

Описание эффектов пространственной нелокальности сильных корреляций с помощью техники дуальных переменных

А.Н. Рубцов

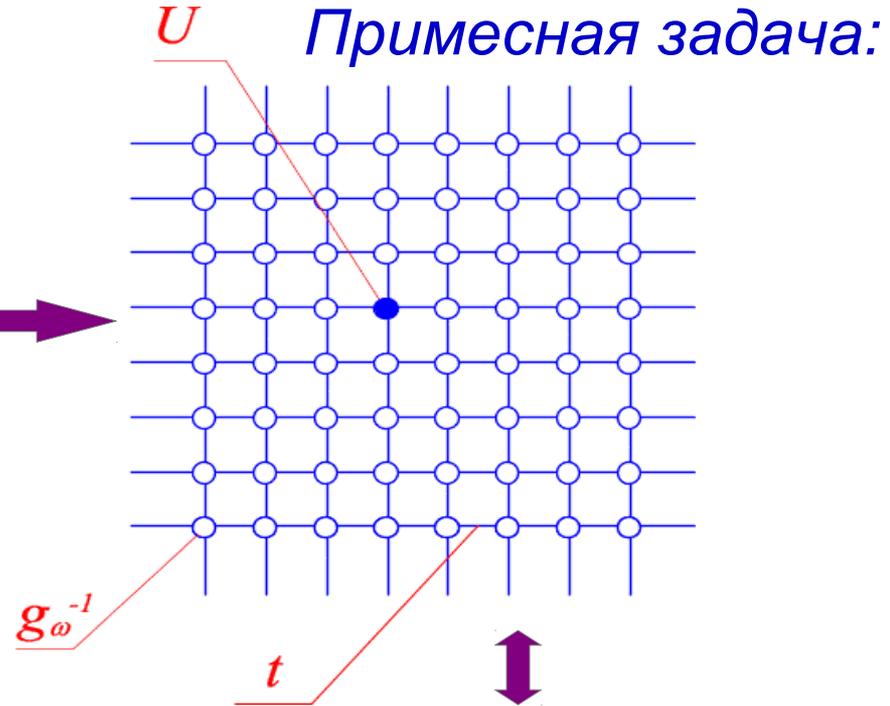
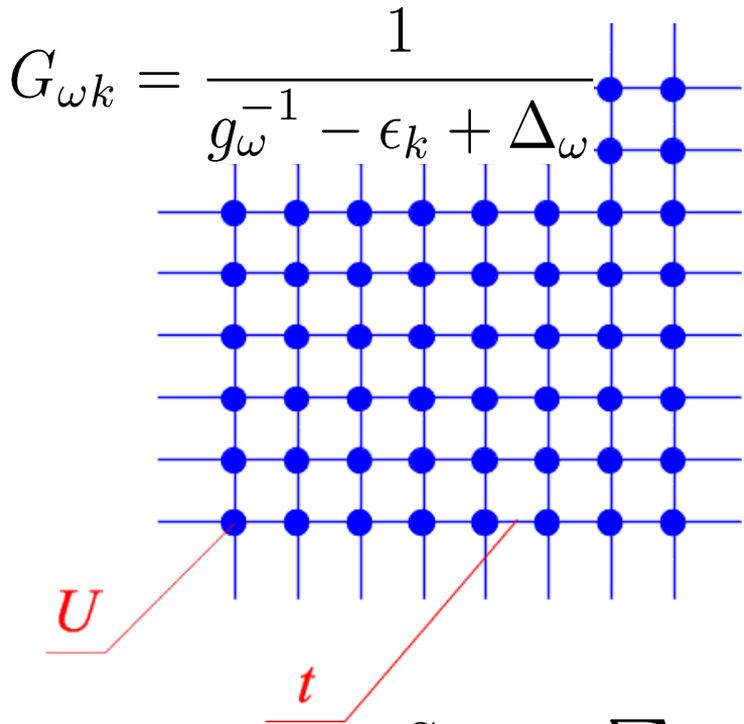
МГУ, физический факультет

(по работам в соавторстве с А.И. Лихтенштейном, М.И. Кацнельсоном)

*Методологически, доклад будет о теории возмущений,
стартующей со среднеполевых результатов*

