

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ И ДИСПЕРСИЯ КВАЗИЧАСТИЦ В МОДЕЛИ ЭМЕРИ: НЕЛОКАЛЬНЫЙ ТРАЕКТОРНЫЙ АЛГОРИТМ МОНТЕ-КАРЛО

В.А.Кашурников, Ю.Г.Харченко

*Московский государственный инженерно-физический институт
115409 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 24 апреля 1996 г.

С помощью траекторного алгоритма Монте-Карло восстановлена спектральная плотность состояний в двумерной трехзонной модели Эмери для 108-узельного кластера $\text{Cu}_{36}\text{O}_{72}$. Получены дисперсионные зависимости квазичастиц в верхней хаббардовской зоне и в зоне коррелированных состояний, что соответствует электронному и дырочному допированиям высокотемпературных сверхпроводников. Вид изоэнергетических поверхностей близок к экспериментально наблюдаемому и подтверждает наличие особенностей в плотности состояний вблизи уровня Ферми.

PACS: 74.20.Mn

Экспериментальные данные по плотности состояний и дисперсии квазичастиц в высокотемпературных сверхпроводниках, полученные с помощью фотоэмиссии с угловым разрешением [1,2] и позитронной аннигиляции [3], свидетельствуют об особенности вблизи границы зоны Бриллюэна. Как показывают эксперименты, кривые $\epsilon(k)$ имеют достаточно широкую бездисперсионную область, что дает основание говорить о наличии особенностей в плотности состояний на уровне Ферми вблизи половинного заполнения. Зонные расчеты [4,5] не противоречат этим данным, однако они требуют дополнительных предположений об атомных потенциалах и не являются в полной мере первопринципными.

Плотность состояний и дисперсия квазичастиц исследовалась в $t-J$ -модели [6], $t-t'$ -модели [7], $t-t'-J$ [8], Хаббарда [9] и Эмери [10] в рамках различных приближений. Особенно следует отметить анализ зонной картины в наиболее реалистичной для высокотемпературных сверхпроводников модели Эмери [11-14], при этом часто используются приближения типа Хартри-Фока [12] или "slave-boson" [13]. Результаты также свидетельствуют о наличии бездисперсионных областей. Однако есть различия в получаемой плотности состояний и дисперсионных зависимостях [12-14], что связано с различными используемыми приближениями.

В связи с вышесказанным представляют несомненный интерес расчеты зонной структуры в реальных моделях без каких-либо приближений и упрощений.

Одним из таких подходов является расчет плотности состояний методом точной диагонализации малых кластеров [15,16]. Он дает достаточно достоверную картину зон. В частности, для модели Эмери [16] диагонализация двумерного кластера Cu_4O_8 приводит к реалистичной зонной структуре слоев CuO_2 . Однако малость системы не позволяет получать дисперсионные кривые (так, для кластера Cu_4O_8 имеется всего 4 разрешенных импульса в первой зоне Бриллюэна), а большая дискретность энергетических уровней требует дополнительного сглаживания плотности состояний для наглядности зонной картины [15,16].

Другим перспективным методом получения плотности состояний является восстановление спектральной плотности из мацубаровской функции Грина, рассчитываемой методом Монте-Карло [17–19]. В этом случае можно исследовать достаточно большие системы (например, кластер 8×8 [17] или 12×12 [20] в модели Хаббарда) и получать дисперсионные зависимости [20, 21].

Однако нам не известны данные по восстановлению плотности состояний из Монте-Карло в больших кластерах в рамках реалистичной модели Эмери. Как нам кажется, это связано как со сложностью расчета функции Грина в многозонной модели, так и со спецификой восстановления существенно несимметричной (относительно электрон-дырочной инверсии) спектральной функции.

В данной работе мы представляем, по-видимому, первые результаты расчета плотности состояний и дисперсии квазичастиц в большом двумерном кластере $\text{Cu}_{36}\text{O}_{72}$ в рамках трехзонной модели Эмери. Спектральная плотность состояний $A_\sigma(k, \omega)$ восстанавливалась из известного интегрального соотношения [17–21]

$$G_\sigma(k, \tau) = - \int \frac{A_\sigma(k, \omega) \exp(-\omega\tau)}{1 + \exp(-\omega\beta)} d\omega, \quad (1)$$

