

**Современные методы расчета
(моделирования) электронной
структуры реальных сильно
коррелированных систем:
от LDA к LDA+DMFT**

И.А. Некрасов

Летняя школа «Актуальные проблемы теории конденсированного
состояния»

4 - 14 июля 2010 г., Зеленогорск Ленинградская область.

Общий план лекций

ЛЕКЦИЯ 1: Теория функционала электронной плотности и ее практические применения (DFT/LDA)

ЛЕКЦИЯ 2: Теория динамического среднего поля (DMFT) - решение модели Хаббарда

ЛЕКЦИЯ 3: Объединенная расчетная схема LDA+DMFT для изучения зонной структуры реальных сильно коррелированных систем

Лекция №2

1. Понятие электрон-электронных корреляций.
2. Модель Хаббарда.
3. Предел бесконечной размерности пространства.
4. Вывод самосогласованных уравнений теории динамического среднего поля (DMFT).
5. Однопримесная модель Андерсона и ее численное решение.
6. Учет нелокальных эффектов в DMFT.

Что такое корреляции?

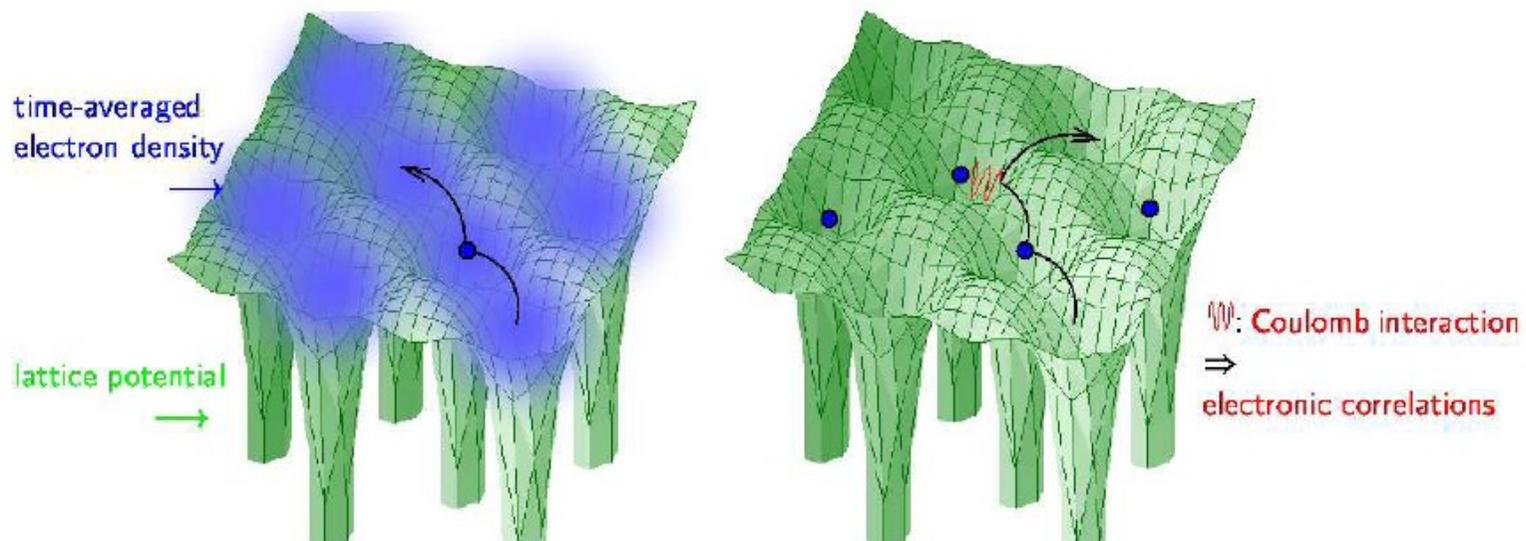
В математическом смысле:

$$\langle AB \rangle \neq \langle A \rangle \langle B \rangle$$

Тоже самое для плотностей:

$$\langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}') \rangle \neq \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle \langle \rho(\mathbf{r}') \rangle$$

Электронные корреляции - электронные многочастичные взаимодействия сверх приближения среднего поля (Хартри-Фока): движение каждого электрона связано (**коррелировано**) с движением других электронов в системе.



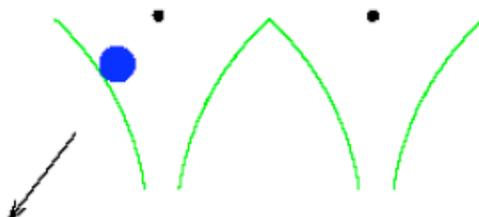
Первопринципный многоэлектронный гамильтониан в адиабатическом приближении

Многочастичный гамильтониан в приближении Борна-Оппенгеймера

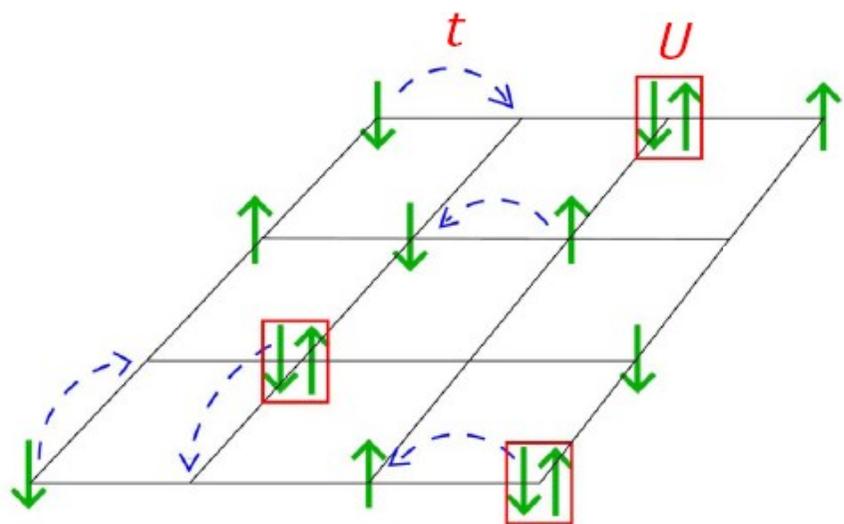
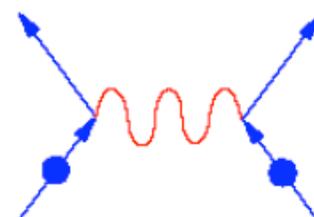
Кинетическая энергия

$$H = \sum_i \left[-\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m_e} + \sum_l \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_l}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l|} \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

Потенциал решетки



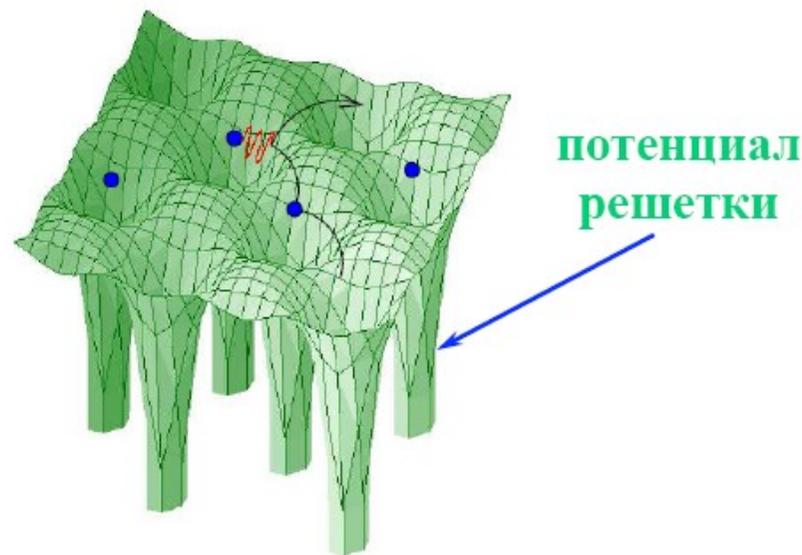
Кулоновское отталкивание



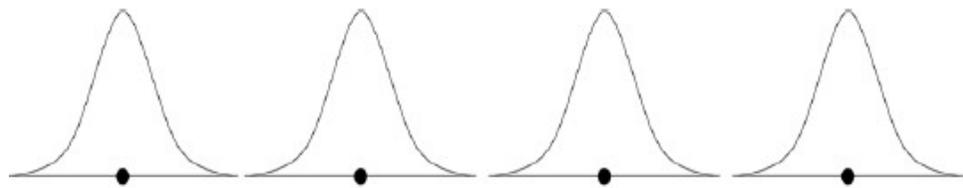
 -кулоновское взаимодействие



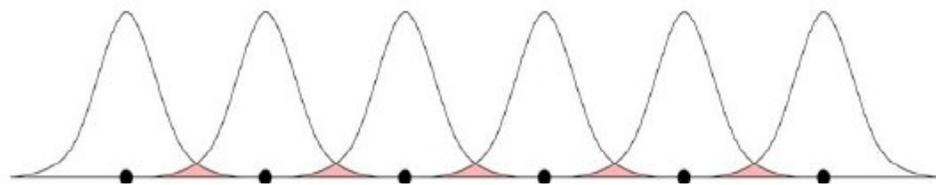
КОРРЕЛЯЦИИ



Электронные зоны в кристаллах



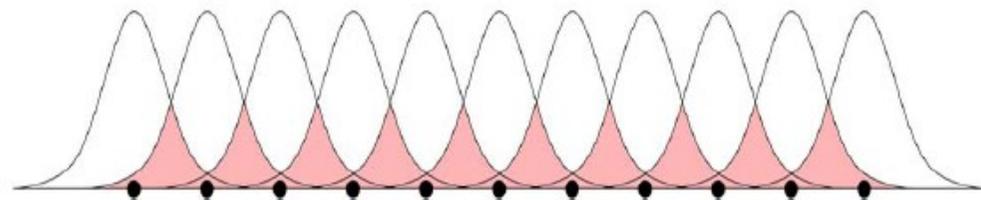
диэлектрик, локализованные электроны
(например, крист. Ne, NaCl) $n_{i\sigma}$



металл с узкими зонами,
коррелированный металл (например, Ce)

перекрывание волновых функций:
матричный элемент t (интеграл перескока)

$$n_{i\sigma} \leftrightarrow n_{k\sigma}$$



простой металл (широкие зоны)
(например Al)

$$n_{k\sigma}$$

$$\frac{1}{\hbar} |\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}| = v_{\mathbf{k}} = \frac{\text{параметр решетки } a}{\text{среднее время жизни на узле } \tau} \sim \frac{1}{\hbar} aW \quad \Rightarrow \tau \sim \frac{\hbar}{W} \quad U \sim W$$

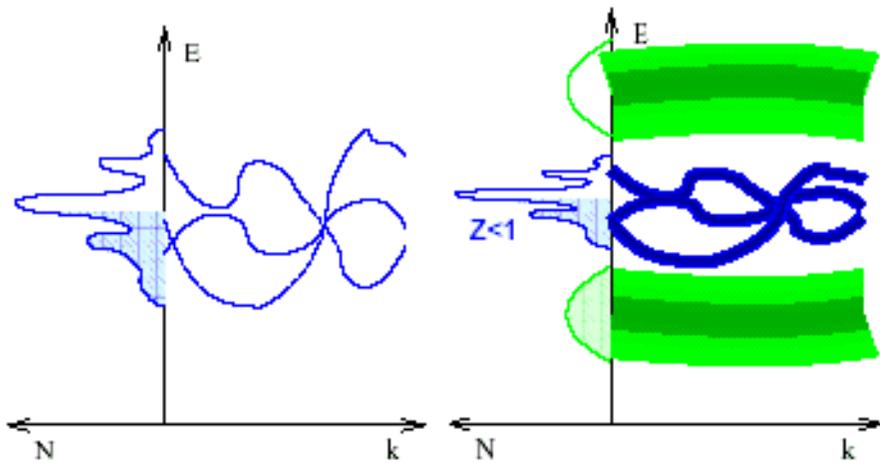
$$|\varepsilon_{\mathbf{k}}| \propto \text{перекрыванию } t \sim \text{ширине зоны } W$$

Узкая зона – больше время жизни – электроны успевают “почувствовать” друг-друга и провзаимодействовать

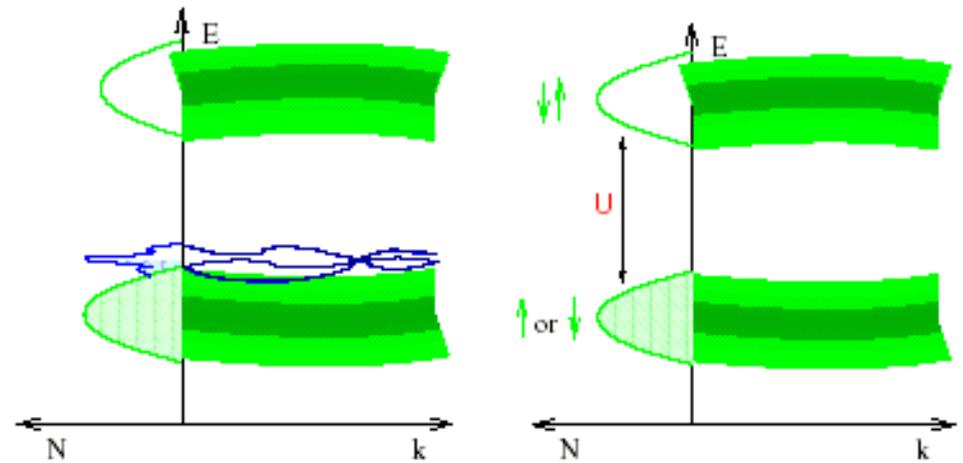
Сильно коррелированный металл

Сильно коррелированный металл – металлическая система с сильными электрон-электронными кулоновскими взаимодействиями, в которой одновременно присутствуют и зонные (одночастичные) и атомopodobные (многочастичные) состояния

Сильно коррелированный металл: $U < W$



Легированный моттовский изолятор: $U \gg W$

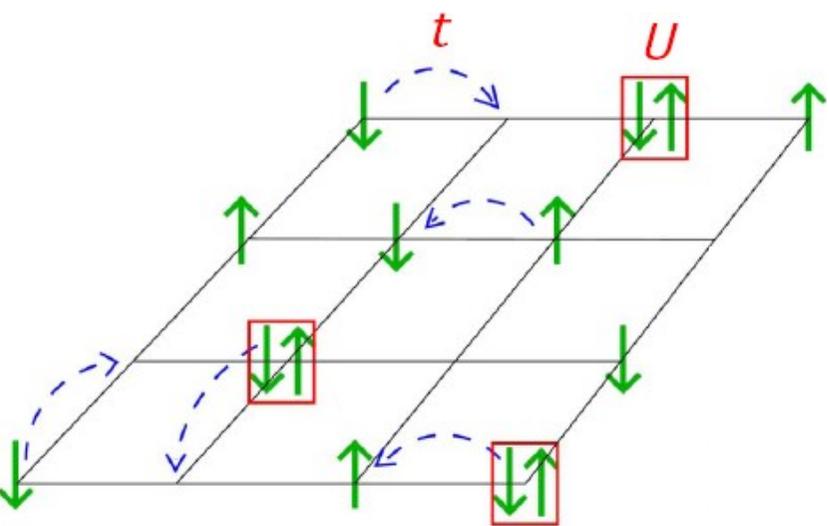


Одноузельное кулоновское взаимодействие / ширина невз. зоны

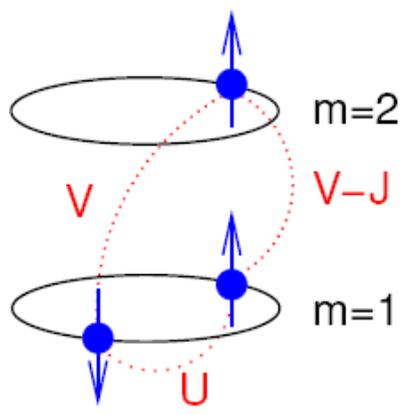
Модель Хаббарда

Простейшая квантово-механическая модель содержащая коллективизированные и локализованные состояния (взаимодействующие фермионы на решетке)

M. C. Gutzwiller, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 59 (1963).
 J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. London* **A276**, 238 (1963).
 J. Kanamori, *Prog. Theor. Phys.* **30**, 275 (1963).