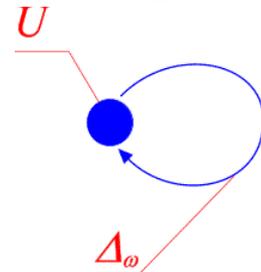
DMFT

W. Metzner, D. Vollhardt (1989) G. Kotliar, A. Georges (1993)



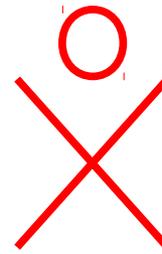
$$S_{imp} = \sum_{\omega, \sigma} (\Delta_{\omega} - \mu - i\omega) c_{\omega, \sigma}^* c_{\omega, \sigma} + U \int_0^{\beta} n_{\uparrow \tau} n_{\downarrow \tau} d\tau$$

$$g_{\omega} = \sum_k \frac{N^{-1}}{g_{\omega}^{-1} - \epsilon_k + \Delta_{\omega}}$$



EDMFT

P.Sun, G. Kotliar (2004)



$$S = \sum_r S_{at}[c_r^\dagger, c_r] + \sum_{r, R \neq 0, \omega, \sigma} \varepsilon_R c_{r\omega\sigma}^\dagger c_{r+R\omega\sigma} + \sum_{r, R \neq 0, \Omega} V_{R\Omega} \rho_{r\Omega}^* \rho_{r+R\Omega}$$

$$S_{at} = - \sum_{\omega\sigma} (i\omega + \mu) c_{\omega\sigma}^\dagger c_{\omega\sigma} + U \int_0^\beta c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} c_{\downarrow}^\dagger c_{\downarrow} d\tau$$

$$G_{r\tau} = - \langle c_{r\tau} c_{r=0, \tau=0}^\dagger \rangle$$

$$X_{r\tau} = - \langle \rho_{r\tau} \rho_{r=0, \tau=0}^* \rangle$$

Примесная задача

$$S_{imp} = S_{at} + \sum_{\omega} \Delta_{\omega} c_{\omega}^\dagger c_{\omega} + \sum_{\Omega} \Lambda_{\Omega} \rho_{\Omega}^* \rho_{\Omega}$$

Условие самосогласования

$$g_{\omega} = \sum_k \mathcal{G}_{\omega k},$$

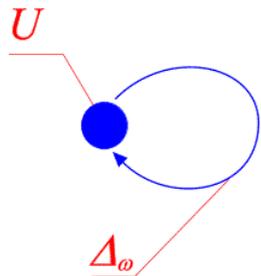
$$\chi_{\Omega} = \sum_k \mathcal{X}_{\Omega k}$$

Функции Грина EDMFT

$$\mathcal{G}_{\omega k} = \frac{1}{g_{\omega}^{-1} + \Delta_{\omega} - \epsilon_k}$$

$$\mathcal{X}_{\Omega k} = \frac{1}{\chi_{\Omega}^{-1} + \Lambda_{\Omega} - V_k}$$

Природа DMFT: локальная собственная энергия



$$S_{imp} = \sum_{\omega, \sigma} (\Delta_{\omega} - \mu - i\omega) c_{\omega, \sigma}^* c_{\omega, \sigma} + U \int_0^{\beta} n_{\uparrow \tau} n_{\downarrow \tau} d\tau$$