где мацубаровская функция Грина $G_\sigma(k, \tau)$ – фурье-компонента узельного не-локального коррелятора,

$$G_\sigma(i, j, \tau) = \langle C_{i,\sigma}(\tau) C_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle, \quad (2)$$

рассчитывалась нелокальным траекторным алгоритмом Монте-Карло (МК) [22] с двумя дополнительными временными срезами, разнесенными на интервал τ по оси мнимого времени:

$$\langle G \rangle = \langle G1 \rangle / \langle W \rangle, \quad (3)$$

$$\langle G1 \rangle = \text{tr} [(i_1 | C | i'_1) U_{1,2} U_{2,3} \dots (i_\tau | C^+ | i'_\tau) \dots U_{2L,1}], \quad (4)$$

$$\langle W \rangle = \text{tr} [(i_1 | i'_1) U_{1,2} U_{2,3} \dots (i_\tau | i'_\tau) \dots U_{2L,1}]. \quad (5)$$

Здесь U_{nn+1} – оператор эволюции:

$$U_{nn+1} = \langle i_n | \exp(-\Delta\tau H) | i_{n+1} \rangle. \quad (6)$$

Все особенности разбиения плоскости CuO_2 на CuO_4 -ячейки и расчет оператора U_{nn+1} для реализации траекторного алгоритма подробно изложены в [22].

При заполнении N мы вносили между срезами $N+1$ дырочных носителей, а вне – N дырок. Кроме того, параллельно мы считали статистический вес W таким образом, что временные срезы вне промежутка $(0-\tau)$ были общими для обоих МК-расчетов (4) и (5). В результате МК-расчет проводился на усложненной пространственно-временной сетке (рис.1). Вся информация снималась с этих дополнительных срезов, так что сходимость ухудшалась в L раз (L – полное число временных срезов), однако из-за особенностей траекторного алгоритма скорость сходимости была пропорциональна числу узлов N_a [22]. Для улучшения сходимости мы исключали из возможных монте-карловских конфигураций те, для которых произведение матричных элементов $\langle i_\tau | C | i'_\tau \rangle \langle i_1 | C^+ | i'_1 \rangle$ по области $1+2$ (см. рис.1) или $\langle i_\tau | i'_\tau \rangle \langle i_1 | i'_1 \rangle$ по области $1+3$ было равно нулю. Кроме того, через определенное число МК-шагов расчет проводился заново для новой исходной конфигурации. Затем результаты, полученные при различных начальных конфигурациях, усреднялись.

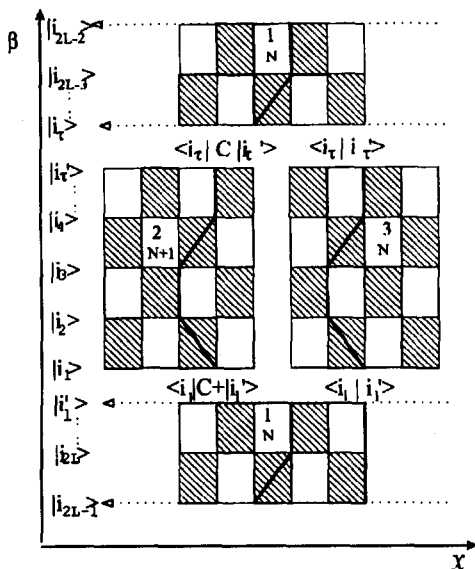


Рис.1. Проекция трехмерной пространственно-временной сетки траекторного МК-алгоритма на вертикальную плоскость, параллельную оси x (45° по отношению к оси α от плоскости CuO_2 [22]). Показаны дополнительные временные срезы для расчета нелокальных функций Грина. Мировые линии испытывают разрыв между состояниями $|i\rangle$ и $|i'\rangle$. Область 1+2 – для расчета коррелятора $\langle G1 \rangle$, область 1+3 – для расчета статвеса $\langle W \rangle$. В областях 1 и 3 – на каждом временном срезе N фермионов, в области 2 – $N+1$

Мы исследовали двумерный кластер с 6×6 ячейками CuO_2 и периодическими граничными условиями в рамках модели Эмери, гамильтониан которой в дырочном представлении имеет вид

$$H = -t \sum_{(ik)\cdot\sigma} (d_{i\sigma}^\dagger p_{k\sigma} + \text{h.c.}) + \epsilon \sum_{k\sigma} n_{k\sigma} + U_d \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + U_p \sum_k n_{k\uparrow} n_{k\downarrow} \quad (7)$$

и описывает гибридизацию $d_{x^2-y^2}$ - и p_x , p_y -орбиталей в CuO_2 плоскости с интегралом перекрытия t ; различие энергий на медном и кислородном узлах ϵ , кулоновское отталкивание на меди U_d и кислороде U_p .