The diagram shows a 3D lattice of sites. Green arrows represent hopping t between adjacent sites. Red boxes containing $\uparrow\downarrow$ represent on-site interactions U . Red dashed arrows between layers represent interlayer hopping V .

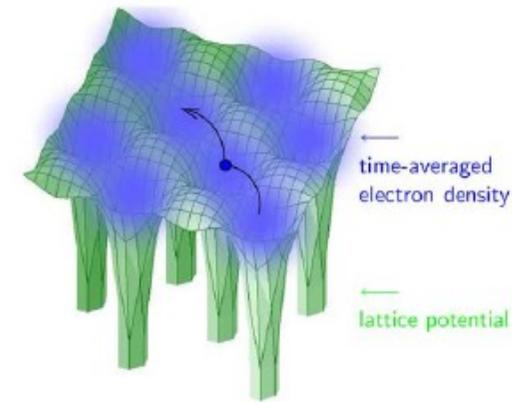
$$H_{MBHM} = - t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_{i,m} \hat{n}_{im\uparrow} \hat{n}_{im\downarrow} + \sum_{i,m \neq m', \sigma \sigma'} (V - \delta_{\sigma\sigma'} J) \hat{n}_{im\sigma} \hat{n}_{im'\sigma'}$$


The diagram shows two layers, $m=1$ and $m=2$. Blue arrows represent hopping t within each layer. Red dashed arrows between layers represent interlayer hopping V . Red boxes containing $\uparrow\downarrow$ represent on-site interactions U .

Как решить многозонную модель Хаббарда?

Что делать если: U/t , J/t , $V/J=O(1)$???

Приближение Хартри-Фока (среднее поле)



$$(\mathbf{n}_1 - N_1)(\mathbf{n}_2 - N_2) = \delta \mathbf{n}_1 \delta \mathbf{n}_2 = 0$$

$$\text{Тогда: } \mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2 = \mathbf{n}_1 N_2 + \mathbf{n}_2 N_1 - N_1 N_2$$

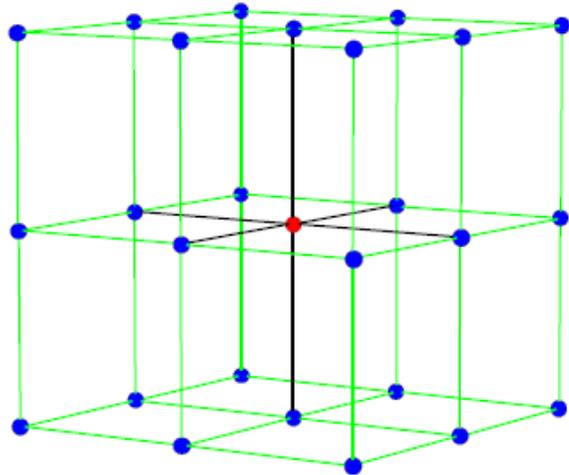
Величина кулоновского одноузельного (хуббардовского) взаимодействия U достаточно велика ($U \gg t$) и состояния «двоек» маловероятны

$$\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle \neq \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle$$

таким образом приближение Хартри-Фока не достаточно для описания корреляционных эффектов!!!

Предел бесконечной размерности пространства

$Z \rightarrow \infty$: ∞ это сколько?



простая кубическая $Z=6$

Связь числа соседей и размерности пространства

$$Z = 2d$$

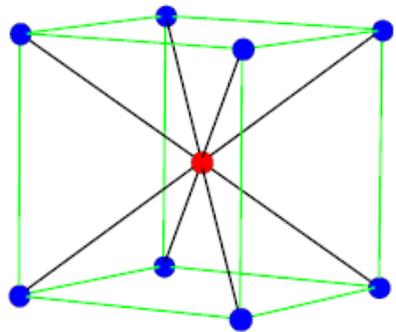
таким образом для «реальных» систем

$$Z \sim \mathcal{O}(10)$$

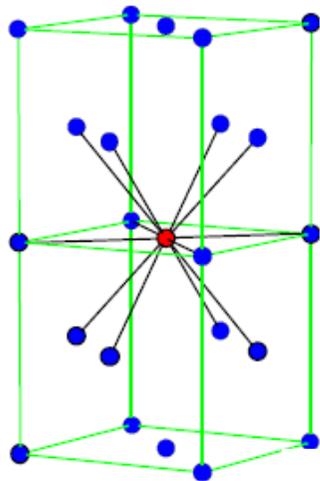
и можно ввести малый параметр

$$1/Z \quad 1/d$$

Для построения среднеполевых теорий, которые применимы во всем диапазоне взаимодействий, магнитных полей и температур, для которых существует диаграммная техника по $1/d$



ОЦК $Z=8$



ГЦК $Z=12$

Предел бесконечной размерности пространства

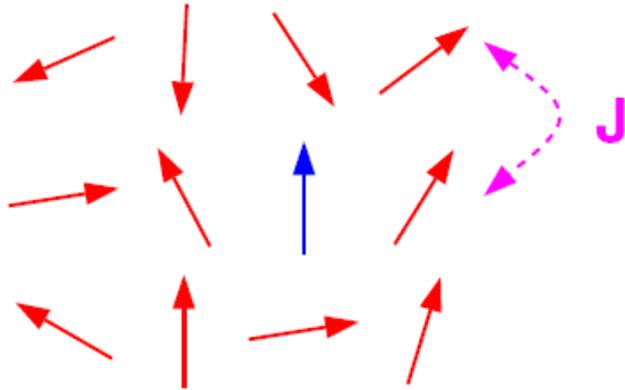
Аналогия с моделью Изинга

классические спины

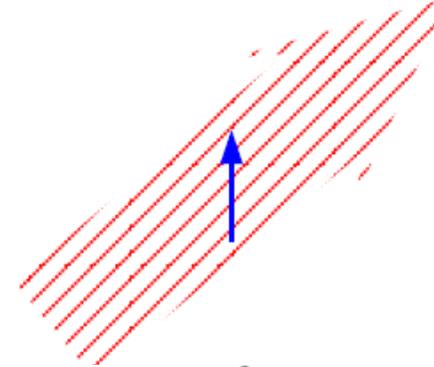
$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle R_i, R_j \rangle} S_i S_j$$

$$H^{\text{MF}} = -h_{\text{MF}} \sum_{R_i} S_i + \frac{1}{2} L J Z \langle S \rangle^2$$

$$h_{\text{MF}} \equiv J \langle S \rangle$$



$Z \rightarrow \infty$



нелокальная & динамическая

локальная & статическая

$$\langle [S_i - \langle S \rangle][S_j - \langle S \rangle] \rangle \equiv 0$$

$$\langle S \rangle = \tanh(\beta J^* \langle S \rangle)$$

R. Brout, *Phys. Rev.* **118**, 1009 (1960).

C. J. Thompson, *Commun. Math. Phys.* **36**, 255 (1974).

Перенормировка параметра взаимодействия в пределе $Z \rightarrow \infty$

$$J \rightarrow \frac{J^*}{Z}, \quad J^* = \text{const}$$

Предел бесконечной размерности пространства Для случая фермионов

W. Metzner and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{i=1}^d \cos k_i$$

Дисперсия d-мерной гиперкубической решетки для случая только ближайших соседей

$$N_d(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})$$

Определение электронной плотности состояний (плотность вероятности того, что $\omega = \varepsilon_{\mathbf{k}}$)

$$N_d(\omega) \xrightarrow{d \rightarrow \infty} \frac{1}{2t\sqrt{\pi d}} \exp \left[- \left(\frac{\omega}{2t\sqrt{d}} \right)^2 \right]$$

Тогда для случайного набора $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_d)$ суммируются случайные числа $-2t \cos k_i$ и в пределе $d \rightarrow \infty$ используя теорему больших чисел получаем гауссиан

$$t \rightarrow \frac{t^*}{\sqrt{d}}, \quad t^* = \text{const}$$

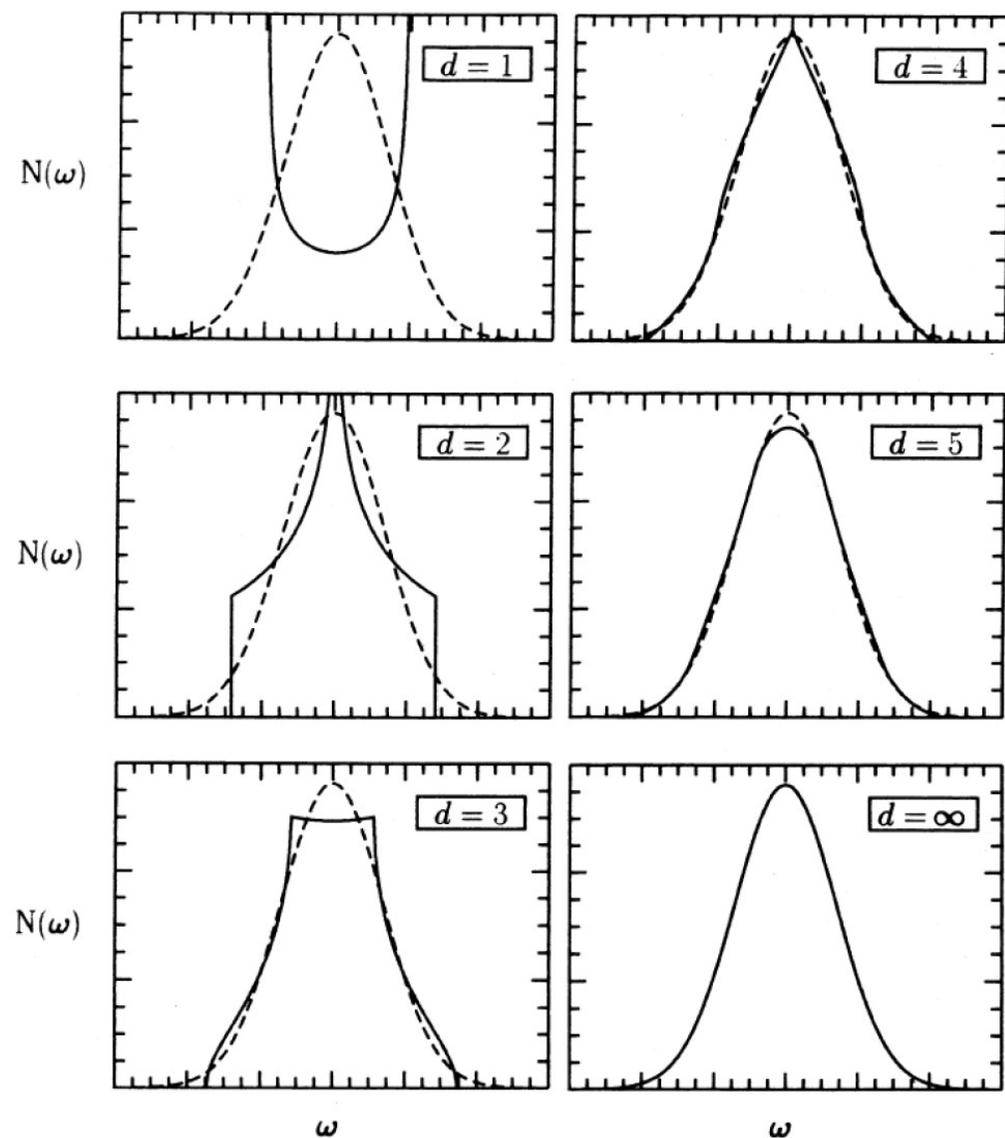
Возникает перенормировка интеграла перескока в пределе $d \rightarrow \infty$, что позволяет сохранить конечной кинетическую энергию на одну частицу

$$N_{\infty}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t^*}} \exp \left[- \frac{1}{2} \left(\frac{\omega}{t^*} \right)^2 \right]$$

$$E_{\text{kin}}^0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} = -2Lt^{*2} N_{\infty}(E_F)$$

Предел бесконечной размерности пространства Для случая фермионов

W. Metzner and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).



$$\begin{aligned}
 N_d(\omega) &= \prod_{i=1}^d \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\tau(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})} \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} [J_0(2\tau t)]^d, \\
 N_d(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} t^*} e^{-\frac{1}{2}(\omega/t^*)^2} \left\{ 1 - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{16d} \left[\left(\frac{\omega}{t^*}\right)^4 - 6\left(\frac{\omega}{t^*}\right)^2 + 3 \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{d^2}\right) \right\}.
 \end{aligned}$$

