

УДК 538.9

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОВОДИМОСТИ В РАСШИРЕННОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

© 2026 г. С. Д. Мостовой^{а, *}, О. В. Павловский^{а, b, **}

^аФизический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119991 Россия

^бНациональный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, 123182 Россия

*E-mail: sd.mostovoy@physics.msu.ru

**E-mail: pavlovsky@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 22.05.2025 г.

После доработки 27.05.2025 г.

Принята к публикации 02.06.2025 г.

В данной работе проведено вычисление электрической проводимости в расширенной модели Хаббарда на гексагональной решетке в зависимости от величины взаимодействия электронов на соседних узлах решетки в области фазовой диаграммы, где это взаимодействие примерно компенсирует взаимодействие электронов на одном узле. Исследование выполнено при помощи гибридного метода Монте-Карло с узловыми и линковыми полями Хаббарда. Обнаружено регулярное превышение проводимости над баллистической.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, модель Хаббарда, проводимость

DOI: 10.56304/S2079562925060181

1. ВВЕДЕНИЕ

Расширенная модель Хаббарда [1] хорошо известна в связи с задачами определения коллективных свойств релятивистских электронов в графене в режиме сильной связи. Типичным направлением исследования являются различные рассуждения свойств фаз модели и фазовых переходов между ними. Взаимодействие электронов в данной модели не может быть рассмотрено по теории возмущений, что вызывает необходимость разработки численных методов расчета наблюдаемых и корреляторов. Общераспространенный подход состоит в решеточной аппроксимации статистической суммы, которая может быть выполнена различными способами. Одним из способов является решеточная аппроксимация при помощи введения полей Хаббарда и преобразования Хаббарда-Стратоновича [2, 3]. В данной работе наряду с узловыми полями использованы также линковые поля [4].

Отдельным направлением исследования является изучение транспортных свойств электронных возбуждений в расширенной модели Хаббарда, например, изучение электропроводности. Показано, что проводимость безмассовых дираковских фермионов в случае отсутствия взаимодействия составляет $(1/4)e^2/$ [5]. Такая ситуация называется “баллистической проводимостью”, потому что при отсутствии рассеяния движущихся заря-

дов при движении сквозь материал заряды движутся по инерции. Она реализуется в случае, если средняя длина свободного пробега превышает линейные размеры среды. С другой стороны, баллистическая проводимость не бесконечная, потому что существует лишь ограниченное число носителей заряда, способных дать вклад в проводимость. В результате этого существует предел сопротивления [6–8].

Недавно было обнаружено, что в некоторых ситуациях проводимость все же может превышать баллистический предел [9–11]. Для описания этого аномального случая был предложен гидродинамический подход [12–14], связанный с коллективным движением зарядов. В данной статье сделана попытка рассматривать данное явление (называемое сверхбаллистической проводимостью) в рамках решеточной фермионной модели.

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ

Рассматривается расширенная модель Хаббарда на гексагональной решетке с L узлами вдоль каждого направления с периодическими граничными условиями. Гамильтониан модели задается следующим образом:

$$\hat{H} = -\kappa \sum_{\langle x,y \rangle, \sigma} (\hat{a}_{x,\sigma}^\dagger \hat{a}_{y,\sigma} + h.c.) + \frac{1}{2} \sum_{x,y} V_{xy} \hat{q}_x \hat{q}_y, \quad (1)$$

