

УДК: 538.915

А.А. Кривчиков, В.В. Славин
ФТИНТ им. Б.И. Веркина НАН Украины
Проспект Ленина, 47, 61103, г. Харьков
e-mail: Kryvchikov@ilt.kharkov.ua

НАРУШЕНИЕ ТРАНСЛЯЦИОННОЙ СИММЕТРИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА НА НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ РЕШЕТКЕ-МАТРИЦЕ

Изучено влияние неупорядоченности узлов решетки-матрицы на основное состояние одномерного электронного газа. Проведен численный расчет статистической суммы системы $\sim 10^4$ частиц. Показано, что случайный малый беспорядок положений узлов решетки-матрицы приводит к образованию блоков из электронов, своеобразных "доменов", которые разрушают дальний порядок. Средняя длина доменов составляет $\sim 1/a^4$, где a - характерный беспорядок положений узлов решетки-матрицы. Предложен и применен эффективный метод нахождения основного состояния и термодинамических свойств системы. Метод основан на введении слабого неоднородного внешнего поля в гамильтониан системы.

Ключевые слова: электронный газ, неупорядоченные системы, низкоразмерные системы, обобщенный Вигнеровский кристалл, расширенная модель Хаббарда.

Введение

Спонтанное нарушение симметрии играет важную роль в физике твердого тела. Следствиями такого нарушения является изменение таких физических характеристик, как жесткость (например, ферромагнетизм в магнитных материалах), структура элементарных возбуждений и дефектов [1, 2]. Известно, что симметричные свойства тел меняются, например, при достижении температуры критической точки фазового перехода. В случае ферромагнетиков это означает отсутствие симметрии относительно поворотов по сравнению с парамагнетиком. Нарушения симметрии могут быть вызваны и внешними полями [3]. В таком случае даже малое поле может частично или полностью снять имеющееся в системе вырождение.

Интересным классом систем, в которых спонтанное нарушение симметрии играет крайне важную роль, являются слабо неупорядоченные твердые тела. В этих веществах узлы решетки имеют небольшой пространственный разброс относительно идеальной (строго периодической) структуры. В таких соединениях наблюдается целый ряд фазовых переходов, параметры которых зависят от размернос-

ти системы, характера разупорядочения и ряда других факторов. Особую роль в этом списке играют низкоразмерные проводящие системы, такие как, например, квазиодномерные органические молекулы [4] и искусственно созданные массивы квантовых точек, между которыми возможно туннелирование электронов. Данный класс соединений интенсивно изучается на протяжении последних десятилетий.

Такие системы хорошо описываются разнообразными решеточными моделями, наиболее общей среди которых является т.н. обобщенная модель Хаббарда:

$$H = -t \sum_n (\hat{C}_{n,\uparrow}^+ \hat{C}_{n+1,\uparrow} + \hat{C}_{n,\downarrow}^+ \hat{C}_{n+1,\downarrow}) + U \sum_n \hat{n}_{n,\uparrow} \hat{n}_{n,\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} V(n, m) (\hat{n}_{n,\uparrow} + \hat{n}_{n,\downarrow}) (\hat{n}_{m,\uparrow} + \hat{n}_{m,\downarrow}) \quad (1)$$

Здесь $\hat{C}_{n,j}^+$ и $\hat{C}_{n,j}$ - операторы рождения и уничтожения электронов со спином j ($j = \uparrow, \downarrow$) на узле n в представлении вторичного квантования. Если узлы расположены периодически, то рассматривается модель Хаббарда на упорядоченной решетке-матрице. В противном случае (если уз-

лы расположены случайным образом), речь идет о модели Хаббарда на неупорядоченной решетке-матрице.

Операторы удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$\begin{cases} [\widehat{C}_{n,j}^+, \widehat{C}_{n',j'}^+] = \delta_{n,n'} \delta_{j,j'} \\ [\widehat{C}_{n,j}^+, \widehat{C}_{n',j'}^+] = 0 \\ [\widehat{C}_{n,j}, \widehat{C}_{n',j'}] = 0 \end{cases} \quad (2)$$

Символом $\widehat{n}_{m,j}$ в (1) обозначается оператор числа электронов со спином j на узле m .

$$\widehat{n}_{m,j} = \widehat{C}_{m,j}^+ \widehat{C}_{m,j} \quad (3)$$

В силу (2)-(3) на каждом узле не может быть больше двух электронов, причем в случае двух частиц на узле их спины должны быть противоположного знака.