Предел бесконечной размерности пространства Упрощения для случая фермионов

W. Metzner and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).

$$E_{\text{kin}}^0 = -\frac{t}{2\pi i} \sum_{\langle \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j \rangle} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{ij,\sigma}^0(\omega)$$

Кинетическая энергия, записанная через функцию Грина $G_{ij,\sigma}^0(\omega)$

$$G_{ij,\sigma}^0 \sim 1/\sqrt{d}$$

Несмотря на то, что пропагатор в пределе $d \rightarrow \infty$ стремится к нулю, локальная динамика сохраняется

Показано, что пропагатор удовлетворяет данной метрике — фермионы двигаются по вертикали либо горизонтали, но не по диагонали

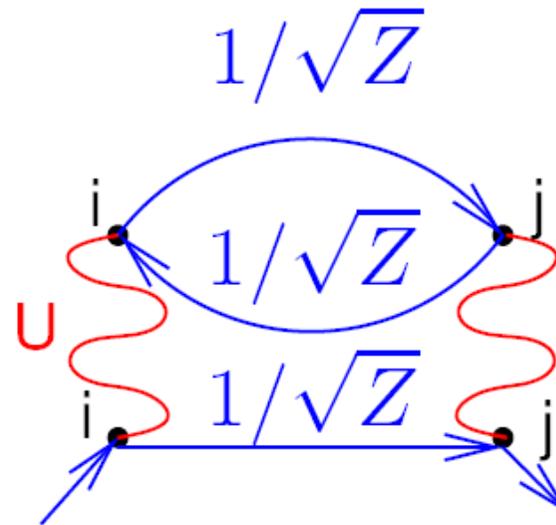
W. Metzner, *Z. Phys. B* **77**, 253 (1989)

P. G. J. van Dongen, F. Gebhard, and D. Vollhardt, *Z. Phys.* **76**, 199 (1989).

Предел бесконечной размерности пространства Упрощения для случая фермионов

W. Metzner and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).

$$G_{ij}(\omega) \sim 1/\sqrt{Z}$$



$$t_{ij} \sim 1/\sqrt{Z}$$

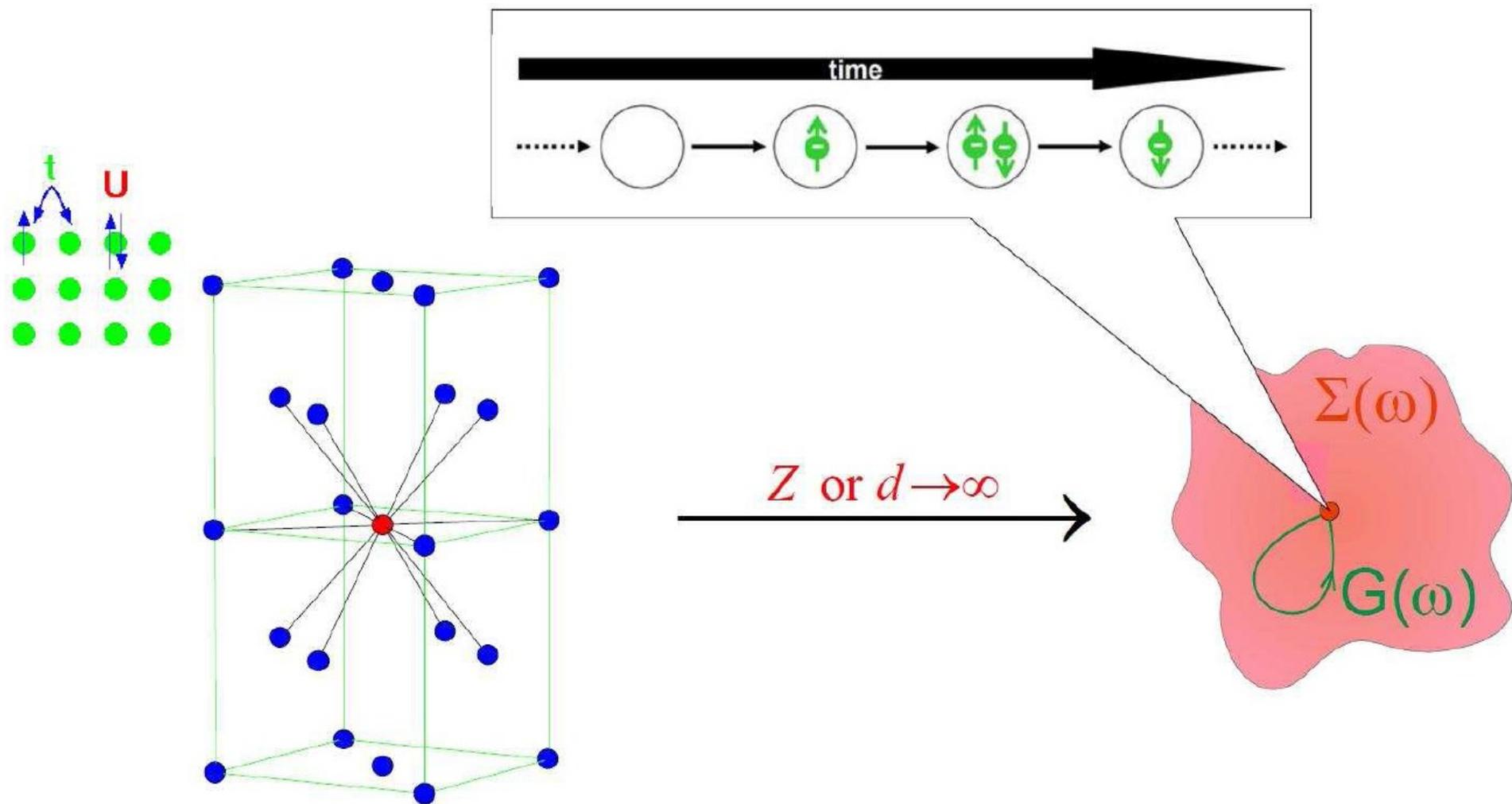
вклад порядка $\frac{1}{\sqrt{Z}^3} Z \xrightarrow{Z \rightarrow \infty} 0$

$$\Sigma_{ij,\sigma}(\omega) \stackrel{d \rightarrow \infty}{\equiv} \Sigma_{ii,\sigma}(\omega) \delta_{ij}$$

Остаются только локальные диаграммы $\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) \stackrel{d \rightarrow \infty}{\equiv} \Sigma_{\sigma}(\omega)$

Локальная (одноузельная) динамика полностью в $\Sigma(\omega)$!!!

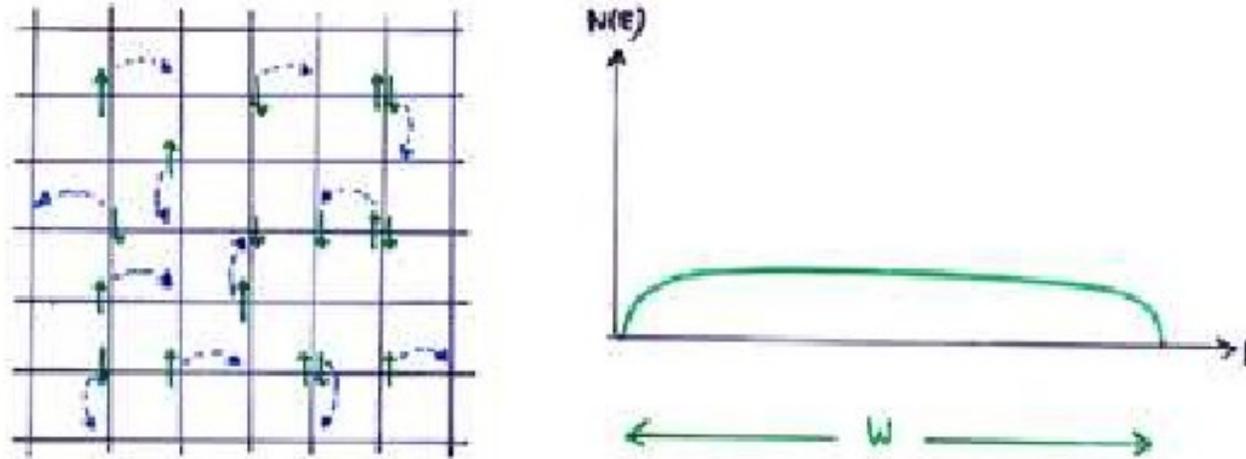
Вывод уравнений DMFT



$Z=12$

Покажем, что в пределе бесконечной размерности пространства решение решеточной модели Хаббарда эквивалентно решению *эффективной* однопримесной модели Андерсона.

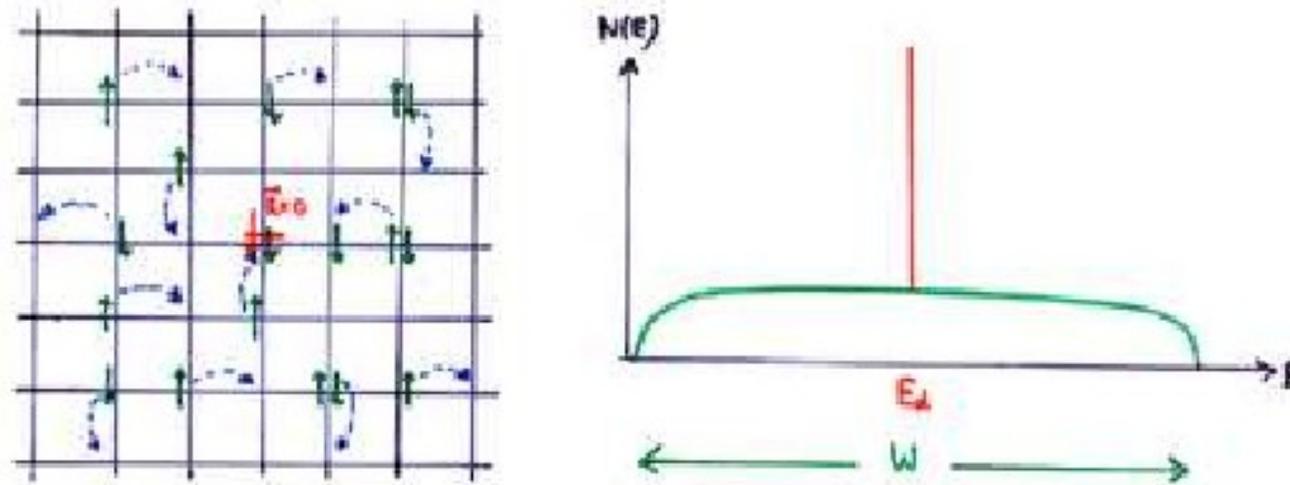
Одиночная примесь в фермионном резервуаре



$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}$$

электроны проводимости

Одиночная примесь в фермионном резервуаре

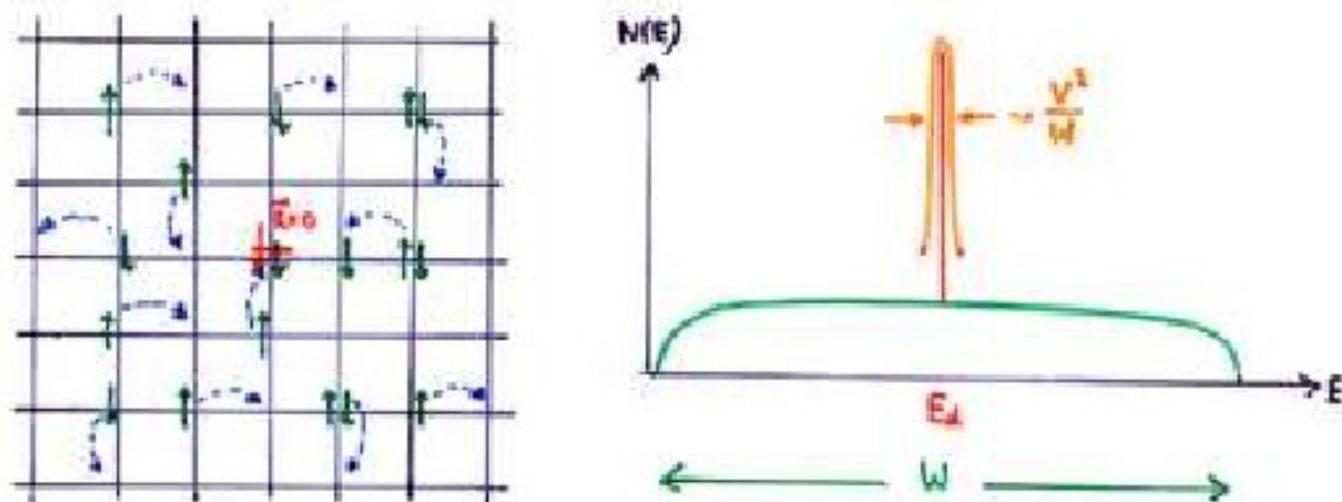


$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d \hat{d}_{\sigma}^\dagger \hat{d}_{\sigma}$$

Электроны проводимости

+ Электроны примеси

Одиночная примесь в фермионном резервуаре



$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d \hat{d}_{\sigma}^\dagger \hat{d}_{\sigma} + \sum_{\vec{k}\sigma} V_{\vec{k}} (\hat{d}_{\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} + h.c.)$$

