

УДК 548:537.1

Ренорм-групповой анализ одномерной модели Хаббарда**Ксения А. Лобач*****Сергей Г. Овчинников†**Институт инженерной физики и радиоэлектроники,
Сибирский федеральный университет,
Свободный 79, Красноярск, 660041,
Россия

Получена 01.11.2011, окончательный вариант 09.12.2011, принята к печати 20.01.2012

*Получена энергия основного состояния одномерной модели Хаббарда с помощью техники ренорм-группы в реальном пространстве. Рассмотрен случай половинного заполнения с учетом перескоков между ближайшими соседями.**Ключевые слова: модель Хаббарда, энергия основного состояния, ренорм-группа.***Введение**

Модель Хаббарда [1] — это простейшая модель, позволяющая проверить эффекты корреляций между электронами в узких энергетических зонах. Гамильтониан включает перескоки между ближайшими соседями t и кулоновское отталкивание U , которое действует, когда два электрона находятся на одном узле. Наибольший интерес представляет случай сильного взаимодействия $U \gg t$, когда теория возмущений по параметру $\frac{U}{t}$ не работает. Поэтому желательно развитие методов, не использующих теорию возмущений. В этой работе изучается одномерная модель Хаббарда с наполовину заполненной зоной, используя технику ренорм-группы при нулевой температуре. Метод состоит в построении основного состояния путем многократно повторяющегося разбиения решетки на кластеры, состоящие из четного числа узлов, а точнее двух, и рассмотрении на каждом шаге только нижележащих энергетических состояний в каждом кластере. Данным методом была вычислена энергия основного состояния, которая находится в хорошем согласии с точным результатом [2].

Нужно упомянуть, что существуют родственные вычисления для одномерной модели Хаббарда, в которых авторы разбивают цепочку по три узла [3], а также работы, в которых авторы учитывают не только низкоэнергетические состояния на каждом шаге итераций и таким образом могут приближенно изучить температурно-зависимые свойства [4]. Удобство нашего подхода состоит в возможности аналитически находить собственные состояния и параметры ренормированного гамильтониана на каждом шаге итераций.

Путем расширения наших одномерных вычислений мы сможем в будущем рассматривать дву- и трехмерные решетки.

1. Точная диагонализация

Гамильтониан модели Хаббарда имеет вид

$$H = \sum_{k,\sigma} ((-\mu)n_{k,\sigma} + \frac{1}{2}Un_{k,\sigma}n_{k,\bar{\sigma}}) - \sum_{k,\sigma} t(a_{k,\sigma}^+ a_{k+1,\sigma} + h.c.) + \frac{1}{2}UN, \quad (1)$$

*ks-ad@yandex.ru

†sgo@iph.krasn.ru

© Siberian Federal University. All rights reserved

где $n_{k,\sigma} = a_{k,\sigma}^+ a_{k,\sigma}$, $a_{k,\sigma}^+$ и $a_{k,\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона на узле k с проекцией спина $\sigma = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$, μ — химпотенциал, U — параметр кулоновского отталкивания, t — интеграл перескока между соседними узлами, $t > 0$. При вычислении энергии основного состояния E_g в пределе сильных корреляций ($U \rightarrow \infty$) $E_g \rightarrow -\infty$. Если же в гамильтониан добавить постоянный член $\frac{1}{2}UN$, как и было сделано, то при $U \rightarrow \infty$ $E_g \rightarrow 0$.

Перейдем от одноузельного описания к кластерному. Разобьем цепочку на кластеры по два узла (рис. 1). Перегруппируем слагаемые в гамильтониане так, чтобы отделить внутрикластерные взаимодействия от межкластерных:

$$H = \sum_f H_0^c(f) + \sum_f H_t^{cc}(f), \quad (2)$$

где

$$H_0^c(f) = -\mu \sum_{\sigma} (n_{f,1,\sigma} + n_{f,2,\sigma}) + U(n_{f,1,\uparrow}n_{f,1,\downarrow} + n_{f,2,\uparrow}n_{f,2,\downarrow}) - t \sum_{\sigma} (a_{f,1,\sigma}^+ a_{f,2,\sigma} + h.c.), \quad (3)$$

$$H_t^{cc}(f) = -t \sum_{f,\sigma} (a_{f+1,1,\sigma}^+ a_{f,2,\sigma} + h.c.), \quad (4)$$

где f — кластерные индексы, индексы 1 и 2 показывают номер атома внутри кластера.