Первое слагаемое гамильтониана (1) описывает кинетическую энергию частиц. Второе - взаимодействие частиц на одном узле с противоположным направлением спина. Последнее слагаемое представляет собой потенциал межчастичного отталкивания (кулоновскую энергию взаимодействия).

Известно, что системы с гамильтонианом (1) могут обладать как металлическими, так и диэлектрическими свойствами в зависимости от соотношения параметров - так называемый переход Мотта-Хаббарда. В одномерном случае (а именно этот случай рассматривается нами в данной статье) такой переход имеет место при нуле температур. Это значит, что изменение симметрии основного состояния электронной системы играет ключевую роль при этом фазовом переходе.

Модель Хаббарда с отталкиванием на упорядоченной решетке-матрице хорошо исследована и найдены как структура основного состояния, так и ее термодинамические свойства [6, 7]. Однако, как указывалось выше, необходимо учесть, что большинство реальных систем являются разупорядоченными. По этой причине вопрос об влияния беспорядка в позициях узлов решетки-матрицы на структурные и термодинамические свойства представ-

ляется актуальным. В данной работе мы покажем, что даже малый беспорядок приводит к существенному изменению структуры основного состояния и термодинамики системы.

Модель

В данной работе мы будем рассматривать случай низкой плотности электронов, когда число частиц значительно меньше числа узлов. В этом случае среднее расстояние между узлами решетки-матрицы a_0 много меньше среднего расстояния между электронами $l_0 = a_0 L / N$ (L - длина системы, N - количество частиц) первыми двумя слагаемыми в (1) можно пренебречь. В результате гамильтониан приобретает вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} V(n, m) n_n n_m \quad (4)$$

Где n_n, n_m число электронов на узлах n и m соответственно ($n_n, n_m = 0, 1$). Это т.н. модель обобщенного Вигнеровского кристалла [5,8]. Потенциал взаимодействия V зависит только от расстояния между частицами. В случае упорядоченной решетки-матрицы было показано, что структура основного состояния качественно не зависит от свойств V . Требуется лишь монотонность убывания этого потенциала. Кроме того, для термодинамической стабильности системы необходимо степенное убывание потенциала на больших расстояниях:

$$V(n, m) = V(|x_n - x_m|) = V(|\mathbf{r}|) \sim |\mathbf{r}|^{-(1+\sigma)} \quad \sigma > 0$$

Здесь x_n, x_m - координаты частиц, занимающих узлы решетки-матрицы с номерами n и m . Поскольку мы рассматриваем неупорядоченный случай, то x_n ($n = 1, 2, \dots, L$) образуют множество случайных чисел так, что $\langle x_{n+1} - x_n \rangle = a_0$.

Символ $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по всем узлам решетки.

В низкотемпературном пределе основной вклад в термодинамику дают конфигурации, в которых электроны слабо отклоняются от своих положений равнове-

сия, задаваемых минимумом (4). Очевидно, этому минимуму соответствует вигнеровский кристалл с концентрацией $c_e = I/l_0$. В этом случае в статистической сумме можно ограничиться состояниями, в которых электроны занимают узлы решетки, прилегающие (слева и справа) к положениям минимума энергии (4).

Обозначим s_k^+ и s_k^- отклонения k -го электрона ($k = 1, 2, \dots, N$) от положения равновесия. Пусть s_k^+ соответствует смещению вдоль положительного направления цепочки (сдвиг вправо), а s_k^- - вдоль отрицательного направления (сдвиг влево). Естественно

$$s_k^+ + s_k^- = x_n - x_{n+1} \quad (5)$$

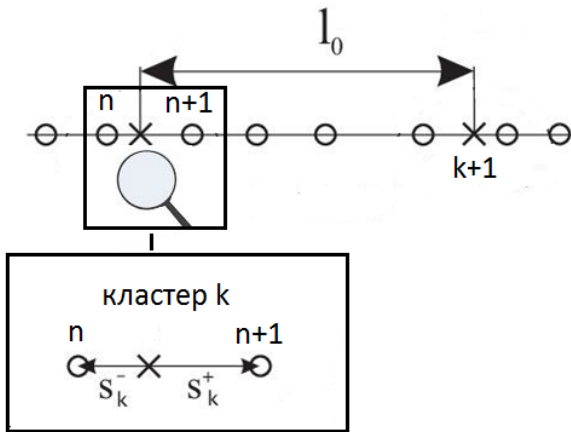


Рис. 1. Одномерная разупорядоченная решетка-матрица и электронные кластеры. Положение электронов в идеальном Вигнеровском кристалле обозначено крестиками. Внизу приведен кластер k в большем масштабе.