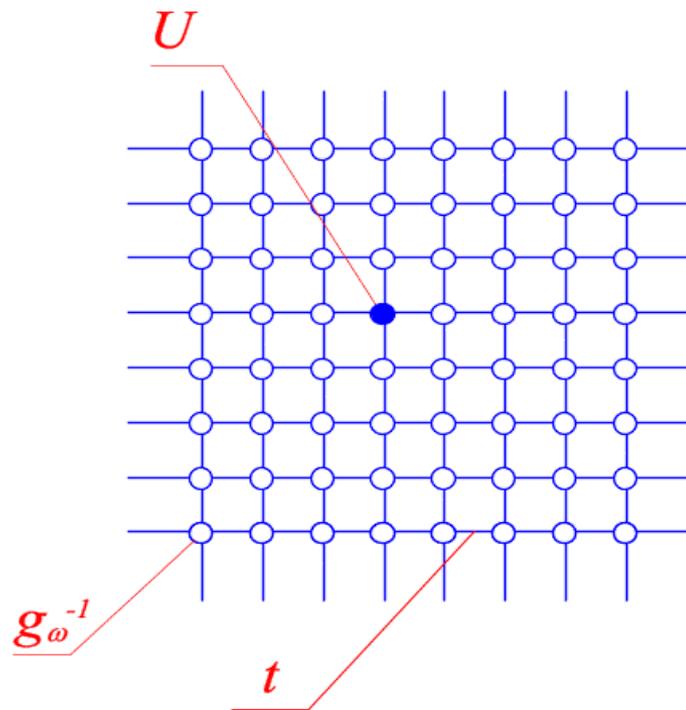
$$g_{\omega} = \sum_k G_{\omega k}$$

условие на Δ

$$\Sigma_{\omega} = i\omega - \Delta_{\omega} - g^{-1}$$

$$G_{\omega k} = \frac{1}{i\omega - \epsilon_k - \Sigma_{\omega}} = \frac{1}{g_{\omega}^{-1} + \Delta_{\omega} - \epsilon_k}$$

Природа DMFT – II: только локальные корреляции



Природа DMFT – III: пренебрежение высшими моментами примесной задачи

Since DMFT uses only the Green's function of the impurity problem, its reasonable to construct an expansion in higher vertex parts:
zeroth order of such series would coincide with DMFT

Описание нелокальности в DMFT-подходах

- Cluster methods
- Integral ladder-like equations
- Introduce classical fluctuations to describe AF modes
- **Dual variables**

Замена переменных

Стартуем со стат. суммы $Z = \int e^{-S[c, c^*]} \mathcal{D}c^* \mathcal{D}c$ с действием для модели Хаббарда

$$S[c, c^*] = - \sum_{i\omega, \sigma} (\mu + i\omega) c_{i, \omega, \sigma}^* c_{i, \omega, \sigma} + U \int_0^\beta n_{i, \uparrow, \tau} n_{i, \downarrow, \tau} d\tau + \sum_{\omega k \sigma} \epsilon_k c_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma}$$

Тождественно переписываем

$$S[c, c^*] = \sum_i S_{imp}[c_i, c_i^*] - \sum_{\omega k \sigma} (\Delta_\omega - \epsilon_k) c_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma} + U \int_0^\beta n_{i, \uparrow, \tau} n_{i, \downarrow, \tau} d\tau$$
$$S_{imp}[c_i, c_i^*] = \sum_{\omega, \sigma} (\Delta_\omega - \mu - i\omega) c_{i, \omega, \sigma}^* c_{i, \omega, \sigma} + U \int_0^\beta n_{i, \uparrow, \tau} n_{i, \downarrow, \tau} d\tau$$

Раскладываем Гауссову часть по Хаббарду-Стратоновичу

$$e^{A^2 c_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma}} = B^{-2} \int e^{-AB(c_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma} + f_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma}) - B^2 f_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma}} df_{\omega k \sigma}^* df_{\omega k \sigma}$$

Получается действие

$$S[c, c^*, f, f^*] = \sum_i S_{imp}[c_i, c_i^*] +$$

$$\sum_{\omega k \sigma} [g_\omega^{-1} (f_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma} + c_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma}) + g_\omega^{-2} (\Delta_\omega - \epsilon_k)^{-1} f_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma}]$$

допускающее интегрирование по c, c^* на каждом из узлов по отдельности

Ряд для $V(c^*, c)$

... Интегрирование дает

$$S[f, f^*] = \sum_{\omega k \sigma} g_{\omega}^{-2} ((\Delta_{\omega} - \epsilon_k)^{-1} + g_{\omega}) f_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma} + \sum_i V_i$$

$$e^{-V[f_j, f_j^*] - g_{\omega}^{-1} f_{j\omega}^* f_{j\omega}} = \int e^{-S_{imp}[c_j, c_j^*] + g_{\omega}^{-1} (f_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma} + c_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma})} \mathcal{D}c_j^* \mathcal{D}c_j$$

$$V[f_i, f_i^*] = -\gamma_{1234}^{(4)} f_1^* f_2 f_3^* f_4 + \gamma_{123456}^{(6)} f_1^* f_2 f_3^* f_4 f_5^* f_6 + \dots$$

Средние в новых и старых переменных связаны точными соотношениями, например

$$G_{\omega, k} = g_{\omega}^{-2} (\Delta_{\omega} - \epsilon_k)^{-2} G_{\omega, k}^{dual} + (\Delta_{\omega} - \epsilon_k)^{-1}$$

Полученные выражения решают задачу о разложении по вершинам примесной задачи.