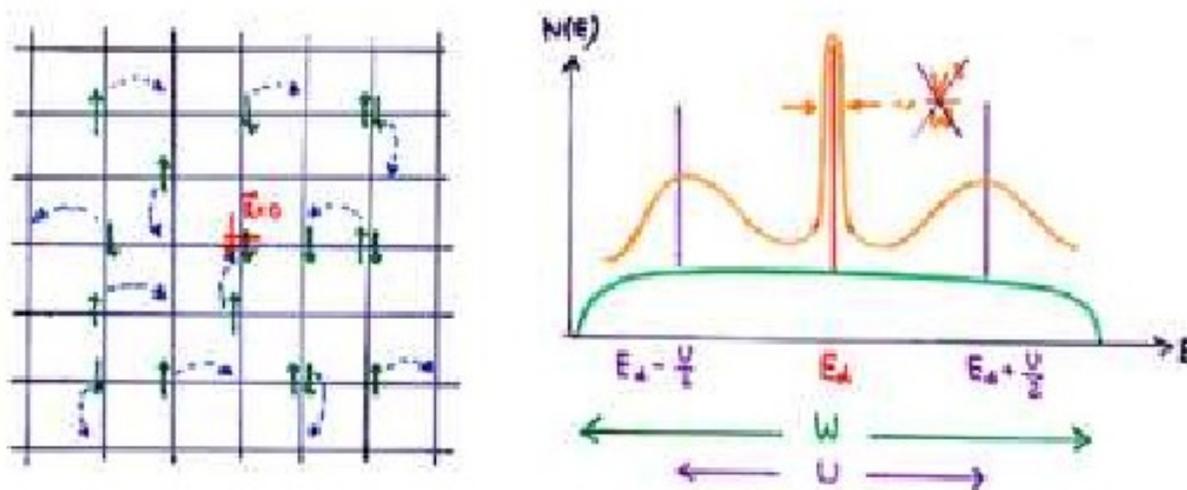
электроны проводимости

электроны примеси

гибридизация

Single Impurity Anderson Model (SIAM)

Одиночная примесь в фермионном резервуаре



$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d \hat{d}_{\sigma}^\dagger \hat{d}_{\sigma} + \sum_{\vec{k}\sigma} V_{\vec{k}} (\hat{d}_{\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} + h.c.) + U \hat{d}_{\uparrow}^\dagger \hat{d}_{\uparrow} \hat{d}_{\downarrow}^\dagger \hat{d}_{\downarrow},$$

электроны проводимости

электроны примеси

гибридизация

взаимодействие
на примеси

Вывод уравнений DMFT

Стат. сумма системы для большого канонического ансамбля Гиббса через функциональный (Гауссов) интеграл по Грассмановым числам

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{i\sigma} Dc_{i\sigma}^* Dc_{i\sigma} \exp[-S\{c_{i\sigma}^*, c_{i\sigma}\}]$$

Грассмановы числа

Антикоммутирующие математические объекты

$$\xi_\alpha \xi_\beta + \xi_\beta \xi_\alpha = 0 \quad \longrightarrow \quad \xi_\alpha^2 = 0$$

$$(\xi_\alpha)^* = \xi_\alpha^*, \quad (\xi_\alpha^*)^* = \xi_\alpha \quad \text{Сопряженное число}$$

$$f(\xi) = f_0 + f_1 \xi \quad \text{Любая функция данных чисел будет линейной}$$

$$A(\xi^*, \xi) = a_0 + a_1 \xi + \bar{a}_1 \xi^* + a_{12} \xi^* \xi \quad \text{Квадратичная форма}$$

$$\langle f | g \rangle = \int d\xi^* d\xi e^{\xi^* \xi} f^*(\xi) g(\xi^*) = f_0^* g_0 + f_1^* g_1 \quad \text{Скалярное произведение}$$

Гауссов интеграл

Для обычных чисел

$$\int \frac{dx_1 \dots dx_n}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} e^{-\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j + x_i J_i} = [\det A]^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{2} J_i A_{ij}^{-1} J_j} \quad \longrightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Для Грассмановых чисел

$$\int \prod_{i=1}^n d\eta_i^* d\eta_i e^{-\eta_i^* H_{ij} \eta_j + \xi_i^* \eta_i + \xi_i \eta_i^*} = [\det H] e^{\xi_i^* H_{ij}^{-1} \xi_j} \quad \longrightarrow \quad \int d\xi^* d\xi e^{-\xi^* a \xi} = a$$

Действие: аналогия с механикой

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt, \quad H(p, q, t) = \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}, t)$$

$L(q, \dot{q}, t)$ Функция Лагранжа

Действие для модели Хаббарда

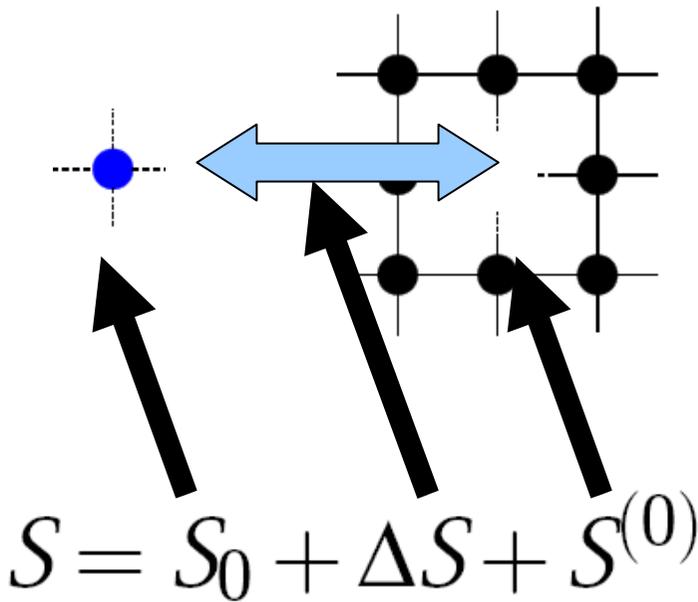
$$\hat{H}_{HM} = \sum_{i,\sigma} (\varepsilon_d - \mu) d_{i,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} d_{i,\sigma}^\dagger d_{j,\sigma} + \sum_{i,\sigma} U_d d_{i,\uparrow}^\dagger d_{i,\uparrow} d_{i,\downarrow}^\dagger d_{i,\downarrow}$$

Обобщенные переменные C и C^* классический предел для $d_{i,\sigma}^\dagger / d_{i,\sigma}$

Интегрирование ведется по мнимому времени $\tau = it$, $\tau \in [0, \beta]$

$$S\{c_{i\sigma}^*, c_{i\sigma}\} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^*(\tau) c_{j\sigma}(\tau) \right. \\ \left. + \sum_i U c_{i\uparrow}^*(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^*(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) \right]$$

Вывод уравнений DMFT



Давайте выделим в решетке некоторый узел

Запишем действие системы

в виде трех слагаемых:

- 1) выделенный узел,
- 2) связь узла и решетки,
- 3) остальная решетка

$$S_0 = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{\sigma} c_{0\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{0\sigma}(\tau) + U c_{0\uparrow}^*(\tau) c_{0\uparrow}(\tau) c_{0\downarrow}^*(\tau) c_{0\downarrow}(\tau) \right]$$

$$\Delta S = - \int_0^\beta d\tau \sum_{i\sigma} [t_{i0} c_{i\sigma}^*(\tau) c_{0\sigma}(\tau) + t_{0i} c_{0\sigma}^*(\tau) c_{i\sigma}(\tau)]$$

$$S^{(0)} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i \neq 0, \sigma} c_{i\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij \neq 0, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^*(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + U \sum_{i \neq 0} c_{i\uparrow}^*(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^*(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) \right]$$

Вывод уравнений DMFT

Стат. сумма системы для большого канонического ансамбля Гиббса через функциональный (Гауссов) интеграл по Грассмановым числам

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{i\sigma} Dc_{i\sigma}^* Dc_{i\sigma} \exp[-S\{c_{i\sigma}^*, c_{i\sigma}\}]$$

Перекомпонуем множители в показателе экспоненты таким образом, что

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = \mathcal{Z}^{(0)} \int \prod_{\sigma} Dc_{0\sigma}^* Dc_{0\sigma} \exp[-S_0\{c_{0\sigma}^*, c_{0\sigma}\}] \\ \times \langle \exp[-\Delta S\{c_{0\sigma}^*, c_{0\sigma}, c_{i\sigma}^*, c_{i\sigma}\}] \rangle_{(0)}. \end{aligned}$$

Разложим вторую экспоненту в ряд

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = \mathcal{Z}^{(0)} \int \prod_{\sigma} Dc_{0\sigma}^* Dc_{0\sigma} \exp[-S_0\{c_{0\sigma}^*, c_{0\sigma}\}] \left(1 - \int_0^{\beta} d\tau \langle \Delta S(\tau) \rangle_{(0)} \right. \\ \left. + \frac{1}{2!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\beta} d\tau_2 \langle \Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2) \rangle_{(0)} + \dots \right) \end{aligned}$$

В данном разложении останутся только члены с четным числом ΔS

Вывод уравнений DMFT

Используя определение одночастичной функции Грина

$$G_{jk\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2) = -\langle T_\tau c_{j\sigma}(\tau_1) c_{k\sigma}^*(\tau_2) \rangle_{(0)}$$

В пределе $d \rightarrow \infty$ получим локальное действие

$$S_{\text{loc}} = \left[\int_0^\beta d\tau \sum_\sigma c_{0\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{0\sigma}(\tau) + U \int_0^\beta d\tau c_{0\uparrow}^*(\tau) c_{0\uparrow}(\tau) c_{0\downarrow}^*(\tau) c_{0\downarrow}(\tau) \right. \\ \left. + \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_\sigma \sum_{j,k \neq 0} t_{j0}^* t_{k0}^* G_{jk\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2) c_{0\sigma}^*(\tau_1) c_{0\sigma}(\tau_2) \right]$$

В пределе $d \rightarrow \infty$ вклады высших порядков исчезают минимум как $1/d$

Последнее слагаемое есть функция гибридизации узла и термостата

Вывод уравнений DMFT

Введем аналог «поля Вейсса»

$$\mathcal{G}_\sigma^{-1}(\tau_1 - \tau_2) = - \left(\frac{\partial}{\partial \tau_1} - \mu \right) \delta_{\tau_1 \tau_2} - \Delta_\sigma(\tau_1 - \tau_2)$$

Тогда локальное действие примет вид

$$S_{\text{loc}} = - \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_\sigma c_\sigma^*(\tau_1) \mathcal{G}_\sigma^{-1}(\tau_1 - \tau_2) c_\sigma(\tau_2) \\ + U \int_0^\beta d\tau c_\uparrow^*(\tau) c_\uparrow(\tau) c_\downarrow^*(\tau) c_\downarrow(\tau),$$

В конце концов нам нужно соотношение между ФГ $G_{ij\sigma}^{(0)}(\tau - \tau')$ системы без одного узла и полной решёточной ФГ $G_{ij\sigma}$:

$$G_{ij\sigma}^{(0)} = G_{ij\sigma} - G_{i0\sigma} G_{00\sigma}^{-1} G_{0j\sigma}$$

$$G_{00,\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) \quad G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma_\sigma(i\omega_n)}$$

Вывод уравнений DMFT

Функция Грина эффективной среды выражается через «решеточные» величины

$$\mathcal{G}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n - \epsilon_f + \Delta(i\omega_n) \equiv G^{-1} + \Sigma$$

В результате возникает замкнутая система уравнений. S_{loc} описывает эффективную модель Андерсона, где роль примесного узла играет узел 0, а “поле Вейсса” \mathcal{G}_σ^{-1} задаёт зону проводимости, получаемую в процессе самосогласования.

Самосогласованные уравнения DMFT

Стартовая DMFT СЭЧ $\Sigma(i\omega)$

Задание и решение
решеточной
проблемы в DMFT

$$G_{ii}(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega)}$$
$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) = \Sigma(i\omega) + G_{ii}^{-1}(i\omega)$$

Задание и решение эффективной примесной модели Андерсона

$$\Sigma(i\omega) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) - G_d^{-1}(i\omega)$$

Возврат до сходимости $G_d = G_{ii}$

Численные методы решения эффективной примесной модели Андерсона в уравнениях DMFT

Численно точные методы:

- Квантовый метод Монте-Карло ($\delta\tau \rightarrow 0$);
QMC – Quantum Monte-Carlo method
- Численная ренормгруппа ($\Lambda \rightarrow 1$);
NRG – Numerical Renormalization Group
- Точная диагонализация ($N \rightarrow \infty$).
ED – Exact Diagonalization

Приближенные методы:

- Приближение непересекающихся диаграмм (теория возмущения по гибридизации);
NCA – Non-Crossing Approximation
- Итеративная теория возмущений (интерполяционная схема);
IPT – Iterative Perturbation Theory

Квантовый метод Монте-Карло: алгоритм Хирша-Фая

Основная задача: Заменить многочастичную проблему на одночастичную во вспомогательном псевдо изинговском поле.

Расплата: Суммирование по экспоненциально большому числу вспомогательных полей

ШАГ № 1: Дискретизация примесной модели Андерсона на мнимом времени

$$\int_0^\beta d\tau \quad \rightarrow \quad \Delta\tau \sum_{l=1}^L \quad \psi(\tau) \rightarrow \psi_l$$
$$\beta = L\Delta\tau$$

Таким образом данный алгоритм «численно точен» при $\Delta\tau \rightarrow 0$.