Расчет функции Грина проводился для температуры $T = 0.25t_{pd}$ ($\beta = 1/T = 4$) и дискретность разложения Троттера по временной оси выбиралась $\Delta\tau = 0.2$. Это диктовало в условиях траекторного алгоритма [22] 20 независимых расчетов Монте-Карло (!) для получения полной зависимости функции Грина от мнимого времени для каждой проекции спина и концентрации дырок. Мы выбрали достаточно реальные параметры Эмери $U_p = 0$, $U_d = 6$, $\epsilon = 3$ [10, 11, 13, 22] (в единицах t_{pd}). Основные расчеты проводились для концентраций $N = 36$ (недопированное состояние).

Отметим особенности некорректной по Адамару задачи (1) в условиях канонического ансамбля по сравнению с аналогичной задачей с нефиксированным числом частиц (см., например, методы [17–19]). В этом случае, строго говоря, необходимо проводить расчет функции Грина при заполнении N и $N-1$ и по всем проекциям спина. Это связано с тем, что в соответствии со спектральным разложением $G_\sigma(k, \tau)$ при N дает в плотности состояний основной вклад в переходы между состояниями N и $N+1$, а $G_\sigma(k, \tau)$ при $N-1$ – в переходы между N и $N-1$. При низких температурах основной вклад в спектральную плотность также дают состояния с минимальной проекцией спина, которые мы только и учитывали.

После расчета функции Грина решалась задача (1) методом, близким описанному в [18], а именно: для спектральной плотности $A_\sigma(k, \omega)$, представленной в виде дискретного набора дельта-функций (дискретность по энергии $\Delta\omega = 0.2$), строился функционал, вариационными параметрами которого являлись искомые амплитуды дельта-функций. Минимизируя его с несколько отличной от используемой в [18] сглаживающей функцией, мы получали с хорошей достоверностью ядро интегрального уравнения (1) $A_\sigma(k, \omega)$.

Метод тестировался на модельных функциях Грина с известными спектрами, причем относительная погрешность не превышала долей процента. Кроме того, был проведен следующий важный тест: для плотности состояний, полученной методом точной диагонализации для кластера Cu_4O_8 (см., например, [16]), по формуле (1) рассчитали функцию Грина, а затем использовали ее как входные данные для инициализации процедуры восстановления спектра. Различие между исходной плотностью состояний и "восстановленной" составляло доли процента при малом сглаживающем параметре. Подчеркнем, что вид плотности состояний существенно несимметричен (рис.2), и имеет довольно сложную структуру.

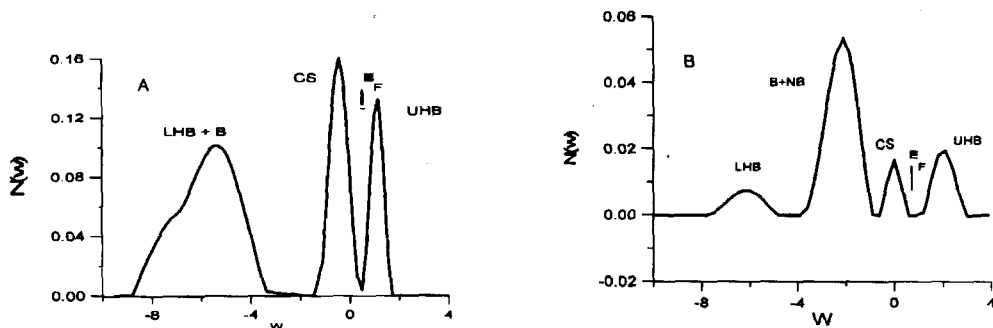


Рис.2. а) Плотность состояний в кластере $\text{Cu}_{36}\text{O}_{72}$ в недопированном состоянии $N = 36$, $\epsilon = 3$, $U_d = 6$, $U_p = 0$, $\beta = 4$. б) Результаты "восстановления" плотности состояний в кластере Cu_4O_8 при том же сглаживающем параметре и тех же параметрах Эмери и числе дырок $N = 4$ (концентрация также соответствует недопированному случаю). Аббревиатура зон расшифрована в тексте

Перейдем к полученным на большом кластере результатам.