Пренебрежение V воспроизводит DMFT.

Смысл преобразования

“Красивое” гамильтоново действие
с мгновенным (но большим!) U



Негамильтоново действие с
частотно-зависящим,
содержащим все порядки V
(но пренебрежение им приводит
к осмысленному результату!)



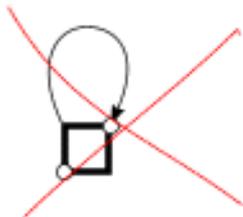
(одна морока)



(можно носить в кармане, ест мало)

Простейшие диаграммы для собственной энергии

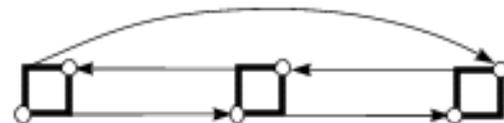
a



c



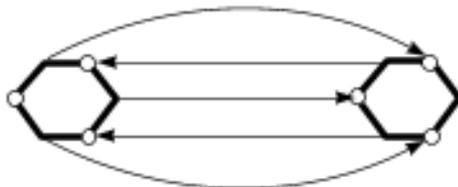
e



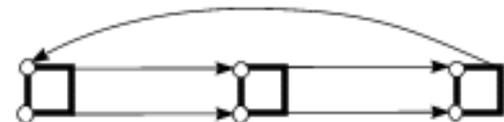
b



d



f



Малости в предельных случаях

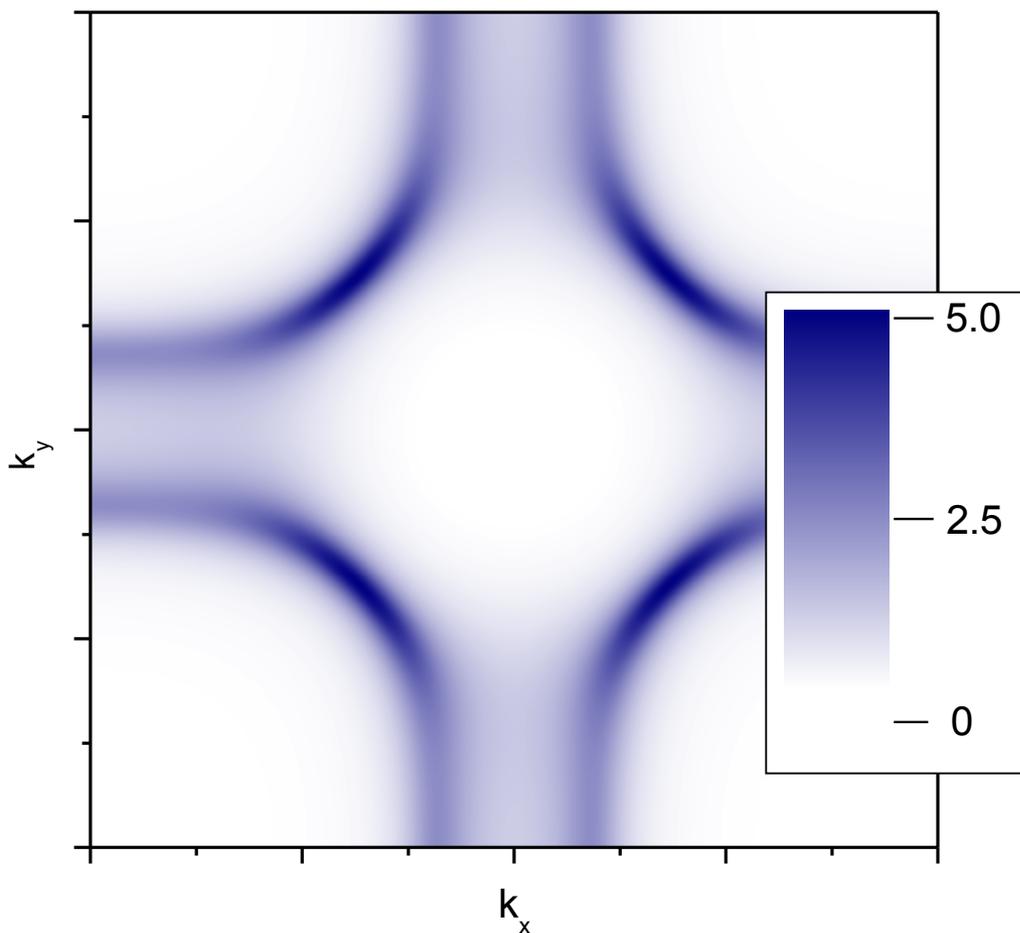
Как и DMFT, теория хорошо работает вблизи атомного и слабосвязанного предела, и интерполирует между ними.