где κ – параметр хоппинга, $\langle x, y \rangle$ обозначает соседние узлы, σ – проекция спина (вверх или вниз), $\hat{q}_x = \hat{a}_{x,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{x,\uparrow} + \hat{a}_{x,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{x,\downarrow} - 1$ задает электрический заряд, и $\hat{a}_{x,\sigma}$ представляет оператор уничтожения электрона со спином σ в узле x . V_{xy} обозначает матрицу электростатического взаимодействия электронов с одним учтенным координационным радиусом (соответствующие параметры V_{00} , V_{01}). Размерность данной матрицы составляет $N_s \times N_s$, где $N_s = 2L^2$. Для вычислений использованы параметр обратной температуры $\beta = 1/(0.06\text{К})$ и параметр $\kappa = 2.8$ [эВ]. Само вычисление выполняется методом квантового гибридного Монте-Карло, технические основы которого подробно описаны в [1], а процедура дискретизации статсуммы на решетке и реализация смены состояний в процессе Монте-Карло подробно раскрыта в [2, 3]. Общее число временных слоев достигает $2N_T$, потому что каждый из N_T временных слоев разбит на два сомножителя, отдельно для кинетической части гамильтониана и части с взаимодействием (у нас $N_T = 60$). Наша схема вычислений имеет лишь небольшие отличия от источников, упомянутых выше, и приводит к формулам:

$$= \text{Tr} \{ e^{-\beta \hat{H}} \} = \int |\phi, \chi, \xi^{(\mu)}| \exp \{ -S_{HS} \} |\det M|^2, (2)$$

$$S_{HS} = \frac{\delta^{-1}}{2} \frac{\sum_{x,t} \phi_{xt}^2}{\alpha V'_{00}} + \frac{\sum_{x,t} (\chi_{xt} - (1-\alpha)V'_{00}\delta)^2}{2(1-\alpha)V'_{00}} \delta^{-1} + \sum_{t,x,\mu} \xi_{xt}^{(\mu)2} \frac{\delta^{-1}}{V_{01}}, (3)$$

$$V'_{00} \equiv V_{00} - 3V_{01}, (4)$$

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -E_{T-1}^{(f)} \\ E_0^{(k)} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_0^{(f)} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_1^{(k)} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_1^{(f)} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, (5)$$

$$E_t^{(k)} = -\exp \left\{ \kappa \delta \left\| \sum_{\mu} \delta_{y,x+\mu} \right\|_{N_s \times N_s} \right\}, (6)$$

$$E_t^{(f)} = -\text{diag} \exp \left\{ - \left(i\phi_{xt} + i \sum_{\mu} (\xi_{xt}^{(\mu)} + \xi_{x-\mu,t}^{(\mu)}) + \chi_{xt} \right) \right\}, (7)$$

где $E_t^{(f)}$ суть диагональные матрицы размером $N_s \times N_s$ с пространственными индексами x, y , $E_t^{(k)}$ – плотные матрицы $N_s \times N_s$, $\alpha = 0.95$ – параметр смешивания двух (основных) полей Хаббарда

и χ_{xt} , $t = 0, N_T - 1$ – параметр временного слоя (общее число временных слоев – $2N_T$). Запись $x - \mu$ означает узел решетки, переход из которого в соседний в направлении μ узел приводит в позицию x . Для подтверждения вида выражения (3) следует использовать следующий вид преобразования Хаббарда–Стратоновича:

$$\exp \left\{ -\frac{1}{2} \hat{q} V \hat{q} \delta \right\} = \int [\phi] \exp \left\{ -\frac{\delta^{-1}}{2} \phi V^{-1} \phi - i\phi \hat{q} \right\}. (8)$$

Таким образом, процесс Монте-Карло затрагивает только бозонные поля Хаббарда, а фермионные силы, изменяющие поля, учтены путем прямого дифференцирования определителя с фермионной матрицей.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ

Проводимость графена определяется согласно методике работы [15]. Вычисление использует формулу Грина–Кубо для определения коэффициента переноса при помощи коррелятора [16, 17]. Вычисление начинается с определения токового коррелятора, определенного согласно

$$G(\tau) = \frac{1}{3\sqrt{3}L^2} \sum_{\mu,\nu} T_{\mu\nu} \sum_{\langle x,z \rangle} \langle \hat{J}_\mu(x, \tau) \hat{J}_\nu(z, 0) \rangle, (9)$$