Квантовый метод Монте-Карло: алгоритм Хирша-Фая

ШАГ № 2: Преобразование Троттера

$$e^{\Delta\tau\hat{A} + \Delta\tau\hat{B}} = e^{\Delta\tau\hat{A}}e^{\Delta\tau\hat{B}} + \frac{1}{2}\Delta\tau^2[\hat{A}, \hat{B}] + \mathcal{O}(\Delta\tau^3)$$

Где \hat{A} и \hat{B} кинетический \mathcal{G}^{-1} кулоновский U клады в действие

$$S_{eff} \rightarrow \sum_{\tau\tau'\sigma} c_{\sigma}^{+}(\tau)\mathcal{G}^{-1}(\tau, \tau')c_{\sigma}(\tau') + U \sum_{\tau} n_{\uparrow}(\tau)n_{\downarrow}(\tau)$$

Тогда можно ввести дискретизованную статсумму

$$Z \simeq Z^{\Delta\tau} \equiv \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau\mathcal{H}^0} e^{-\Delta\tau\mathcal{H}^i}$$

Систематическая погрешность порядка $\Delta\tau^2[\hat{A}, \hat{B}]$

Квантовый метод Монте-Карло: алгоритм Хирша-Фая

ШАГ № 3: Преобразование Хаббарда-Стратоновича

$$\exp\left(\frac{\Delta\tau U}{2}(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^2\right) = \frac{1}{2} \sum_{s_l = \pm 1} \exp\left(\lambda s_l (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})\right)$$
$$\cosh(\lambda) = \exp(\Delta\tau U/2)$$

Заменяем «четырехоператорный» вклад на двухоператорный
+ сумма по вспомогательным полям

Квантовый метод Монте-Карло: алгоритм Хирша-Фая

ШАГ № 4: Нахождение физической ФГ через МК-интегрирование

$$G = -\frac{1}{Z} \sum_{\{s_l = \pm 1\}} \int \mathcal{D}[\psi, \psi^*] \psi \psi^* \exp(\text{Tr } \psi^* M \psi)$$

$$M_{ll'}^\sigma = \Delta \tau^2 \mathcal{G}_\sigma^{-1}{}_{l,l'} - \lambda \Delta \tau \delta_{ll'} s_l \sigma$$

$$\text{Metropolis } \mathcal{P}(x \rightarrow x') = \min \{1, P(x')/P(x) = \det M' / \det M\}$$

И окончательно: $G = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_l = \pm 1\}} M^{-1} \det M$

Самосогласованное решение

$$\Sigma(i\omega) \Rightarrow \boxed{\text{Dyson}} \Rightarrow G(i\omega) \xrightarrow{\quad \text{blue arrow} \quad} \text{Для получения ФГ на вещественных частотах надо делать аналитическое продолжение}$$

$$\begin{array}{ccc} \uparrow & & \downarrow \Sigma = \mathcal{G}_0^{-1} - G^{-1} \\ \mathbb{E} & & \end{array}$$

$$G(\tau) \Leftarrow \boxed{\text{QMC}} \Leftarrow \mathcal{G}_0(\tau)$$

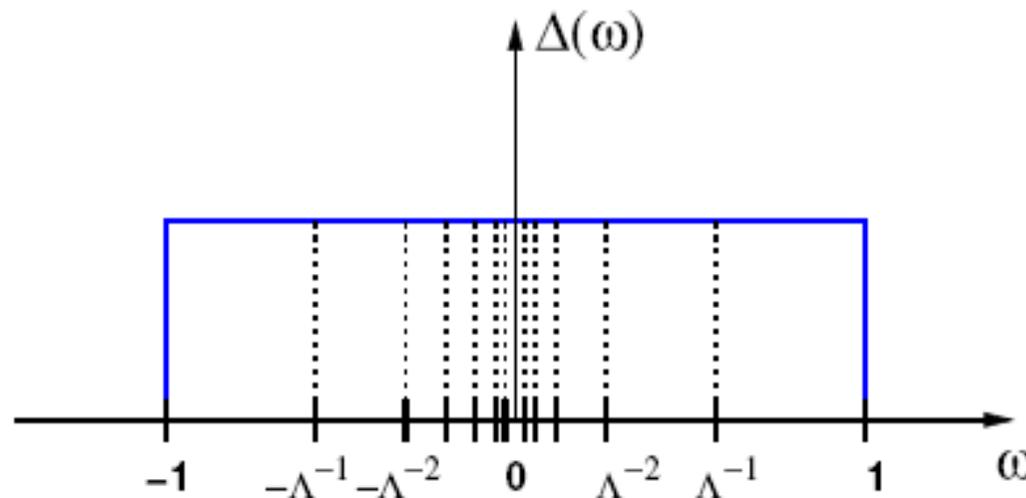
Численная ренормгруппа NRG

K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47, 773 (1975)

Основная задача: Логарифмическая дискретизация зоны проводимости и построение итерационной схемы для точной диагонализации полубесконечной цепочки.

Расплата: Экспоненциальный рост гильбертова пространства состояний

ШАГ № 1: Логарифмическая дискретизация зоны проводимости примесной модели Андерсона



$$X_n = \Lambda^{-n}$$

$$d_n = \Lambda^{-n}(1 - \Lambda^{-1})$$

Таким образом данный алгоритм «численно точен» при $\Lambda \rightarrow 1$

Численная ренормгруппа NRG

ШАГ № 1:

K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975)

Введем полный ОНБ

$$\psi_{np}^{\pm}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d_n}} e^{\pm i\omega_n p \varepsilon} & \text{for } X_{n+1} < \pm \varepsilon < X_n \\ 0 & \end{cases}$$

$p = 0, 1, 2, \dots$
 $\omega_n = 2\pi / d_n$

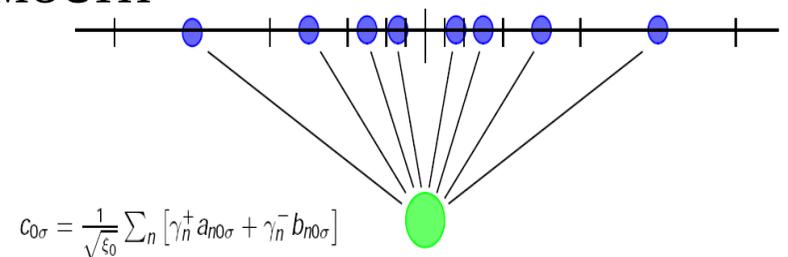
Выразим операторы электронов проводимости в новом ОНБ

$$a_{\varepsilon\sigma} = \sum_{np} \left[a_{np\sigma} \psi_{np}^+(\varepsilon) + b_{np\sigma} \psi_{np}^-(\varepsilon) \right]$$

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow} \quad \text{«Голая примесь»}$$

$$+ \sum_{n\sigma} \left[\xi_n^+ a_{n\sigma}^{\dagger} a_{n\sigma} + \xi_n^- b_{n\sigma}^{\dagger} b_{n\sigma} \right] \quad \text{Электроны проводимости}$$

$$+ \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \left[f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right]. \quad \text{Гибридизация}$$



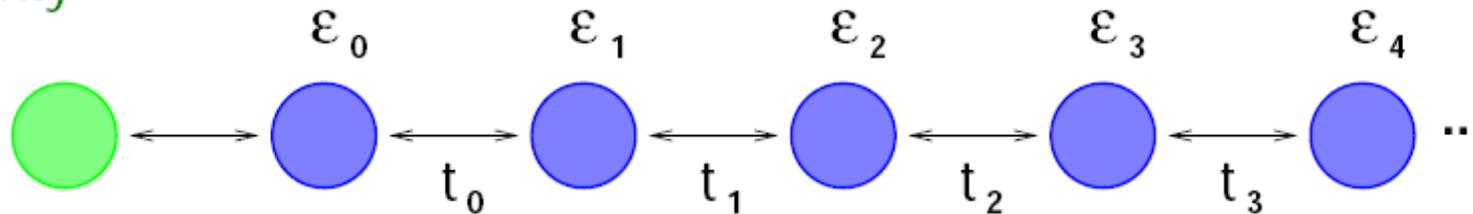
R. Bulla, A.C. Hewson, and Th. Pruschke
 J. Phys.: Condens. Matter **10**, 8365 (1998)

Численная ренормгруппа NRG

K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975)

ШАГ № 2: Переход к полубесконечной цепочке

impurity



$$H = \sum_{\sigma} \epsilon_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow} + \sqrt{\frac{\epsilon_{f0}}{\pi}} \sum_{\sigma} \left[f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right] \\ + \sum_{\sigma n=0}^{\infty} \left[\epsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} + t_n \left(c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+1\sigma} + c_{n+1\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} \right) \right].$$

Интегралы перескока экспоненциально уменьшаются $t_N \propto \Lambda^{-N/2}$

R. Bulla, A.C. Hewson, and Th. Pruschke
J. Phys.: Condens. Matter **10**, 8365 (1998)

Численная ренормгруппа NRG

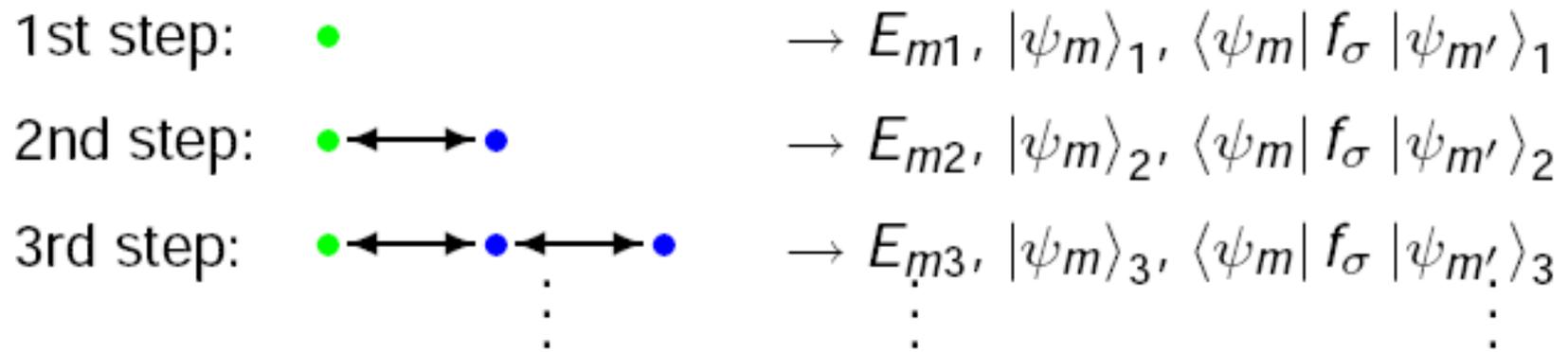
K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975)

ШАГ № 3: Итеративная диагонализация

Введем последовательность гамильтонианов

$$H = \lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda^{-(N-1)/2} H_N$$

$$H_{N+1} = \sqrt{\Lambda} H_N + \Lambda^{N/2} \sum_{\sigma} \epsilon_{N+1} c_{N+1\sigma}^{\dagger} c_{N+1\sigma} + \Lambda^{N/2} \sum_{\sigma} t_N \left(c_{N\sigma}^{\dagger} c_{N+1\sigma} + c_{N+1\sigma}^{\dagger} c_{N\sigma} \right)$$



Число состояний растет как 4^N

\rightarrow На каждом шаге оставляем max 500 состояний

R. Bulla, A.C. Hewson, and Th. Pruschke
J. Phys.: Condens. Matter **10**, 8365 (1998)

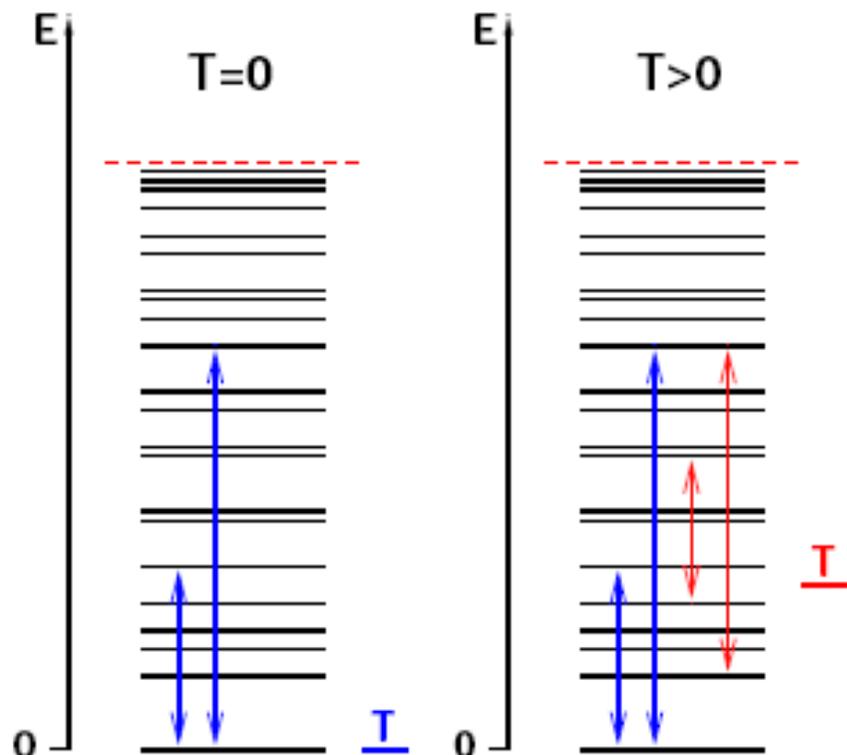
Численная ренормгруппа NRG

K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975)

ШАГ № 4: Получение динамических величин

Спектральная функция

$$A_{\sigma N}(\omega) = \frac{1}{Z_N} \sum_{nm} \left| {}_N \langle n | f_{\sigma}^{\dagger} | m \rangle_N \right|^2 \delta(\omega - (E_n^N - E_m^N)) \left(e^{-\beta E_m^N} + e^{-\beta E_n^N} \right)$$