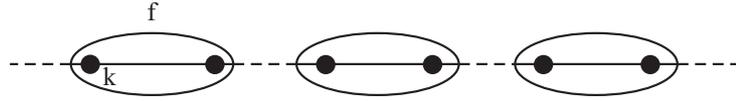


Рис. 1. Разбиение цепочки на кластеры. Здесь показано взаимодействие между атомами внутри кластера (сплошные линии) и между кластерами (пунктирные линии)

Следующим шагом после разбиения решетки на кластеры является точное решение стационарного уравнения Шредингера с внутрикластерной частью гамильтониана. В качестве волновых функций удобно взять функции вида

$$\psi_{n,s,l} = \sum_{n,s,l} C_{n,s,l}^{i_1 i_2} |i_1, i_2 \rangle, \quad (5)$$

где индекс n означает количество электронов в кластере, индекс s — полный спин, l — номер состояния с данными n и s , i_k — индекс, принимающий значения 0 (пусто), спин вверх (\uparrow), спин вниз (\downarrow) и двойка ($\uparrow\downarrow$) на узле $k = 1, 2$ (см. рис. 1). Аналог наполовину заполненной зоны в обычном подходе в нашем случае дается состояниями с числом электронов $n = 2$.

Точно диагонализировав внутрикластерную часть гамильтониана в выбранном базисе, мы получили точные кластерные собственные волновые функции и соответствующие им собственные значения энергии. Полное гильбертово пространство кластера показано на рис. 2.

Так как мы рассматриваем случай без допирования, будем учитывать только уровни энергии с $n = 1, 2, 3$. Также не будем рассматривать возбужденные уровни, так как мы интересуемся низкоэнергетической физикой при $T = 0$. Заранее не очевидно, что отображение возбужденных уровней в части гильбертова пространства с двумя электронами является корректным. Энергия триплета T_1 равна -2μ , а выражение для энергии синглета S_1 дается формулой (7). Видно, что выигрыш в энергии составляет $\frac{1}{2}(\sqrt{U^2 + 16t^2} - U)$, и даже в пределе $U \rightarrow 0$ он равен $2t$, а значит, расщепление между S_1 и T_1 остается при любых U . Тогда нас будет интересовать только следующая часть всего гильбертова пространства (рис. 3).

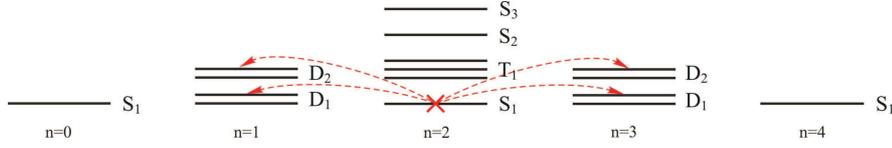


Рис. 2. Полное гильбертово пространство состояний кластера. Здесь для каждого возможного числа электронов показаны синглетные (S), дублетные (D) и триплетные (T) состояния. Для наполовину заполненной зоны при $T = 0$ занято состояние S_1 с $n = 2$, что обозначено крестом. Пунктирные линии показывают все возможные процессы рождения ($n = 2 \rightarrow n = 3$) и уничтожения ($n = 2 \rightarrow n = 1$) электрона

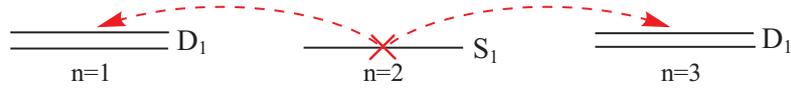


Рис. 3. Часть гильбертова пространства, важная для низкоэнергетической физики в случае наполовину заполненной зоны

Показанные на рис. 3 уровни описываются следующими значениями энергий и волновыми функциями (здесь верхний индекс в скобках показывает шаг итераций):

$$E_1^{(1)} = -\mu - t; \quad (6)$$

$$E_2^{(1)} = -2\mu + \frac{U}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{U^2 + 16t^2}; \quad (7)$$

$$E_3^{(1)} = -3\mu + U - t; \quad (8)$$

$$\psi_1^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \sigma \rangle + |\sigma, 0 \rangle); \quad (9)$$

$$\psi_2^{(1)} = \frac{A^{(1)}}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow \rangle - |\downarrow, \uparrow \rangle) + \frac{B^{(1)}}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow, 0 \rangle + |0, \uparrow\downarrow \rangle); \quad (10)$$

$$\psi_3^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\sigma, \uparrow\downarrow \rangle - |\uparrow\downarrow, \sigma \rangle); \quad (11)$$