где

$$T_{\mu\nu} = -\frac{1}{2} + \frac{3}{2} \delta_{\mu\nu},$$

а μ, ν – пространственные направления. Выражение для тока $\hat{J}_\mu$ получается при помощи уравнения Гейзенберга:

$$\hat{J}(x) = \frac{d\hat{q}}{dt} = i[\hat{H}, \hat{q}] - i\kappa \sum_{\mu} (\hat{a}_{x+\mu}^\dagger \hat{a}_x - \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_{x-\mu} - \hat{b}_{x+\mu}^\dagger \hat{b}_x + \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_{x-\mu}) \equiv \sum_{\mu} \hat{J}_\mu(x). (10)$$

Различие во временных аргументах токов можно учесть при моделировании в решеточной аппроксимации путем выбора двух разных временных слоев: τ и 0 соответственно. Конкретное выражение имеет вид:

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}_\mu(x, t) \hat{J}_\nu(z, 0) \rangle = & -2\kappa^2 \text{Re} \{ (M^{-1})_{xy}^{tt} (M^{-1})_{zw}^{00} - \\ & - (M^{-1})_{xw}^{t0} (M^{-1})_{zy}^{0t} - (M^{-1})_{xy}^{tt} (M^{-1})_{wz}^{00} + \\ & + (M^{-1})_{xz}^{t0} (M^{-1})_{wy}^{0t} - (M^{-1})_{xy}^{tt} ((M^{-1})_{zw}^{00})^* + \\ & + (M^{-1})_{xy}^{tt} ((M^{-1})_{wz}^{00})^* - (M^{-1})_{yx}^{tt} (M^{-1})_{zw}^{00} + \\ & + (M^{-1})_{yw}^{t0} (M^{-1})_{zx}^{0t} + (M^{-1})_{yx}^{tt} (M^{-1})_{wz}^{00} - \\ & - (M^{-1})_{yz}^{t0} (M^{-1})_{wx}^{0t} + (M^{-1})_{yx}^{tt} ((M^{-1})_{zw}^{00})^* - \\ & - (M^{-1})_{yx}^{tt} ((M^{-1})_{wz}^{00})^* \}, \end{aligned}$$

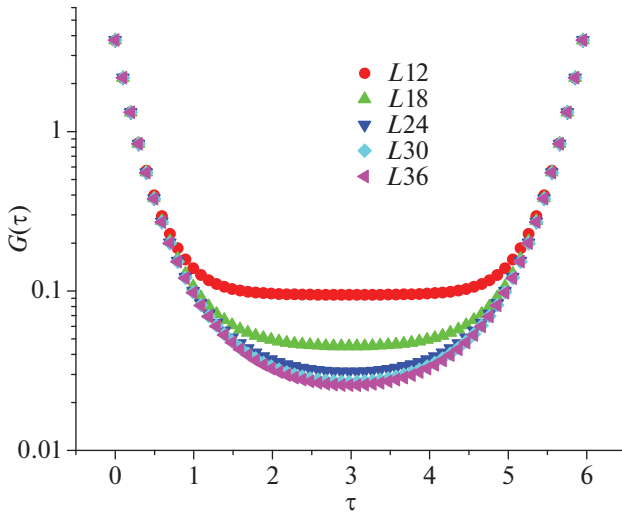


Рис. 1. Пример вычислений для $G(\tau)$ в случае идеальной системы для разных L . $T = 0.06\kappa$, $\tau \in [0; \beta]$.

где $y = x + \mu$, $y_1 + \mu = x$, $w = z + v$, $w_1 + v = z$ и индексы обратной матрицы относятся к слоям во времени и узлам в пространстве.

После получения $G(\tau)$ из моделирования Монте-Карло проводимость в зависимости от частоты определяется как решение уравнения

$$G(\tau) = \int_0^\infty \sigma(\omega) K(\tau, \omega) d\omega, \quad (11)$$

$$K(\tau, \omega) = \frac{\omega \cosh(\omega(\beta/2 - \tau))}{\pi \sinh(\omega\beta/2)}. \quad (12)$$

В силу сильной неустойчивости стандартных алгоритмов решения данной некорректно поставленной задачи предлагается воспользоваться более стабильным методом — методом Бакуса–Гильберта (Backus–Gilbert) [18]. Замечательное обсуждение может быть найдено в [19]. Функция $\sigma(\omega)$ может быть найдена в зависимости от частоты, но нас интересует лишь значение при $\omega = 0$. Будем обозначать это значение σ_0 .