Расчитанная для 108-узельного CuO кластера плотность состояний (в электронном представлении) показана на рис.2а. Четко различимы верхняя хаббардовская зона (UHB), зона коррелированных состояний (CS) и слившиеся нижняя хаббардовская зона (LHB) и связывающая зона (B). Расстояние между зонами UHB и CS порядка ϵ , а между CS и $LHB + B$ - порядка U_d . Для сравнения на рис.2б мы приводим плотность состояний малого кластера Cu_4O_8 , "восстановленную" нашим методом из данных точной диагонализации для тех же параметров с той же степенью сглаживания. Корреляция этих данных с результатами Монте-Карло очевидна. Существенное отличие данных по большой системе - сдвиг связывающей зоны (B) к нижней хаббардовской зоне, резкое увеличение веса зоны коррелированных состояний за счет несвязывающей зоны (NB).

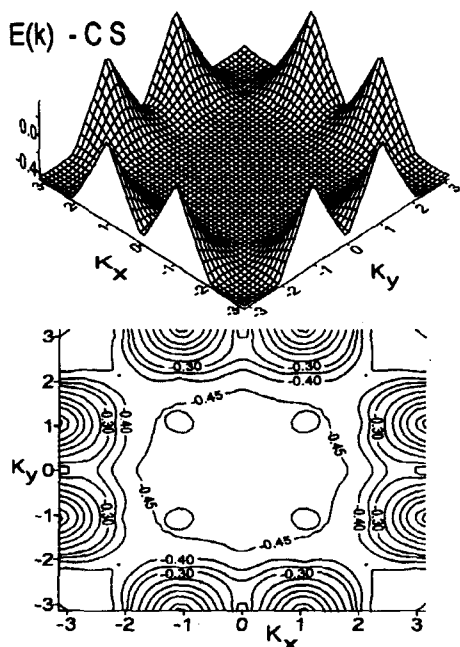


Рис.3. Дисперсия квазичастиц и изоэнергетические поверхности для зоны коррелированных состояний (*CS*) при дырочном допировании плоскости CuO_2

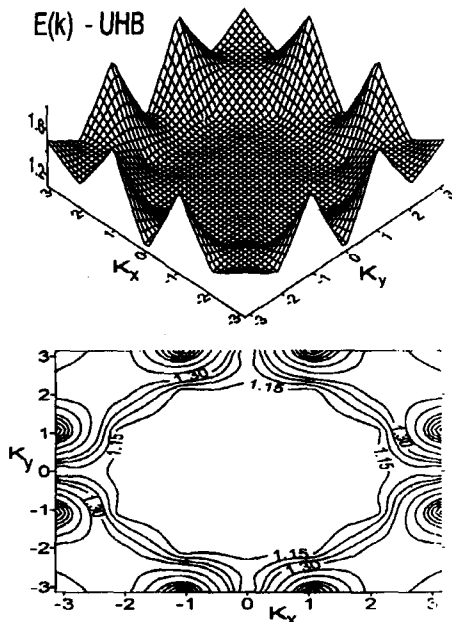


Рис.4. Дисперсия квазичастиц и изоэнергетические поверхности для верхней хаббардовской зоны (*UHB*) при электронном допировании

Мы восстановили спектральную плотность для всех разрешенных импульсов первой зоны Бриллюэна. Заметим, что уровень Ферми для нашего недопированного случая расположен в оптической щели между зонами *CS* и *UHB* (рис.2а). Наши данные свидетельствуют о том, что для конкретного импульса эти зоны имеют вид резко очерченных квазичастичных пиков в спектре. Таким образом, аналогично [8, 9, 20], мы можем рассчитать дисперсию квазичастичных возбуждений в этих зонах. Конечно, следует подчеркнуть, что допированную ситуацию (то есть когда заполнение отлично от половинного) в условиях канонического ансамбля следовало бы рассчитывать заново для соответствующей дырочной концентрации. Однако и в нашей ситуации в приближении жестких зон (то есть при простом заполнении зон без их искажения при допировании) можно получить предварительные результаты для дырочного (зона *CS*) и для электронного (*UHB*) заполнения. На рис.3,4 мы представляем дисперсию $\epsilon(k)$ для этих двух зон и соответствующие изоэнергетические поверхности. Полученные дисперсионные зависимости удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [1, 2] и приближенными аналитическими результатами [14–17]. Конечно, при включении допирования следует ожидать некоторых искажений зон [20], но и на представленных зависимостях прослеживаются бездисперсионные участки у границ зоны Бриллюэна. Мы не получили, в отличие от результатов работы [17], максимума в центре *CS*-зоны. Возможно, он появится при расчете в допированном случае. Близкие к показанным на рис.3,4 особенности плотности состояний вблизи границ зо-

ны Бриллюэна также получались в [12,13] для электронного, и в [14] для дырочного допирований.