В этом случае можно разложить гамильтониан (4) по малому параметру $\frac{s}{l_0} \sim \frac{N_e}{L}$. Здесь $s = \langle |s_k^\pm| \rangle$. В результате получаем:

$$H = H_{WC} + \frac{I}{2} \sum_{k \neq m} \frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} \Big|_{x=|k-m|l_0} (s_k - s_m)^2 \quad (6)$$

Переменные s_k могут принимать два значения: s_k^+ и s_k^- . Константой H_{WC} можно

пренебречь. В приближении ближайших соседей, получаем:

$$H = b \sum_{k=1}^N (s_k - s_{k+1})^2 \quad (7)$$

Важно отметить, что в данном случае приближение ближайших соседей означает, что мы учитываем взаимодействия *ближайших частиц*, а не взаимодействия на соседних узлах решетки. Будем рассматривать периодические граничные условия:

$$s_{N+1} = s_1 \quad (8)$$

Кроме того, в гамильтониане (7) удобно выразить все переменные в единицах ba_0^2 . Тогда:

$$H = \sum_{k=1}^N (s_k - s_{k+1})^2, \quad (9)$$

а переменные s_k можно записать в виде:

$$s_k = \begin{cases} s_k^+ = I - \xi_k^+ \\ s_k^- = -(I - \xi_k^-) \end{cases} \quad (10)$$

Здесь ξ_k^\pm - случайные числа, характеризующие разброс узлов решетки- матрицы в окрестности k -го электрона. Заметим, что в пределе $\xi_k^\pm = 0$ данная модель переходит в модель Изинга.

Таким образом, мы перешли от модели, в которой все микроскопические переменные являются регулярными, а сама решетка – случайной, к модели, где решетка является регулярной (с единичным периодом), а микроскопические переменные – случайными. Ниже будет показано, что такой переход позволяет существенно упростить процедуру построения основного состояния и изучения низкотемпературных термодинамических свойств.

Метод

Предложен оригинальный метод исследования основного состояния системы, описываемой Гамильтонианом (9), основанный на введении малого локально-

го магнитного поля в систему. С учетом поля, действующего на узел k_0 , гамильтониан $H = \sum_{k=1}^N \tilde{H}(s_k, s_{k+1})$

приобретает вид

$$\tilde{H}(s_k, s_{k+1}) = (s_k^j - s_{k+1}^j)^2 + h\delta_{k,k_0}s_k \quad (11)$$

“Намагниченность” одного “спина” можно определить с помощью стандартного термодинамического выражения:

$$M_{k_0} = \frac{\partial F(H, T)}{\partial h} = -T \frac{\partial \ln Z(H, T)}{\partial h} \quad (12)$$

Таким образом, найдя статистическую сумму системы можно рассчитать “намагниченность” каждого “спина” системы и, стало быть, в пределе низких температур T и малых полей h определить структуру основного состояния.

Для расчета термодинамических функций системы использовался метод трансфер-матриц. Статистическая сумма системы записывается как:

$$Z = Tr \prod_{j=1}^N \hat{P}_j \quad (13)$$

$$\hat{P}_j = \begin{pmatrix} e^{\beta \tilde{H}(s_j^+, s_{j+1}^+)} & e^{\beta \tilde{H}(s_j^+, s_{j+1}^-)} \\ e^{\beta \tilde{H}(s_j^-, s_{j+1}^+)} & e^{\beta \tilde{H}(s_j^-, s_{j+1}^-)} \end{pmatrix} \quad (14)$$

В случае периодических граничных условий (8) $\hat{P}_{N+1} = \hat{P}_1$.