С целью уменьшения статистических ошибок мы воспользовались четностью функции $G(\tau)$ относительно $\tau = \beta/2$ (это следует из периодичности на решетке) и перед использованием (11) заменили каждое значение функции $G(\tau)$ на полу-сумму соответствующих значений:

$$G(\tau) \rightarrow \frac{G(\tau) + G(\beta - \tau)}{2}, \quad \tau \in [0; \beta].$$

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Следует отметить, что проводимость σ подвержена значительному эффекту конечного объема.

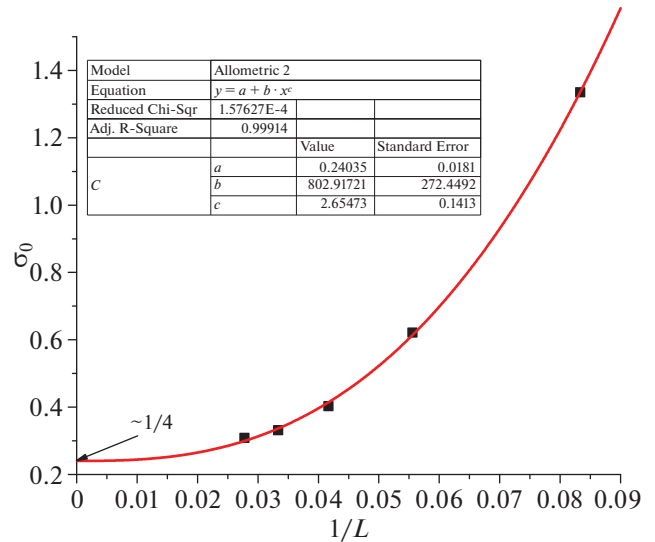


Рис. 2. Вычисления для идеальной системы используются с целью определить зависимость проводимости от $1/L$.

Поэтому вычисления должны проводиться для нескольких значений L и требуется предел $1/L \rightarrow 0$. К сожалению, компьютерное моделирование расширенной модели Хаббарда для больших L сопряжено со значительными трудностями. В этой связи для перехода к $1/L \rightarrow 0$ может быть использована экстраполяция.

К счастью, L может быть значительно увеличено путем рассмотрения идеальной модели: $V_{00} = V_{01} = 0$. Метод Монте-Карло не требуется, поля Хаббарда также не нужны, достаточно ввести фермионную матрицу M из блоков $E_i^{(k)}$. Вычисление $(M^{-1})_{xy}^{n_1}$ позволяет сразу перейти к коррелятору токов. Пример подобных вычислений представлен на рис. 1. После применения метода Бакуса–Гильберта получают $\sigma(\omega)$ для каждого отдельного L .

Для каждой кривой $G(\tau)$ проводимость при постоянной частоте $\sigma_0 \equiv \sigma(\omega = 0)$ рассчитывается отдельно, после чего эти значения аппроксимируются некоторой кривой, зависящей от $1/L$. Значение $1/4$ для бесконечной системы известно из теории (см., например, [5]) Результат показан на рис. 2. Для целей нашего исследования была выбрана зависимость

$$y = a + b \left(\frac{1}{L} \right)^c. \quad (13)$$

Нами получено значение $c = 2.65 \pm 0.14$.