$T = 0$: Переходы из основного состояния в возбужденные

$T > 0$: Дополнительные переходы между возбужденными состояниями

R. Bulla, A.C. Hewson, and Th. Pruschke
J. Phys.: Condens. Matter **10**, 8365 (1998)

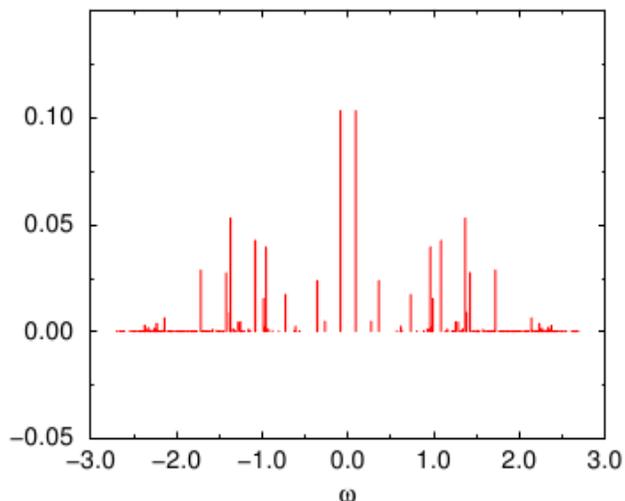
Численная ренормгруппа NRG

R. Bulla, A.C. Hewson, and Th. Pruschke
J. Phys.: Condens. Matter **10**, 8365 (1998)

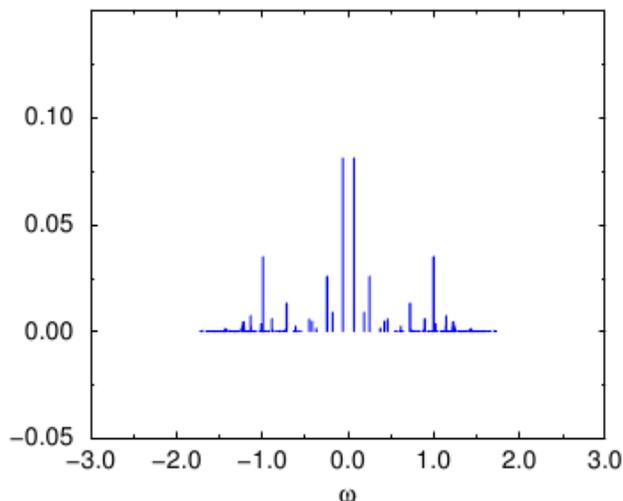
ШАГ № 4: Получение динамических величин

Плотность состояний

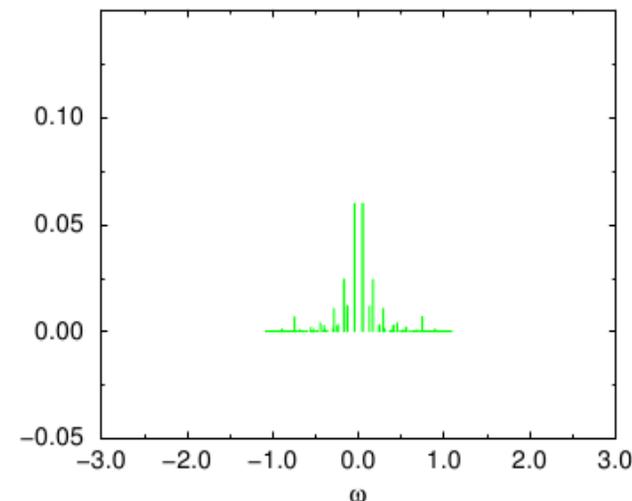
$N = 14$



$N = 16$



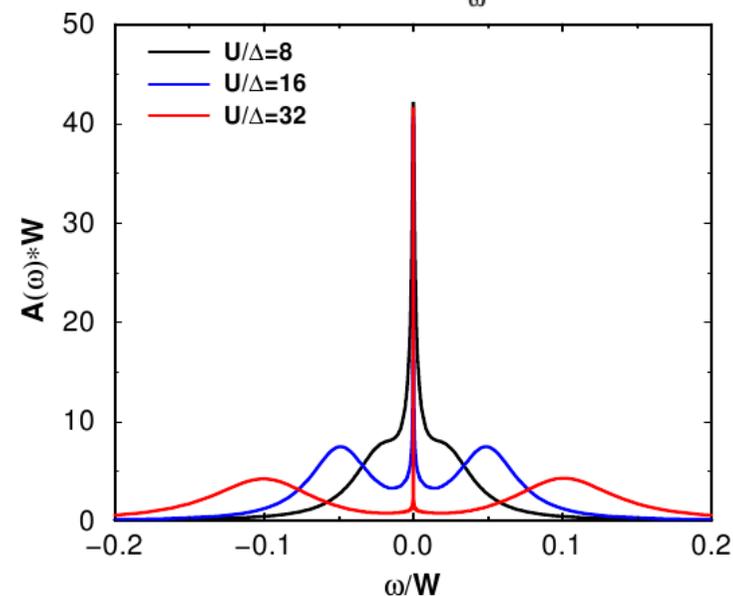
$N = 18$



“Уширение пиков”

Гауссиан на логарифмической шкале

$$\delta(\omega - \omega_n) \rightarrow \frac{e^{-b^2/4}}{b\omega_n\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(\ln \omega - \ln \omega_n)^2}{b^2}\right]$$



Численная ренормгруппа NRG

R. Bulla, A.C. Hewson, and Th. Pruschke
J. Phys.: Condens. Matter **10**, 8365 (1998)

ШАГ № 4: Получение динамических величин

Собственно энергетическая часть

Уравнения движения для ФГ

$$E \langle\langle A, B \rangle\rangle_E + \langle\langle \mathcal{L}A, B \rangle\rangle_E = \langle [A(t), B]_\eta \rangle \quad \langle\langle A, B \rangle\rangle_E = i \int_0^\infty e^{iEt} \langle [A(t), B]_\eta \rangle$$

$$A = c_{0\sigma} \text{ и } B = c_{0\sigma}^+$$

Получаем

$$(E - E_0)G_\sigma(E) - UF_\sigma(E) - \Delta(E)G_\sigma(E) = 1$$

$$F_\sigma(E) = \langle\langle c_{0\sigma} c_{0\bar{\sigma}}^+ c_{0\bar{\sigma}}, c_{0\sigma}^+ \rangle\rangle_E \quad \text{и} \quad \Delta(E) = \sum_k V_k^2 \frac{1}{E - \varepsilon_k}$$

Тогда

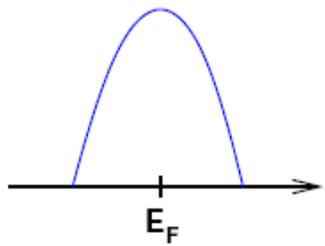
$$\Sigma_\sigma^U(E) = U \frac{F_\sigma(E)}{G_\sigma(E)}$$

Вычисляются через NRG алгоритм

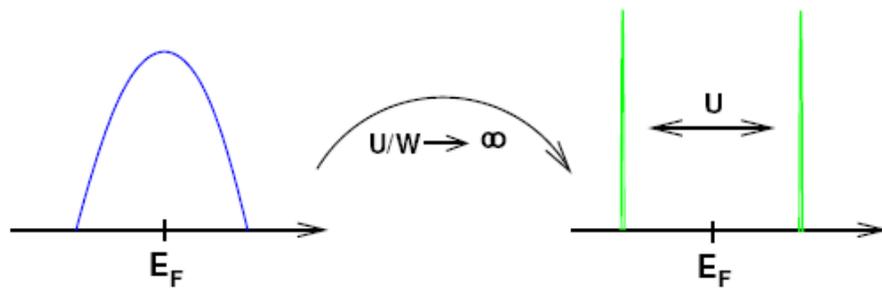
Вместо обращения функций: $\Sigma(i\omega_n) = \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^{-1}(i\omega_n) - \tilde{G}_{ii}^{-1}(i\omega_n)$

DMFT: переход металл-диэлектрик Мотта-Хаббарда

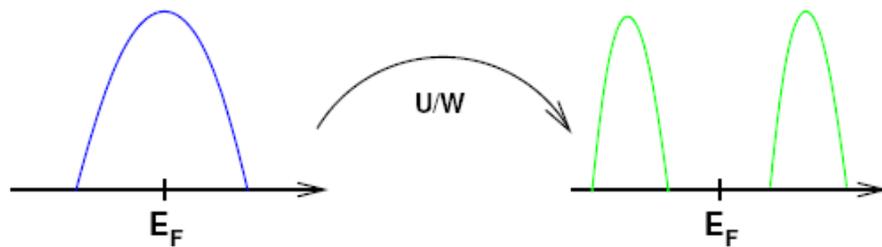
Ретроспектива зонных представлений



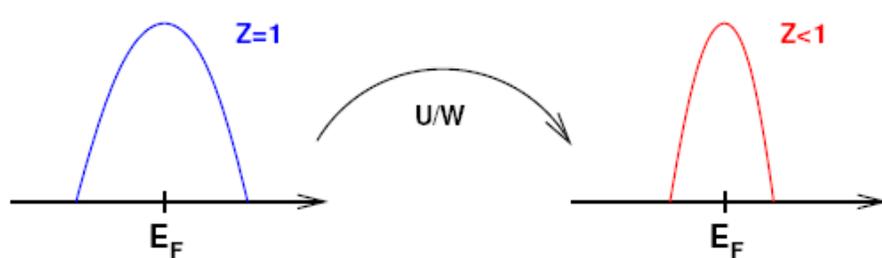
Bloch'28, LDA...



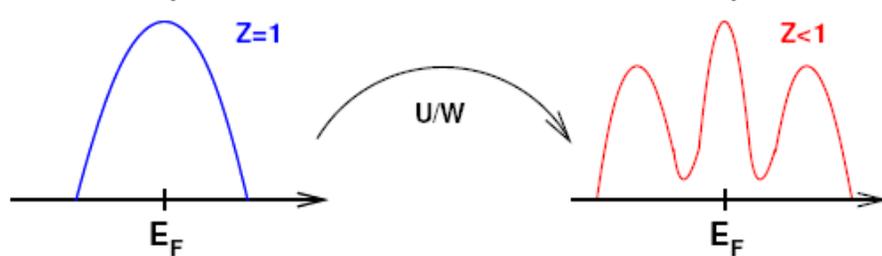
Mott'49-61



Hubbard'63/65



Gutzwiller; Brinkman, Rice'63-72



DMFT

Jarrell'92, Georges, Krauth'92

Самосогласованные уравнения DMFT

Стартовая DMFT СЭЧ $\Sigma(i\omega)$

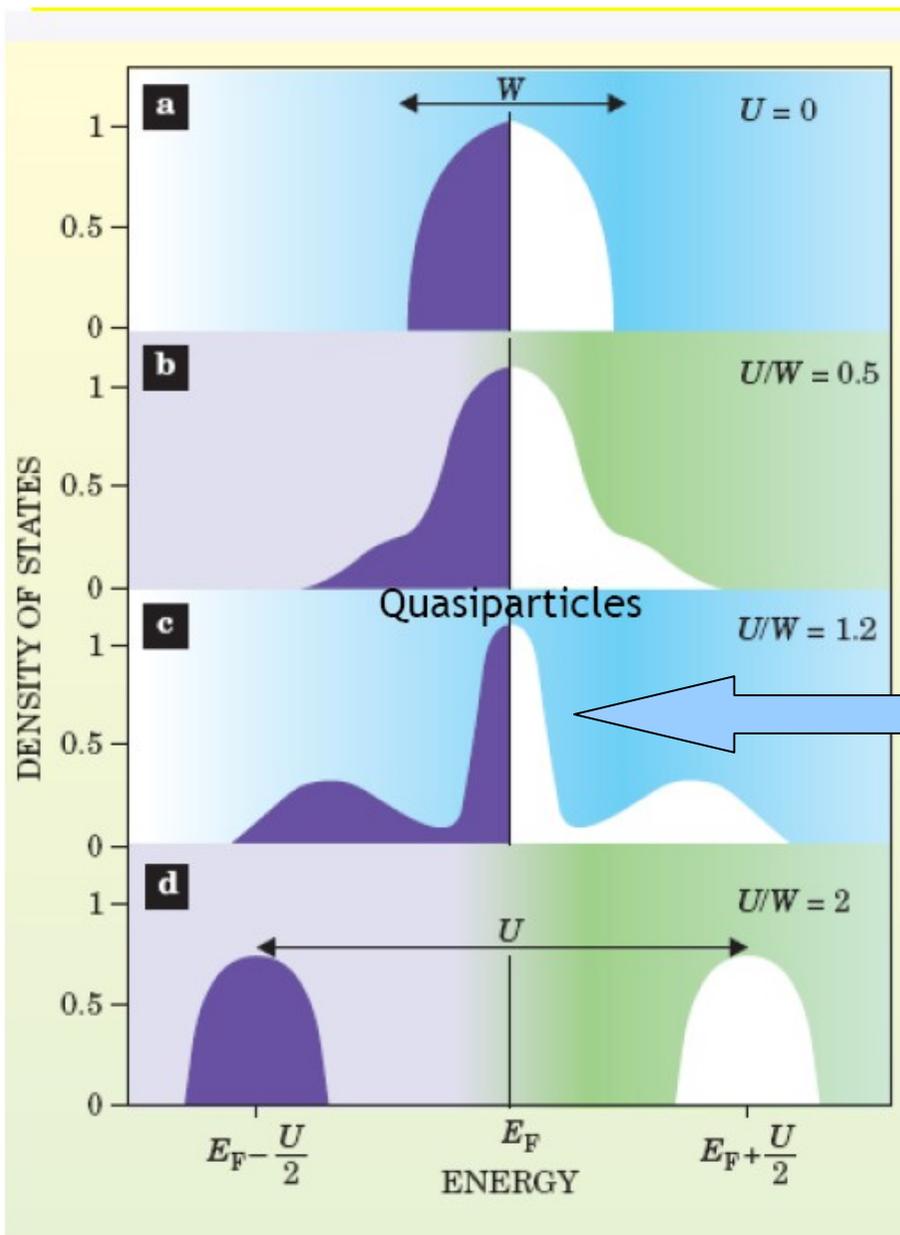
Задание и решение решеточной проблемы в DMFT $G_{ii}(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega)}$
 $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) = \Sigma(i\omega) + G_{ii}^{-1}(i\omega)$

Задание и решение эффективной примесной модели Андерсона

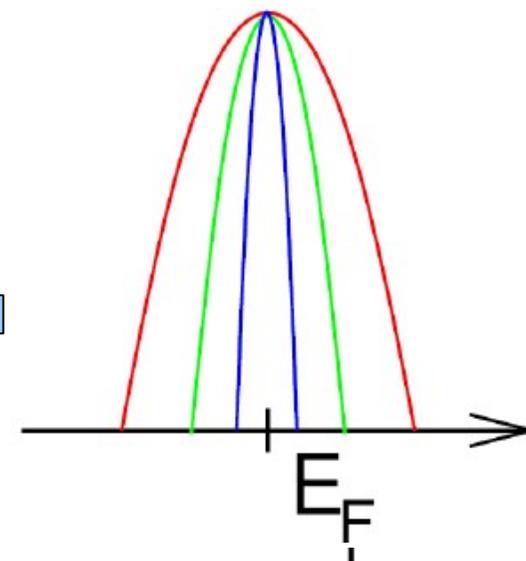
$$\Sigma(i\omega) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) - G_d^{-1}(i\omega)$$

