

# 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  $\Delta$  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 гамильтонической 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  $\rho_s$  сверхтекучей компоненты равна нулю, и в спектре возбуждений имеется диэлектрическая щель  $\Delta = \mu_+ - \mu_-$ , где значения  $\mu_+$  и  $\mu_-$  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,  $\Delta$  вводится и в фермионной модели Хаббарда [7]). На фазовой диаграмме  $\mu - t$  ( $\mu$  — 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  $\mu_+$ ,  $\mu_-$  и  $\Delta$  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  $\Delta$  почти не зависит от размеров системы. При  $t > 0,15$  зависимость  $\Delta$  от  $N_a$  очень сильная. Для определения  $\Delta_0 \equiv \Delta(N_a = \infty)$  мы аппроксимировали  $\Delta$  как функцию  $1/N_a$  полиномом пятой степени (по шести точным значениям  $\Delta$  при различных  $N_a$ ) и нашли зависимость  $\Delta_0$  от  $t$ . Пример такой аппроксимации приведен на рис.2, а на рис.3 изображена кривая  $\Delta_0(t)$ . Критическая величина  $t_c$ , при которой  $\Delta_0$  обращается в нуль, равна  $0,275 \pm 0,005$ . Отметим, что для корректного определения  $\Delta_0$  при  $\Delta_0 < 10^{-3}$  (вблизи  $t_c$ ) проводилась более тщательная аппроксимация  $\Delta(N_a)$  по степеням  $1/N_a^\alpha$ , где величина  $\alpha$  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  $\Delta_0$  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,

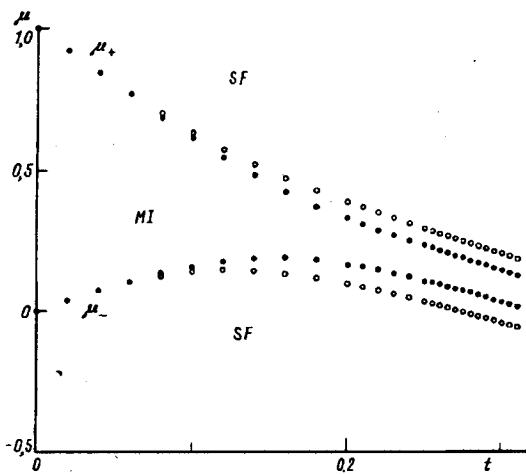


Рис.1. Зависимости  $\mu_+$  и  $\mu_-$  (см. определения в тексте) от  $t$  для цепочек из  $N_a = 4$  (○) и  $N_a = 9$  (●) узлов ( $U = 1$ ). MI – фаза моттовского диэлектрика; SF – фаза сверхтекучей жидкости

такая зависимость  $\Delta_0$  от  $t$  в критической области действительно имеет место: логарифм  $\Delta_0$  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

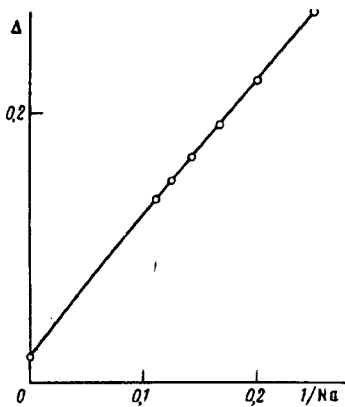


Рис.2

Рис.2. Зависимость диэлектрической щели  $\Delta$  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.  $\Delta_0 = \Delta(1/N_a=0) = 0,019$

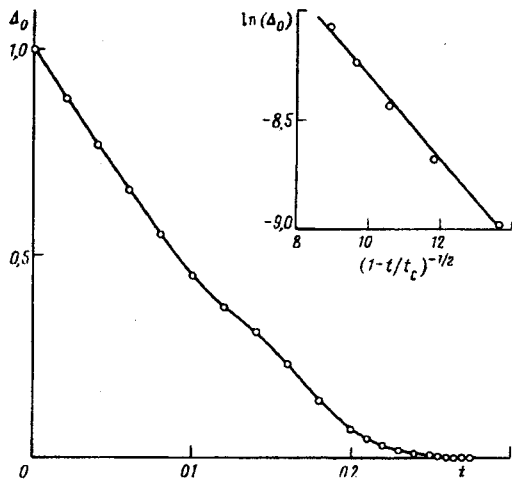


Рис.3

Рис.3. Зависимость  $\Delta_0$  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  $\xi$ . 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.