В данной работе исследована проводимость при значениях параметров взаимодействия около прямой $V_{01} = V_{00} / 3$, потому что для таких значе-

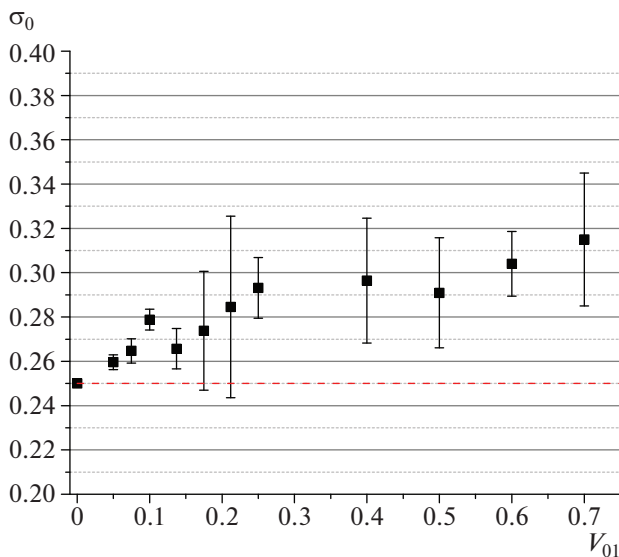


Рис. 3. Общее поведение σ_0 (в единицах e^2/h) в зависимости от V_{01} . Наблюдается стабильное превышение проводимости над уровнем $1/4$.

ний параметров взаимодействие электронов на одном узле и на соседних примерно “компенсируют” друг друга, т.е. система в некотором смысле близка к идеальной. $V_{00} > 3V_{01}$ выбрано, т. к. в противоположном случае в гибридном методе Монте-Карло возникает проблема знака. Мы вынуждены провести вычисления только лишь для $L = 12$ и $L = 18$ из-за вычислительных трудностей, возникающих в гибридном методе Монте-Карло для больших L . Для каждой пары полученных проводимостей для $\sigma_0(L = 12)$ и $\sigma_0(L = 18)$ выполняется экстраполяция по $1/L \rightarrow 0$ с $c = 2.65473$.

Получаемая для результатов погрешность оценивается как

$$\frac{\max_a \sigma_0(V_{01}, a) - \min_a \sigma_0(V_{01}, a)}{2}, \quad (14)$$

$$\sigma_0(V_{01}, a) \equiv \sigma_0(V_{01}, V_{00}^{(a)}) \Big|_{1/L \rightarrow 0},$$

где вычисление выполнялось для нескольких близких друг к другу значений V_{00} (индексируемых в (14) при помощи $a = 1, 2, \dots; V_{00}^{(1)}, V_{00}^{(2)}$ и т.д.), поскольку нужно предусмотреть влияние возникающих при Монте-Карло моделировании *метастабильных состояний*, роль которых может быть велика в окрестности прямой $V_{00} = 3V_{01}$ (т.к. велики показатели экспонент, содержащих деление на V_{00}' , см. (3)). Статистические ошибки также были рассчитаны, но они намного меньше, чем неопределенность, вызванная наличием метастабильных состояний.

Итоговый полученный результат представлен на рис. 3. Можно видеть, что σ_0 постепенно растет от значения $1/4$ при малых V_{01} до значений примерно в 2 раза больших. Кроме того, можно предположить, что при $V_{01} \approx 0.25$ приходит смена поведения. Это видно как из изменения поведения кривой, так и из локального увеличения погрешностей вычислений, что обычно имеет место в окрестности точек фазового перехода.

В целом, наши результаты могут служить указанием на стабильное превышение проводимости над баллистической в окрестности $V_{00} = 3V_{01}$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе делается попытка выполнить вычисление проводимости электронных возбуждений в расширенной модели Хаббарда на гексагональной решетке вдоль прямой $V_{00} = 3V_{01}$ со стороны больших V_{00} . При вычислении используется формула Грина–Кубо, связывающая коррелятор токов с проводимостью при разных частотах, но в качестве результата используется лишь значение статической проводимости (при нулевой частоте). Коррелятор токов вычисляется при помощи элементов обратной фермионной матрицы, которые получаются при моделировании гибридным методом Монте-Карло на решетке в $2 + 1$.