где

$$A^{(1)} = \frac{-4t}{\sqrt{16t^2 + (U - \sqrt{U^2 + 16t^2})^2}}; \quad (12)$$

$$B^{(1)} = \frac{U - \sqrt{U^2 + 16t^2}}{\sqrt{16t^2 + (U - \sqrt{U^2 + 16t^2})^2}}. \quad (13)$$

На рис. 4 представим зависимость коэффициентов разложения по базисным волновым функциям от параметра $\frac{t}{U}$. Можно увидеть, что при $U \rightarrow 0$ вклады гомеоплярных $|\sigma, \bar{\sigma} \rangle$ и гетероплярных $|\uparrow\downarrow, 0 \rangle$ состояний одинаковы, а при $U \rightarrow \infty$, т. е. в режиме сильных корреляций, остаются только гомеоплярные состояния.

Введем эффективное взаимодействие $U^{(1)}$:

$$U^{(1)} = E_1^{(1)} + E_3^{(1)} - 2E_2^{(1)} = \sqrt{U^2 + 16t^2} - 2t. \quad (14)$$

Сравним его с параметром $U^{(0)}$ в обычном представлении модели Хаббарда $U^{(0)} = \epsilon_0 + \epsilon_2 - 2\epsilon_1 = U$. Интересно, что при $U = 0$ эффективное взаимодействие $U^{(1)}$ не обращается

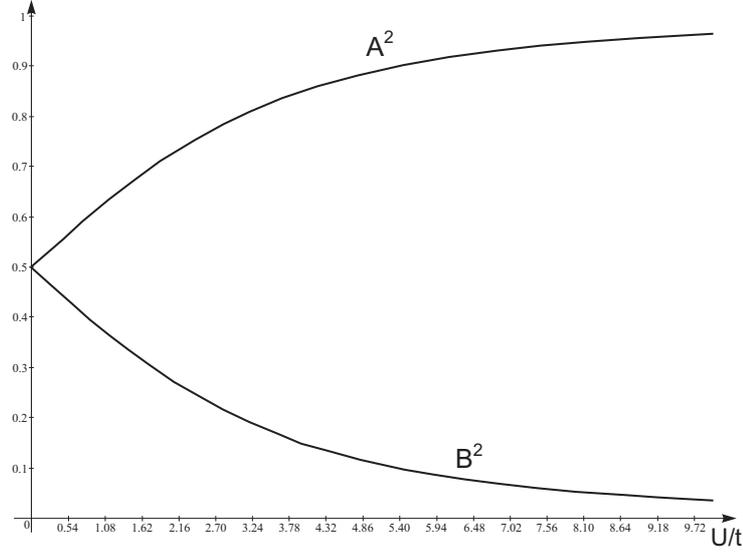


Рис. 4. Зависимость квадратов коэффициентов разложения по базисным волновым функциям от параметра $\frac{t}{U}$

в нуль в отличие от $U^{(0)}$, а является конечной величиной, равной $2t$. Это показывает, что электронные корреляции сохраняются даже в пределе $U \rightarrow 0$, что будет важно ниже для вычисления энергии основного состояния.

2. Построение X-операторов

Будем считать, что кластерные волновые функции нашего "обрезанного" гильбертова пространства образуют полный ортонормированный базис, тогда можно по определению построить X-операторы Хаббарда для кластера в следующем виде:

$$X_f^\alpha \equiv X_f^{pq} = |f : p \rangle \langle f : q|, \quad (15)$$

где f — кластерный индекс, α — корневой вектор, p и q — конечное и начальное состояние соответственно. Более подробно свойства X-операторов описаны в [1] и [5]. В нашем случае набор $\alpha(p, q)$ следующий: $\alpha = \alpha_1 = (1, -1, 0)$ при $p = \psi_1$ $q = \psi_2$ и $\alpha = \alpha_2 = (0, 1, -1)$ при $p = \psi_2$ $q = \psi_3$.

Представим фермиевский оператор уничтожения через X-операторы

$$a_{f,k,\sigma} = \sum_{\alpha} \gamma_{k,\sigma}(\alpha) X_f^\alpha, \quad (16)$$

$$\gamma_{k,\sigma}(\alpha) = \langle m', n-1 | a_{k,\sigma} | m, n \rangle, \quad (17)$$

где f — кластерный индекс, k — индекс атома внутри кластера пробегает значения 1, 2; σ — спиновый индекс. Здесь явно показано, что матричный элемент $\gamma_{k,\sigma}(\alpha)$ определяет переходы из части гильбертова пространства с n частицами из состояния m в часть гильбертова пространства с $n-1$ частицами в состояние m' . Аналогично можно записать и оператор рождения.