Таким образом, мы представили, по-видимому, первые данные по восстановлению плотности состояний и дисперсии квазичастиц в большом двумерном кластере CuO в рамках трехзонной модели Эмери с помощью траекторного нелокального алгоритма Монте-Карло. Дисперсионные зависимости квазичастиц в верхней хаббардовской зоне и в зоне коррелированных состояний, что соответствует электронному и дырочному допированиям высокотемпературных сверхпроводников, близки к экспериментально наблюдаемым и подтверждают наличие особенностей в плотности состояний вблизи уровня Ферми.

Авторы благодарны С.Н.Молоткову, В.Ф.Елесину, Л.А.Опену и А.В.Крашенинникову за обсуждение результатов и полезные замечания. Работа выполнена частично благодаря Международному научному фонду и Российскому правительству (проект М67300), а также поддержана Российской государственной программой "Высокотемпературная сверхпроводимость" (проект 90431).

-
1. L.P.Chan, D.R.Harshman, K.G.Lynn et al., *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1350 (1991).
 2. K.Gofron, J.C.Campuzano, A.A.Abrikosov et al., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3302 (1994); T.Yokoya, A.Fhainani, T.Takahashi et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3009 (1996).
 3. D.M.King, Z.-X.Shen, D.S.Dessau et al., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3298 (1994).
 4. R.Pnkaluoto and K.Kaski, *Physica Scripta* **T33**, 227 (1990).
 5. L.F.Mattheiss and D.R.Hamann, *Solid State Comm.* **63**, 395 (1987).
 6. E.Dagotto, A.Nazarenko, and A.Moreo, *J.of Low Temp.* **99**, 409 (1995).
 7. L.Chen and P.Benard, *Phys. Rev. B* **52**, 1152 (1995).
 8. A.Nazarenko, K.J.E.Vos, S.Haas et al., *Phys. Rev. B* **51**, 8676 (1995).
 9. V.Zlatic, K.D.Schotte and G.Schliecker, *Phys. Rev. B* **52**, 3639 (1995).
 10. T.Hotta, *J. Phys. Soc. Jap.* **62**, 4414 (1993); **63**, 4126 (1994).
 11. М.В.Еремин, С.Г.Соловьянов, С.В.Варламов и др., *Письма в ЖЭТФ* **60**, 118 (1994).
 12. P.Unger and P.Fulde, *Phys. Rev. B* **51**, 9245 (1995).
 13. G.Baumgärtel, J.Schmalian, and K.-H.Bennemann, *Phys. Rev. B* **48**, 3983 (1993).
 14. M.P.Lopez Sancho, J.Rubio, M.C.Refolio, and J.M.Lopez Sancho, *Phys. Rev. B* **52**, 6920 (1995).
 15. E.Dagotto, F.Ortolani, and D.Scalapino, *Phys. Rev. B* **46**, 3183 (1992).
 16. V.F.Elesin, V.A.Kashurnikov, A.V.Krashennnikov, and A.I.Podlivaev, *Physica C* **222**, 127 (1994).
 17. O.Biham, M.Jarell, and C.Jayaprakash, *Phys. Rev B* **41**, 2639 (1990).
 18. S.R.White, D.J.Scalapino, and R.L.Sugar, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1523 (1989).
 19. Д.В.Берков, С.В.Мешков, *Письма в ЖЭТФ* **52**, 1021 (1990).
 20. N.Bulut, D.J.Scalapino, and S.R.White, *Phys. Rev. B* **50**, 7215 (1994).
 21. R.Preuss, W.Hanke, and W. von der Linden, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1344 (1995).
 22. В.А.Кашурников, *ЖЭТФ* **108**, 1796 (1995); V.A.Kashurnikov, *Phys. Rev. B* **53**(9), 5932 (1996).