В области параметров V_{01} от 0 до 0.7к наблюдается регулярное превышение проводимости над баллистической. Данное явление (сверхбаллистический режим) в настоящее время изучается преимущественно при помощи гидродинамического подхода. Проведенное в данной работе вычисление показывает, что квантовая решеточная модель также может быть использована для цели этих исследований.

В качестве развития работы предполагается поиск параметра порядка, который мог бы указать на природу сверхбаллистической проводимости, а также более детальное рассмотрение окрестности $V_{01} \approx 0.25$ к, где наблюдается изменение поведения проводимости.

6. БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *Smith D., von Smekal L.* // Phys. Rev. B. 2014. V. 89 (19). P. 195429.
2. *Buividovich P. et al.* // Phys. Rev. B. 2018. V. 98 (23). P. 235129.
3. *Buividovich P. et al.* // Phys. Rev. B. 2019. V. 99 (20). P. 205434.

4. *Mostovoy S., Pavlovsky O.* // Phys. Rev. E. 2023. V. 107 (2). P. 025307.
5. *Katsnelson M.I.* // Mater. Today. 2007. V. 10 (1–2). P. 20–27.
6. *Landauer R.* // IBM J. Res. Dev. 1957. V. 1 (3). P. 223–231.
7. *Шарвин Ю.В.* // Журн. эксп. теор. физ. 1965. Т. 48. С. 984–985 [*Sharvin Yu.V.* // J. Exp. Theor. Phys. 1965. V. 21 (3). P. 655–656].
8. *Beenakker C.W.J., van Houten H.* // Solid State Phys. 1991. V. 44. P. 1–228.
9. *De Jong M.J.M., Molenkamp L.W.* // Phys. Rev. B. 1995. V. 51 (19). P. 13389.
10. *Krishna Kumar R. et al.* // Nature Phys. 2017. V. 13 (12). P. 1182–1185.
11. *Gooth J. et al.* // Nat. Commun. 2018. V. 9 (1). P. 4093.
12. *Andreev A.V., Kivelson S.A., Spivak B.* // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 106 (25). P. 256804.
13. *Torre I. et al.* // Phys. Rev. B. 2015. V. 92 (16). P. 165433.
14. *Guo H. et al.* // Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 2017. V. 114 (12). P. 3068–3073.
15. *Boyda D.L. et al.* // Phys. Rev. B. 2016. V. 94 (8). P. 085421.
16. *Kubo R.* // J. Phys. Soc. Jpn. 1957. V. 12 (6). P. 570–586.
17. *Mahan G.D.* Nonzero Temperatures. In: Many-Particle Physics. Physics of Solids and Liquids. 2000. Boston: Springer. P. 109–185.
https://doi.org/10.1007/978-1-4757-5714-9_3
18. *Backus G., Gilbert F.* // Geophys. J. Int. 1968. V. 16 (2). P. 169–205.
19. *Press W.H., Flannery B.P., Teukolsky S.A., Vetterling W.T.* Numerical recipes in C—the art of scientific computing. 1988. Cambridge: Cambridge Univ. Press.

A Study of Conductivity in the Extended Hubbard Model

S. D. Mostovoy^{1, *} and O. V. Pavlovsky^{1, 2, **}

¹*Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*

²*National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow, 123182 Russia*

**e-mail: sd.mostovoy@physics.msu.ru*

***e-mail: pavlovsky@physics.msu.ru*

Received May 22, 2025; revised May 27, 2025; accepted June 2, 2025

Abstract—In this paper an electrical conductivity in the extended Hubbard model on a hexagonal lattice is computed as a function of the intensity of the electrons’ interaction at neighbouring lattice sites in the region of the phase diagram where the neighbouring interaction and the on-site interaction approximately compensate each other. The study was performed using the Hybrid Monte Carlo method with Hubbard node and link fields. A regular excess of conductivity over a ballistic one was found.

Keywords: Monte Carlo method, Habbard model, conductivity