Прямое численное перемножение матриц (14) сопряжено с трудностями, т.к. в области низких температур матричные элементы становятся либо экспоненциально большими, либо экспоненциально малыми величинами. Для увеличения точности вычисления матрице \hat{P}_j в соответствие ставится матрица \hat{G}_j

$$\hat{G}_j = \begin{pmatrix} \beta \tilde{H}(s_j^+, s_{j+1}^+) & \beta \tilde{H}(s_j^+, s_{j+1}^-) \\ \beta \tilde{H}(s_j^-, s_{j+1}^+) & \beta \tilde{H}(s_j^-, s_{j+1}^-) \end{pmatrix} \quad (15)$$

При перемножении матриц $\hat{P}_i \hat{P}_j$ будут возникать выражения типа $\ln(e^a + e^b) = a + \ln(1 + e^{b-a})$. Определим функцию, которая была бы разложением логарифма в ряд Тейлора:

$$F(a, b) = \begin{cases} a + e^{b-a}; & a > b \\ b + e^{a-b}; & b > a \end{cases} \quad (16)$$

Введем операцию перемножения матриц \hat{G}_i :

$$\hat{G}_i \bullet \hat{G}_j = \begin{pmatrix} F(g_{11}^i + g_{11}^j, g_{12}^i + g_{12}^j) & F(g_{11}^i + g_{12}^j, g_{12}^i + g_{22}^j) \\ F(g_{21}^i + g_{11}^j, g_{22}^i + g_{21}^j) & F(g_{21}^i + g_{12}^j, g_{22}^i + g_{22}^j) \end{pmatrix} \quad (17)$$

символами $g_{11}^i, g_{12}^i, g_{21}^i, g_{22}^i$ обозначаются матричные элементы \hat{G}_i . Пусть

$$\tilde{G} = \hat{G}_1 \bullet \hat{G}_2 \bullet \dots \bullet G_N \quad (18)$$

Введем обратное преобразование

$$\tilde{P}(G) = \begin{pmatrix} e^{g_{11}} & e^{g_{12}} \\ e^{g_{21}} & e^{g_{22}} \end{pmatrix} \quad (19)$$

Тогда

$$\tilde{Z}_G = Tr \tilde{P}(\tilde{G}) \quad (20)$$

В пределе низких температур статистическая сумма, вычисленная при помощи (13) с экспоненциальной точностью совпадает с (20).

Таким образом, алгоритм вычисления следующий:

- Задается конфигурация ξ_k^\pm
- Строятся матрицы \hat{G}_j (15).
- Последовательно перемножаются матрицы $\hat{G}_1 \bullet \hat{G}_2 \bullet \dots \bullet G_N$ по формуле (17).

- Затем вычисляется статистическая сумма (20).
- Вводится небольшое поле h на первом узле и снова вычисляется статистическая сумма (20).
- В конце вычисляется локальная намагниченность по формуле (12).

Последовательно осуществляя эту процедуру по всем “спинам”, можно получить ориентацию “спинов” основного состояния системы. Следует отметить, что у данного метода имеется ряд недостатков. Тот факт, что локальное поле действует только на один спин, означает, что намагниченность системы будет стремиться к нулю при увеличении числа узлов как $1/N$. Следовательно, этот метод адекватен только для систем ограниченного размера.

Результаты

Исследовано основное состояние системы из $N \sim 10000$ частиц. Показано, что в случае беспорядка в позициях узлов решетки-матрицы оно имеет “блочную” (доменную) структуру [8]. Дальний порядок в системе при этом разрушается. Введем параметр A , характеризующий беспорядок системы. Тогда:

$$s_k = \begin{cases} s_k^+ = I - A\xi_k^+ \\ s_k^- = -(I - A\xi_k^-) \end{cases} \quad (21)$$

Здесь $\xi_k^\pm \in [0,1]$ - равномерно распределенные случайные числа. При $A = 0$ система становится полностью упорядоченной и переходит в модель Изинга. В пределе $A = 1$ наблюдается полное разупорядочение в позициях узлов решетки-матрицы и s_k^\pm становятся равномерно распределенными в интервалах $[0,1]$ и $[-1,0]$, соответственно. В случае $A \ll 1$ можно оценить средний размер домена. Как показано в [8], он будет

$$l_{dom} \sim 1/A^4. \quad (22)$$

Некоторые примеры структур основного состояния приведены на рис. 2.

