значение t_c очень близко к точному результату $t_c = 1/2\sqrt{3} \approx 0,2887$, полученному аналитически [4] для "редуцированной" одномерной бозонной модели Хаббарда. В этой модели энергия взаимодействия бозонов на узле решетки имеет вид (ср. с (1))

$$V(n_i) = \begin{cases} 0, & \text{если } n_i = 0, \text{ или } 1, \\ U, & \text{если } n_i = 2, \\ \infty, & \text{если } n_i > 2, \end{cases} \quad (2)$$

то есть на одном узле решетки не могут находиться более двух бозонов. С целью более детального сопоставления с результатами работы [4] мы также численно исследовали "редуцированный" гамильтониан с $V(n_i)$ в форме (2). Оказалось, что величины t_c для моделей (1) и (2) совпадают в пределах ошибки, хотя диапазон значений t_c (обусловленный погрешностью экстраполяции) для модели (1) лежит несколько ниже, чем для модели (2). Как следует из наших расчетов, при $N_b = N_a$ и $t \approx t_c$ вероятность реализации конфигураций с $n_i > 2$ (более двух бозонов на узле) для модели (1) составляет 0,8 % – в соответствии с данными [4]. Это говорит о том, что упрощение (2) исходного гамильтониана (1) действительно слабо влияет на характеристики системы при $t \approx t_c$,

Как уже упоминалось, ренормгрупповой анализ [5] "редуцированной" модели (2) дает $t_c = 0,215$. Такая же величина t_c (с погрешностью $\pm 0,01$) получена методом Монте-Карло [3] для гамильтониана (1). Результаты работ [3] и [5] отличаются от наших численных и точных аналитических [4] данных на 25%. Мы полагаем, что совпадение результатов работ [3] и [5] в пределах их погрешностей является случайным. Действительно, в [3] расчеты проводились хотя и для больших систем ($N_a \geq 16$), но при отличной от нуля температуре ($T = t/2$), и это могло существенно увеличить ошибку вычислений. Кроме того, в [3] отсутствует детальный анализ зависимости $\Delta(t)$ вблизи t_c . Что касается работы [5], ее авторам, по-видимому, не удалось полностью учесть сильные флуктуации в критической области, о чем говорит

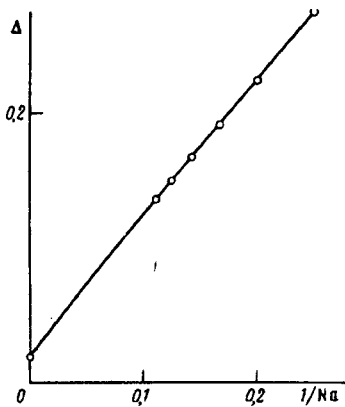


Рис.2

Рис.2. Зависимость диэлектрической щели Δ от $1/N_a$ при $t=0,23$ ($U=1$). Точки для $N_a=4; 5; 6; 7; 8; 9$ - результаты численных расчетов, сплошная кривая - аппроксимация $\Delta(1/N_a)$ полиномом пятой степени. $\Delta_0 = \Delta(1/N_a=0) = 0,019$

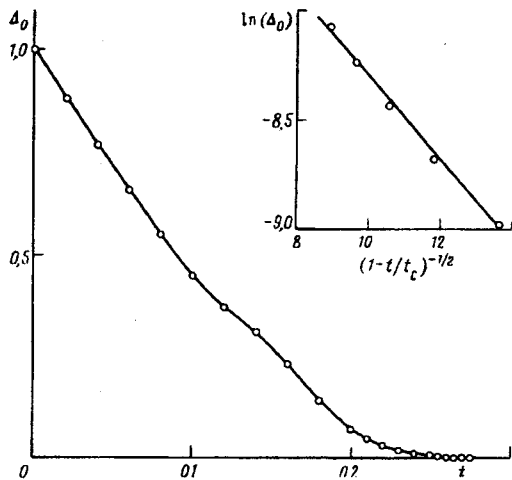


Рис.3

Рис.3. Зависимость Δ_0 от t ($U=1$). Точки - результаты экстраполяции $\Delta(1/N_a)$ при $t=\text{const}$, как на рис.2. $\Delta_0=0$ при $t_c=0,275$. На вставке изображена зависимость $\ln(\Delta_0)$ от $(1-t/t_c)^{-1/2}$

конечная величина найденного ими критического индекса $\nu = 4,87$ корреляционной длины ξ . Это хоть и больше, чем предсказывает теория среднего поля ($\nu = 0,5$), но меньше истинного значения $\nu = \infty$ [8]. Наши же расчеты позволили получить ожидаемую [8] экспоненциальную (а не степенную) зависимость $\xi \sim \Delta^{-1} \sim \exp[\text{const}(1-t/t_c)^{-1/2}]$ (см. вставку на рис.3).

Таким образом, наиболее точным значением t_c для модели (1) нам представляется величина $t_c = 0,275 \pm 0,005$, которая близка к аналитическому решению [4] для "редуцированной" модели (2), хорошо работающей при $t \approx t_c$.

Мы благодарны А.В.Крашенинникову и Б.В.Свистуну за обсуждение результатов, А.И.Подливаеву - за помощь в проведении численных расчетов. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 94-02-05755).

1. M.P.A.Fisher, P.B.Weichman, G.Grinstein, and D.S.Fisher, Phys. Rev. B **40**, 546 (1989).
2. T.C.Choi and F.D.M.Haldane, Phys. Lett. A **90**, 83 (1982).
3. 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).
4. W.Krauth, Phys. Rev. B **44**, 9772 (1991).
5. K.G.Singh and D.S.Rokhsar, Phys. Rev. B **46**, 3002 (1992).
6. В.Ф.Елесин, В.А.Кашурников, Л.А.Опенев, А.И.Подливаев, ЖЭТФ **99**, 237 (1991); ЖЭТФ **101**, 682 (1992); Physica C **195**, 171 (1992).
7. E.H.Lieb and F.Y.Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
8. Ю.А.Изюмов, Ю.Н.Скрябин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. - М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987.