Определив X -операторы на кластере, мы теперь можем с их помощью учесть взаимодействие между кластерами и записать гамильтониан для кластерного представления

$$H^{(1)} = \sum_{f,p} E_p^{(1)} X_f^{pp} - \sum_{f \neq g} \sum_{\alpha, \beta} t_{fg}^{(1)\alpha\beta} X_f^{-\alpha} X_g^{\beta}, \quad (18)$$

где f, g — кластерные индексы, α, β — корневые векторы, $E_p^{(1)}$ — энергия кластера в состоянии p , $t_{fg}^{(1)\alpha\beta}$ — межкластерные интегралы перескока. Этот гамильтониан имеет структуру, отличную от исходного.

Матричные элементы $\gamma_{k,\sigma}(\alpha)$ и $t_{fg}^{(1)\alpha\beta}$ рассчитаны и представлены в табл. 1 и 2 соответственно.

Таблица 1. Матричные элементы $\gamma_{k,\sigma}(\alpha)$

α	$k = 1$	$k = 2$
1	$\sigma(A^{(1)} + B^{(1)})$	$\sigma(A^{(1)} + B^{(1)})$
2	$\frac{1}{2}(A^{(1)} + B^{(1)})$	$-\frac{1}{2}(A^{(1)} + B^{(1)})$

Таблица 2. Межкластерные интегралы перескока, $t_{fg}^{(1)\alpha,\beta}$

	$X_f^{-\alpha_1}$	$X_f^{-\alpha_2}$
$X_{f+1}^{\alpha_1}$	$\frac{t^{(1)}}{2}$	$-\sigma t^{(1)}$
$X_{f+1}^{\alpha_2}$	$\sigma t^{(1)}$	$-\frac{t^{(1)}}{2}$

В табл. 2 введено обозначение $t^{(1)} = \frac{t}{2} (A^{(1)} + B^{(1)})^2$.

3. Ренорм-группа и определение энергии основного состояния

Повторяя процедуру, описанную в пункте 1, используя уже в качестве базисных собственные состояния нового гамильтониана $H^{(1)}$, а также его собственные значения энергии, получим следующие рекуррентные соотношения:

$$H^{(n)} = \sum_{p,f} E_p^{(n)} X_f^{pp} - \sum_{\alpha,\beta,f \neq g} t_{\alpha,\beta}^{(n)} X_f^{+\alpha} X_g^{\beta}; \quad (19)$$

$$E_1^{(n+1)} = E_1^{(n)} + E_2^{(n)} - t^{(n)}; \quad (20)$$

$$E_2^{(n+1)} = E_2^{(n)} + \frac{1}{2}E_1^{(n)} + \frac{1}{2}E_3^{(n)} - \frac{1}{2}\sqrt{(U^{(n)})^2 + 16(t^{(n)})^2}; \quad (21)$$

$$E_3^{(n+1)} = E_3^{(n)} + E_2^{(n)} - t^{(n)}; \quad (22)$$

$$t^{(n+1)} = \frac{t^{(n)}}{2} (A^{(n)} + B^{(n)})^2; \quad (23)$$

$$A^{(n+1)} = \frac{-4t^{(n)}}{\sqrt{16(t^{(n)})^2 + (U^{(n)} - \sqrt{(U^{(n)})^2 + 16(t^{(n)})^2})^2}}; \quad (24)$$

$$B^{(n+1)} = \frac{U^{(n)} - \sqrt{(U^{(n)})^2 + 16(t^{(n)})^2}}{\sqrt{16(t^{(n)})^2 + (U^{(n)} - \sqrt{(U^{(n)})^2 + 16(t^{(n)})^2})^2}}; \quad (25)$$

$$U^{(n+1)} = \sqrt{(U^{(n)})^2 + 16(t^{(n)})^2} - 2t^{(n)}; \quad (26)$$

$$\mu^{(n+1)} = \frac{1}{2}U^{(n+1)}. \quad (27)$$

В пределе $n \rightarrow \infty$ можно найти фиксированные точки уравнений ренорм-группы. Введем параметр $y^{(n)} = \frac{U^{(n)}}{t^{(n)}}$.