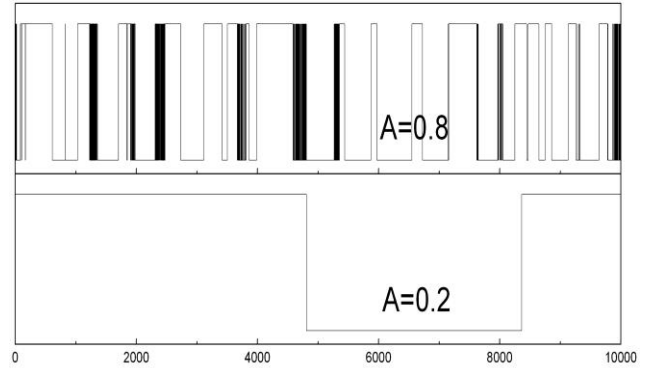


Рис. 2. Примеры структур основного состояния при различных величинах разупорядочения решетки-матрицы (A).

На основе полученных результатов было численно смоделировано внешнее поле h_k , структура которого повторяет структуру доменов основного состояния. Иными словами, если в основном состоянии k -й “спин” принимает значение s_k^+ , то поле на этом узле равно h_0 ($h_0 \ll 1$), в противоположном случае поле равно $-h_0$. В данное поле вводилась добавка, случайным образом смещающая положения доменных стенок – узлов на который поле h_k меняет знак (точнее узлов, на которых выполняется неравенство $h_k \neq h_{k+1}$). При помощи параметра B можно было варьировать среднюю амплитуду смещений доменных стенок. Построен график зависимости намагниченности от параметра B (рис. 3). В отсутствие флуктуаций ($B=0$, внешнее поле h_k повторяет структуру основного состояния) намагниченность системы максимальна. Затем наблюдается полочка, обусловленная тем, что амплитуда флуктуаций меньше периода решетки-матрицы (в безразмерных единицах этот период равен 1). Далее, с ростом B намагниченность падает линейно в достаточно широком диапазоне. Линейная зависимость является следствием как малости амплитуды поля h_0 , так и малости B (в сравнении со средней длиной домена l_{dom}). В этом случае “спины”, чья ориентация в основном состоянии противоположна направлению поля, дают отрицательный вклад в намагниченность. Количество же таких “спинов” пропорционально B .