Возврат до сходимости $G_d = G_{ii}$

DMFT: переход металл-диэлектрик Мотта-Хаббарда



Решение модели Хаббарда в DMFT
для половинного заполнения

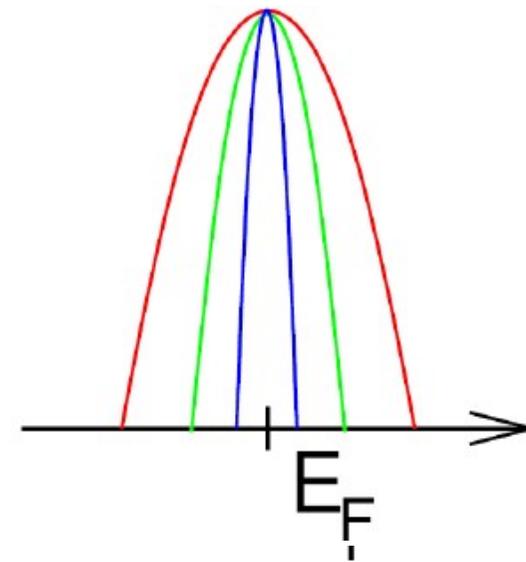
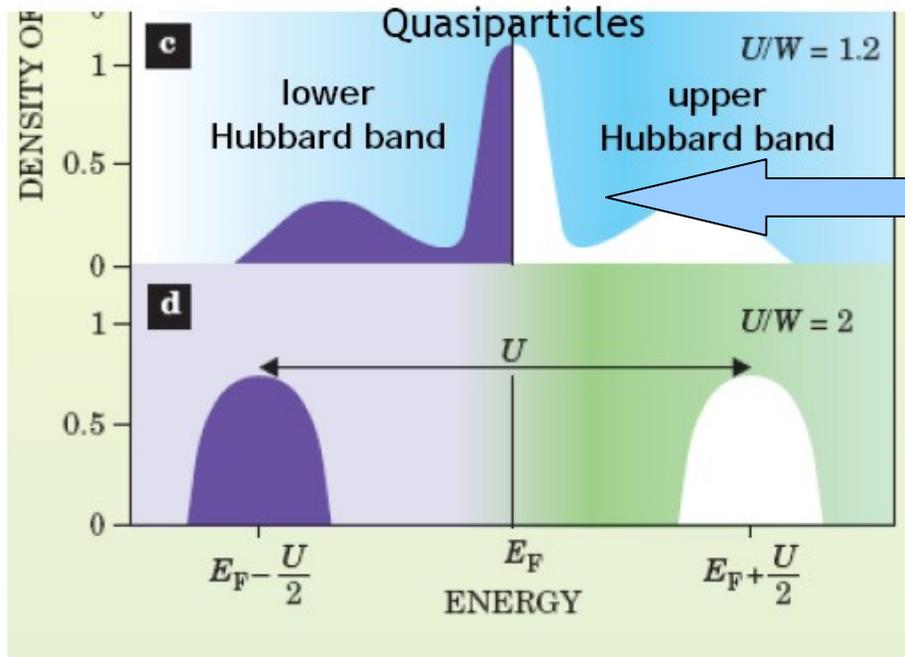
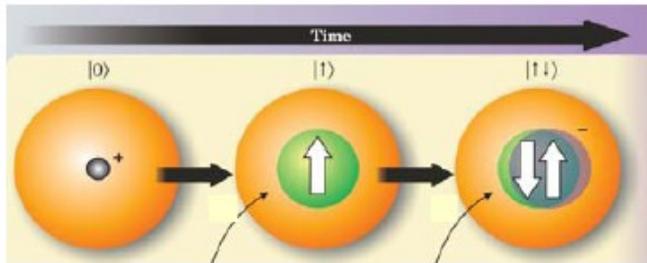


$$Z \rightarrow 0, \quad Z^{-1} = \frac{m^*}{m} \rightarrow \infty$$

Перенормировка квазичастичной массы

DMFT: переход металл-диэлектрик Мотта-Хаббарда

Решение модели Хаббарда в DMFT
для половинного заполнения

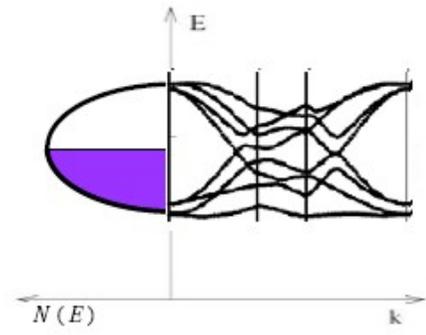
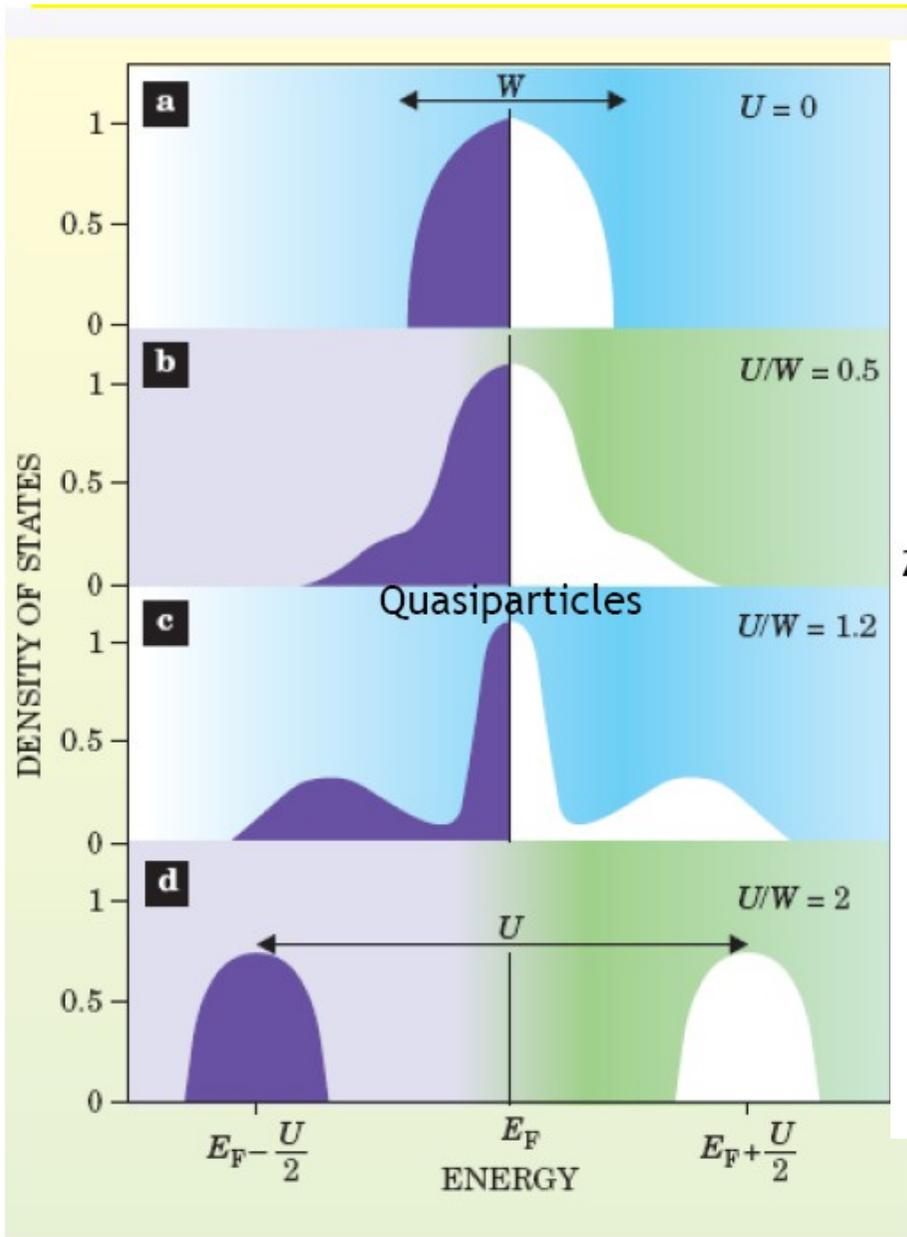


$$Z \rightarrow 0, \quad Z^{-1} = \frac{m^*}{m} \rightarrow \infty$$

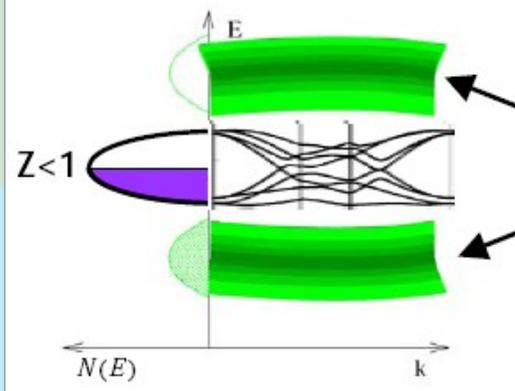
Перенормировка квазичастичной массы

Перенос спектрального веса -
типичное проявление корреляций

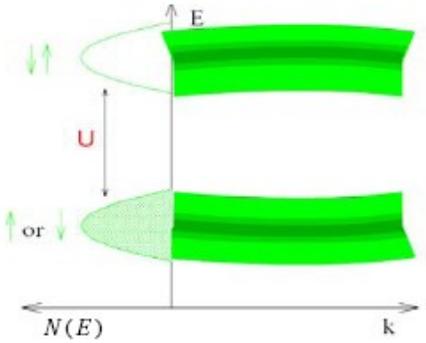
DMFT: переход металл-диэлектрик Мотта-Хаббарда