$$t^* = 0; \quad (28)$$

$$y^* = \infty; \quad (29)$$

$$A^* = -1; \quad (30)$$

$$B^* = 0. \quad (31)$$

Эти результаты не зависят от первоначального параметра $y^{(0)}$. А результат для эффективного взаимодействия U^* зависит от $y^{(0)}$, но для любых начальных параметров будет стремиться к конечному числу, также зависящему от $y^{(0)}$, т.е. для эффективного взаимодействия нет фиксированных точек. Мы не получили нестабильную фиксированную точку $y^* = 0$, в отличие от работы [3], так как согласно (14) даже при $U = 0$ мы получаем $U^{(1)} = 2t$. Однако в согласии с [3], начиная с любого сколь угодно малого U (а в нашем случае и $U = 0$), мы приходим к фиксированной точке $y^* = \infty$, т.е. на каждом шаге итерации элемент межкластерного перескока становится все слабее по отношению к эффективному взаимодействию. Основное состояние изолировано для любых U .

Энергию основного состояния всей цепочки можно рассчитать по формуле

$$E_g = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E_2^{(n)}}{2^n}; \quad (32)$$

эта формула справедлива, так как при $n \rightarrow \infty$ элемент перескока $t^{(n)} \rightarrow 0$, что в свою очередь означает, что энергии $E_1^{(n)}$ и $E_3^{(n)}$ не влияют на энергию основного состояния. На рис. 5 мы сравнили свой результат с точным решением [2] и родственной задачей [3].

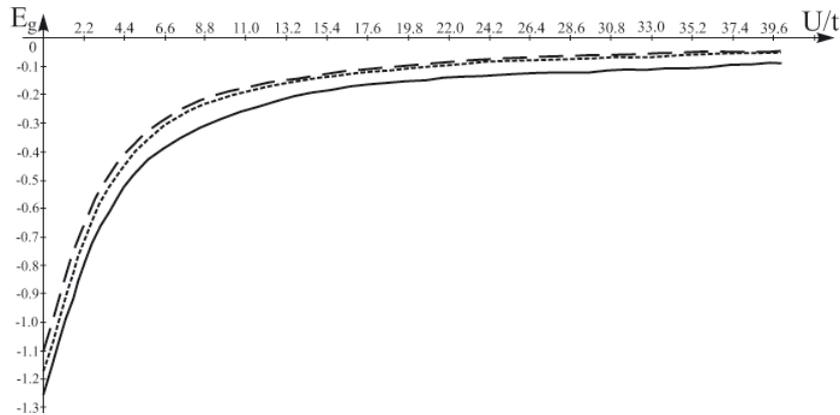


Рис. 5. Зависимость энергии основного состояния от параметра y . Сплошная линия — точное решение [2], пунктирная — работа [3], мелкий пунктир — наше решение

Видно, что энергия, полученная приближенными методами, лежит выше точно вычисленной. Это объясняется тем, что мы всегда ограничивали наше гильбертово пространство на каждом шаге итераций и получили усеченный гамильтониан. Тем не менее, наше решение в области небольших U лежит ближе к точному решению, чем вычисленная в работе [3]. Это видно из табл. 3, в которой указано расхождение с точным решением нашего решения и решения [3] в зависимости от $y^{(0)}$.

Таблица 3. Сравнительная таблица приближенных решений.

$y^{(0)}$	$\frac{\Delta E}{E}$, работа [3]	$\frac{\Delta E}{E}$, наша работа
0	10.9%	5.8%
1	13.5%	7.5%
2	15.9%	9.1%
3	17.9%	10.9%
4	20.6%	14.1%
5	24.7%	18.9%
10	28.3%	26.2%
20	32.2%	30.1%
30	38.6%	36.6%
40	43.8%	42%

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда "Династия" и гранта РФФИ № 10-02-00251.

Список литературы

- [1] J.Hubbard, *J. Proc. Roy. Soc. A*, **276**(1963), 238.
- [2] E.Lieb, F.Wu, *Phys. Rev. Lett.*, **20**(1968), 1445.
- [3] J.E.Hirsh, *Phys. Rev. B*, **22**(1980), 5259.
- [4] S.T.Chui, J.W.Bray, *Phys. Rev. B*, **18**(1978), 2426.
- [5] В.В.Вальков, С.Г.Овчинников, Квазичастицы в сильно коррелированных системах, Изд-во СО РАН, Новосибирск, 2001.

Renormalization-group Analysis of 1D Hubbard Model

Kseniya A. Lobach
Sergey G. Ovchinnikov

Ground state energy of 1D Hubbard model is obtained using a real-space renormalization-group technique. We study half-field Hubbard model with nearest-neighbor hopping.

Keywords: 1D Hubbard model, renormalization-group, ground state energy.