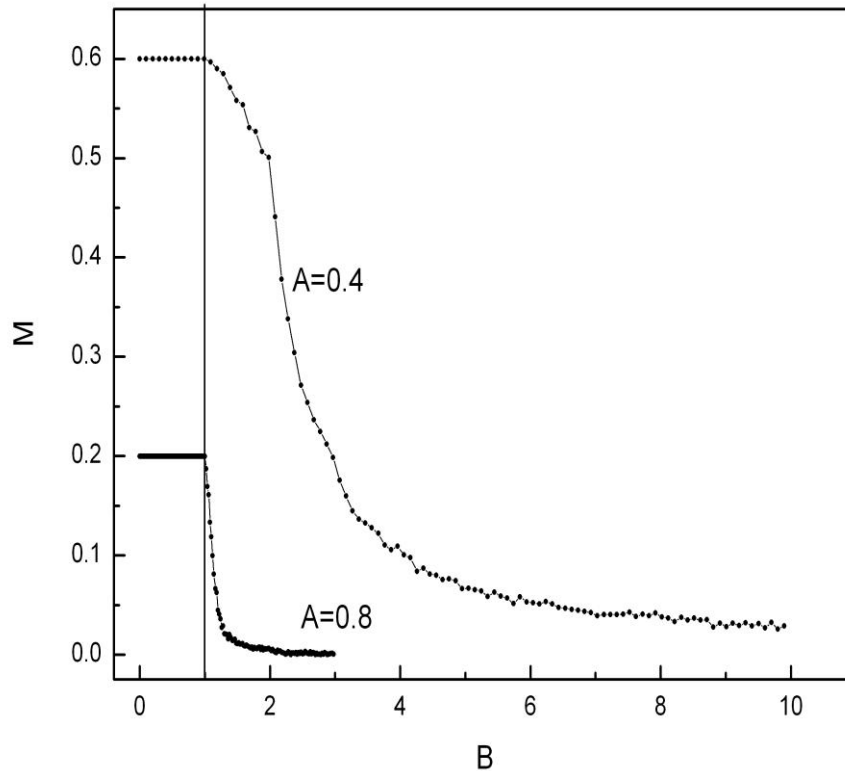


Рис. 3. Зависимость намагниченности (M) от величины флуктуаций (B) внешнего поля h_k . $B = 0$ соответствует случаю, когда симметрия внешнего поля совпадает с симметрией основного состояния.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ashcroft N.W. and Mermin N.D. Solid State Physics // Saunders, 1976. – P. 826.
2. Sachdev S. Quantum Phase Transitions Cambridge // Cambridge Univ. Press, 1999.
3. Боголюбов Н.Н. Квазисредние в задачах статистической механики. // Дубна: ОИЯИ(ЛТФ; Д-781). - 1961. - С. 123.
4. Hubbard J. Generalized Wigner lattices in one dimension and some applications to tetra-cyanoquinodimethane (TCNQ) salts // Phys.Rev.B – 1978. – Vol. 17. - P. 494-505.
5. Белоусов А.И., Верзаков С.А., Лозовик Ю.Е. Джозефсоновский массив микроскопических объектов. Модуляция свойств системы химическим потенциалом // ЖЭТФ– 1998. - т. 114, вып. 2(8) - С. 591-604.
6. Slavin V.V., Slutskin A.A. Thermodynamics of a one-dimensional lattice system with long-range interelectron repulsion // Phys. Rev. B – 1996. - Vol. 54. - P. 8095-8100.
7. Slutskin V.V., Slavin and Kovtun H.A. Ground state of a two-dimensional lattice system with a long-range interparticle repulsion: Stripe formation and effective lowering of dimension // Phys. Rev. B – 2000. – Vol. 61. - P. 14184-14193.
8. Slavin V.V. Low-temperature thermodynamics and the ground state structure of one-dimensional disordered electron lattice system // Phys. Stat. Sol.(b) – 2004. - Vol.241, N13. - P. 2928-2937.

Стаття надійшла до редакції 20.04.2013

A.A. Kryvchikov, V.V. Slavin

ILTPE, Ukr. Nat. Acad. Sci., Lenin Ave. 47, 61103, Kharkov

TRANSLATIONAL SYMMETRY BREAKING IN THE GROUND STATE OF ELECTRON GAS ON DISORDERED HOST LATTICE

The influence of disorder in host-lattice sites on the ground state properties of one-dimensional electron lattice gas has been studied. Numeric calculations of partition functions for the systems with $\sim 10^4$ particles have been carried out. It is shown that arbitrary weak disorder in host-lattice site positions leads to formation of electron blocks (“domains”) which destroy long-range order. Mean “domains” length is about $1/a^4$, where a is typical disorder in host-lattice sites positions. The calculations have been carried out using new effective method for the ground state structure and low-temperature thermodynamic properties investigations. The method is based on the introduction of weak external non-homogeneous field into Hamiltonian of the system.

Keywords: electron gas, disordered systems, low-dimensional systems, generalized Wigner crystal, extended Hubbard model.

О.О. Кривчіков, В.В. Славін

ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, Проспект Леніна, 47, 61103, Харків

ПОРУШЕННЯ ТРАНСЛЯЦІЙНОЇ СИМЕТРІЇ ОСНОВНОГО СТАНУ ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ НА НЕВПОРЯДКОВАНІЙ МАТРИЦІ-ГРАТЦІ

Вивчено вплив невідповідності вузлів матриці-ґратки на основний стан одновимірного електронного газу. Проведено чисельний облік статистичної суми системи 10^4 частинок. Показано, що випадкове мале безладдя у розташуванні вузлів матриці-ґратки призводить до утворення блоків з електронів, своєрідних “доменів”, що знищують дальній порядок. Середня довжина доменів складає $\sim 1/a^4$, літерою a позначається характерне безладдя у розташуванні вузлів матриці-ґратки. Запропоновано і застосовано новий ефективний метод знаходження основного стану та обліку термодинамічних властивостей системи. Метод ґрунтується на впровадженні слабкого зовнішнього неоднорідного поля в гамільтоніан системи.

Ключові слова: електронний газ, невідповідні системи, низьковимірні системи, узагальнений Вігнерівський кристал, поширена модель Хаббарда.