Когерентные (блоховские) состояния

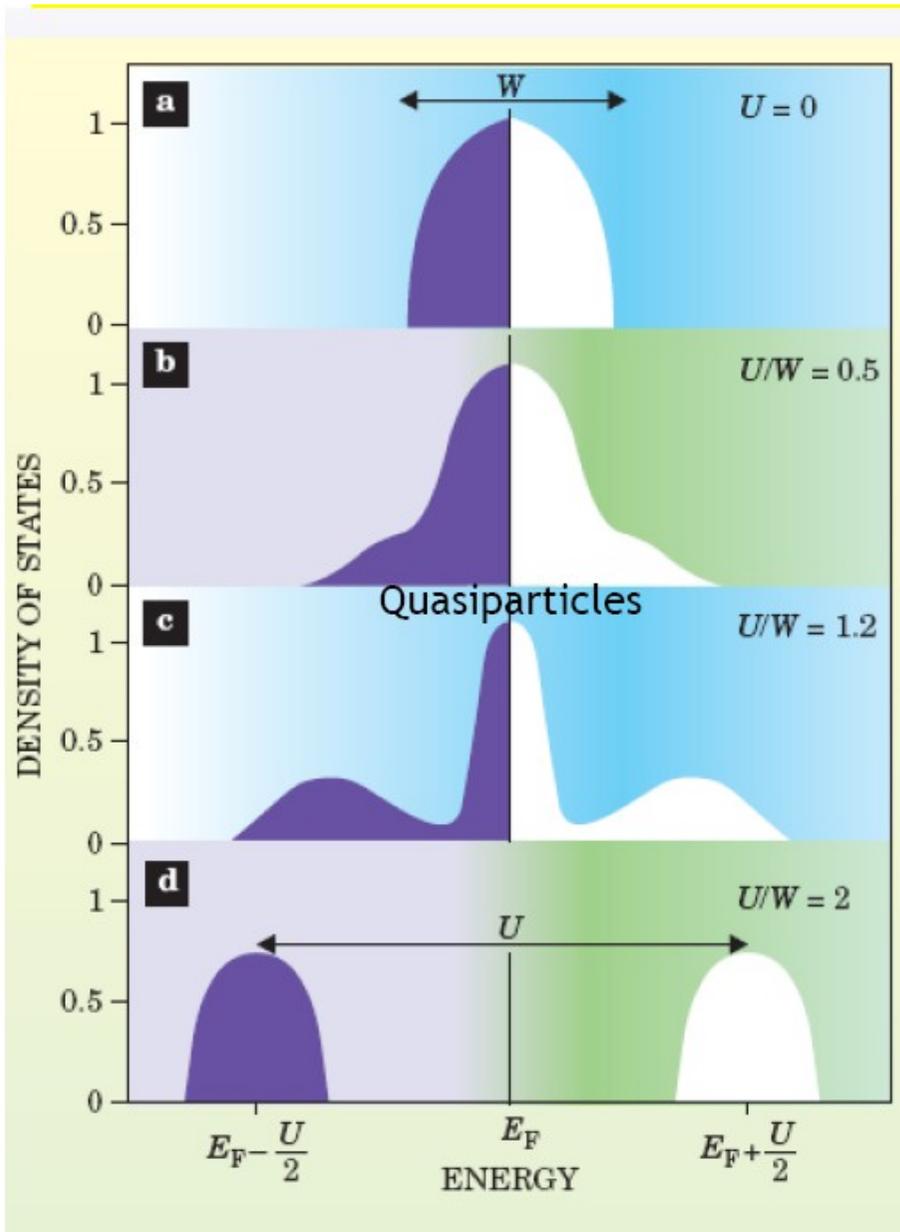


Некогерентные (локализованные) состояния одновременно с блоховскими

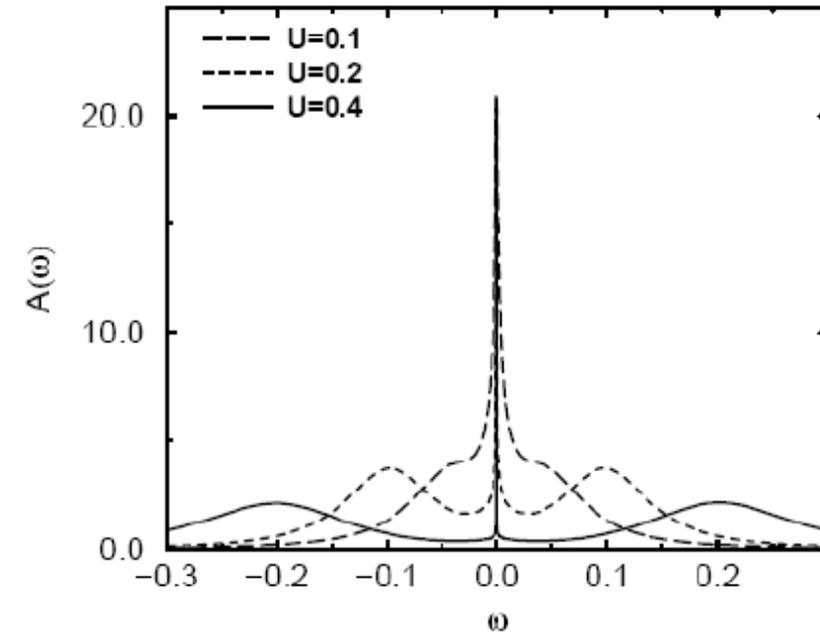


Только некогерентные состояния

DMFT: переход металл-диэлектрик Мотта-Хаббарда



Характерная трехпиковая структура

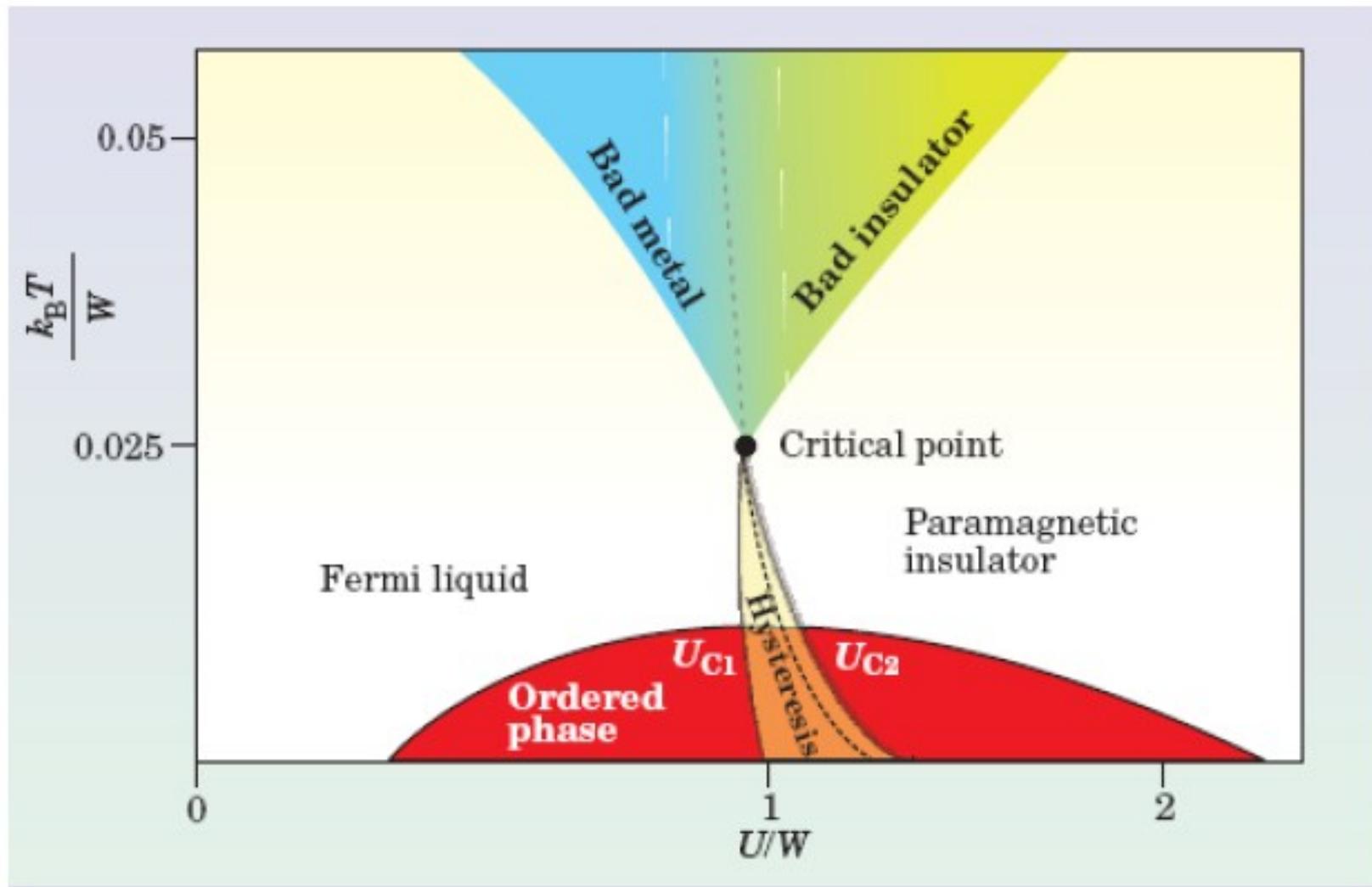


Однопримесная модель Андерсона
два типа электронов

Модель Хаббарда: Одни и те же электроны!!!

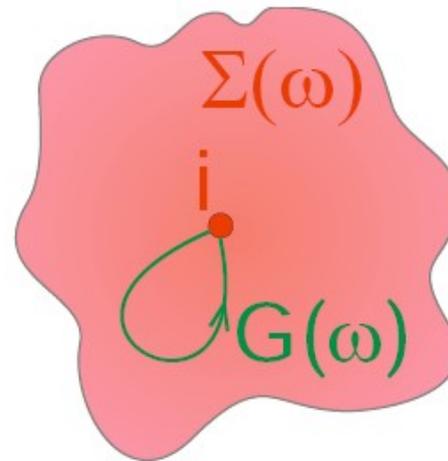
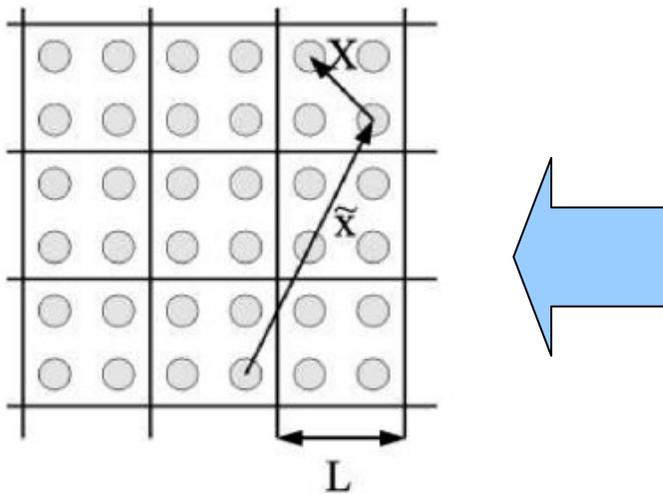
DMFT: переход металл-диэлектрик Мотта-Хаббарда

Решение модели Хаббарда в DMFT для половинного заполнения
типичная фазовая диаграмма

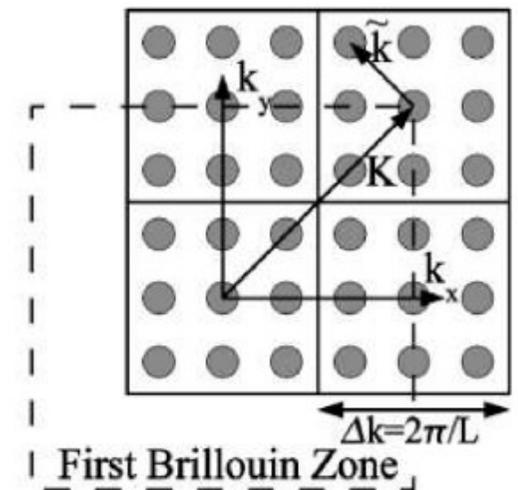


Выход за рамки DMFT: Кластерные подходы

Построение кластера
в прямом пространстве



Построение кластера
в обратном пространстве



Cluster DMFT (CDMFT)

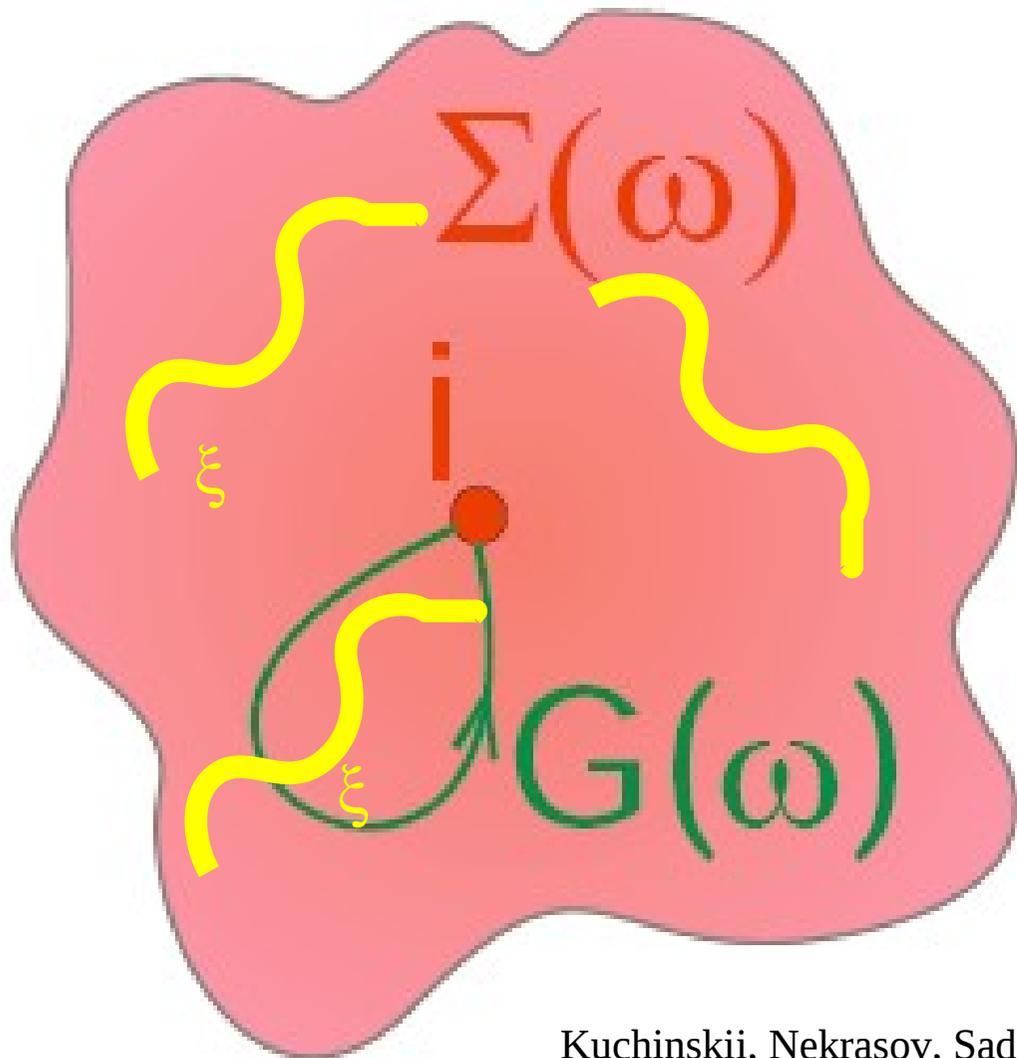
Kotliar et al. (2001)

Dynamical cluster approx. (DCA)

Jarrell et al. (2000)

Введение масштаба длины в DMFT: основная идея

Введение в однородный DMFT
термостат
характерного масштаба длины

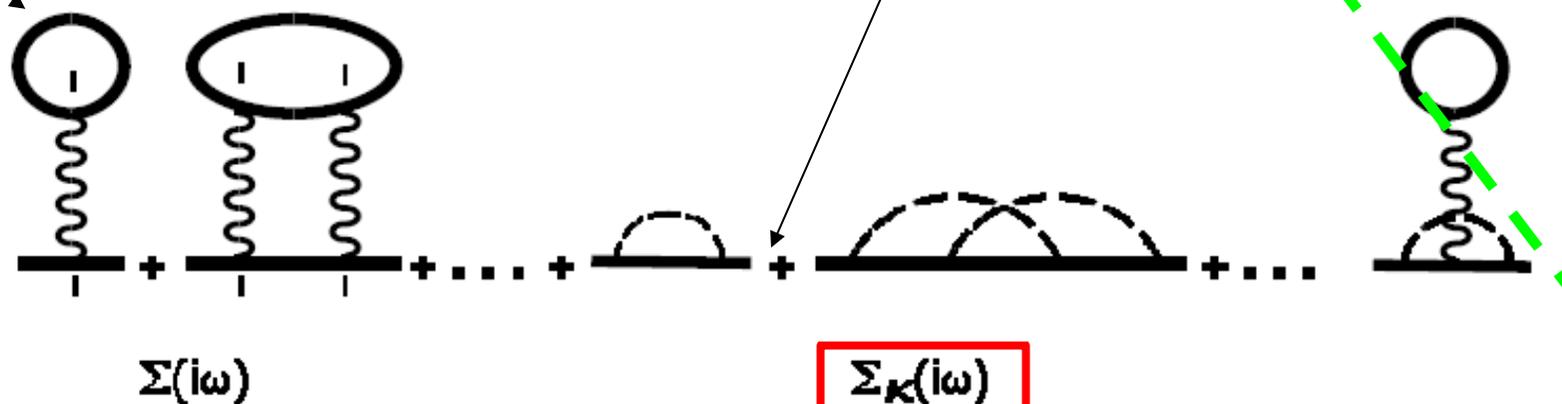


Kuchinskii, Nekrasov, Sadovskii, JETP Letters 82 (2005) 198

Sadovskii, Nekrasov, Kuchinskii, Pruschke, Anisimov, Phys. Rev. B 72, 155105 (2005)

Введение масштаба длины в DMFT: формулировка подхода DMFT+ Σ_k

$$G_{ii}(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)}$$



$\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ is momentum dependent part, vanishing for $d \rightarrow \infty$

1. Мы объединяем наиболее успешное локальное приближение с почти точно суммируемой k -зависящей СЭЧ, характеризующей флуктуации ближнего порядка (пространственно неоднородный фермионный термостат);
2. Мы можем описать возникновение псевдощели в присутствии кулоновского локального взаимодействия;
3. Нет двойного учета взаимодействия – два разных взаимодействия;
4. Данный подход не есть $1/d$ разложение.

Схема уравнений DMFT+ Σ_k подхода:

Стартовая DMFT СЭЧ $\Sigma(i\omega)$

Расчет нелокальной внешней СЭЧ

$$\Sigma_k(i\omega, \mu, \Sigma(i\omega))$$

Задание и решение решеточной проблемы в DMFT $G_{ii}(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega) - \Sigma_k(i\omega)}$

проблемы в DMFT $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) = \Sigma(i\omega) + G_{ii}^{-1}(i\omega)$

Задание и решение эффективной примесной модели Андерсона

$$\Sigma(i\omega) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) - G_d^{-1}(i\omega)$$

Возврат до сходимости $G_d = G_{ii}$