В предельных случаях, есть явный малый параметр:

В пределе слабой связи, в диаграммах малы вершины

Вблизи атомного предела, малы линии

Спектральная плотность на уровне Ферми в допированной t - t' модели Хаббарда



$U=4.0$, $t=0.25$, $t'=-0.075$

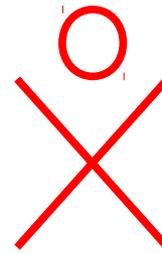
$\beta=80$

допирование 14%

учтена диаграмма (b)

EDMFT

P.Sun, G. Kotliar (2004)



$$S = \sum_r S_{at}[c_r^\dagger, c_r] + \sum_{r, R \neq 0, \omega, \sigma} \varepsilon_R c_{r\omega\sigma}^\dagger c_{r+R\omega\sigma} + \sum_{r, R \neq 0, \Omega} V_{R\Omega} \rho_{r\Omega}^* \rho_{r+R\Omega}$$

$$S_{at} = - \sum_{\omega\sigma} (i\omega + \mu) c_{\omega\sigma}^\dagger c_{\omega\sigma} + U \int_0^\beta c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} c_{\downarrow}^\dagger c_{\downarrow} d\tau$$

$$G_{r\tau} = - \langle c_{r\tau} c_{r=0, \tau=0}^\dagger \rangle$$

$$X_{r\tau} = - \langle \rho_{r\tau} \rho_{r=0, \tau=0}^* \rangle$$

Примесная задача

$$S_{imp} = S_{at} + \sum_{\omega} \Delta_{\omega} c_{\omega}^\dagger c_{\omega} + \sum_{\Omega} \Lambda_{\Omega} \rho_{\Omega}^* \rho_{\Omega}$$

Условие самосогласования

$$g_{\omega} = \sum_k \mathcal{G}_{\omega k},$$

$$\chi_{\Omega} = \sum_k \mathcal{X}_{\Omega k}$$

Функции Грина EDMFT

$$\mathcal{G}_{\omega k} = \frac{1}{g_{\omega}^{-1} + \Delta_{\omega} - \epsilon_k}$$

$$\mathcal{X}_{\Omega k} = \frac{1}{\chi_{\Omega}^{-1} + \Lambda_{\Omega} - V_k}$$

Сложности EDMFT

Локальный поляризационный оператор

$$\chi_{\Omega} = \sum_k \chi_{\Omega k} \quad \chi_{\Omega k} = \frac{1}{\chi_{\Omega}^{-1} + \Lambda_{\Omega} - V_k}$$

Очевидно, не годится для коллективных мод.
Например, для плазмонов должно быть (RPA)

$$X_{\Omega K} = \frac{1}{(X_{\Omega K}^0)^{-1} - V_K}$$

сохранение заряда:

$$X_{\Omega K}^0 \equiv \langle nn \rangle_{\Omega K} = \frac{K^2}{\Omega^2} \langle jj \rangle_{\Omega K}$$

Сложности EDMFT - II:

суперобмен в модели Хаббарда

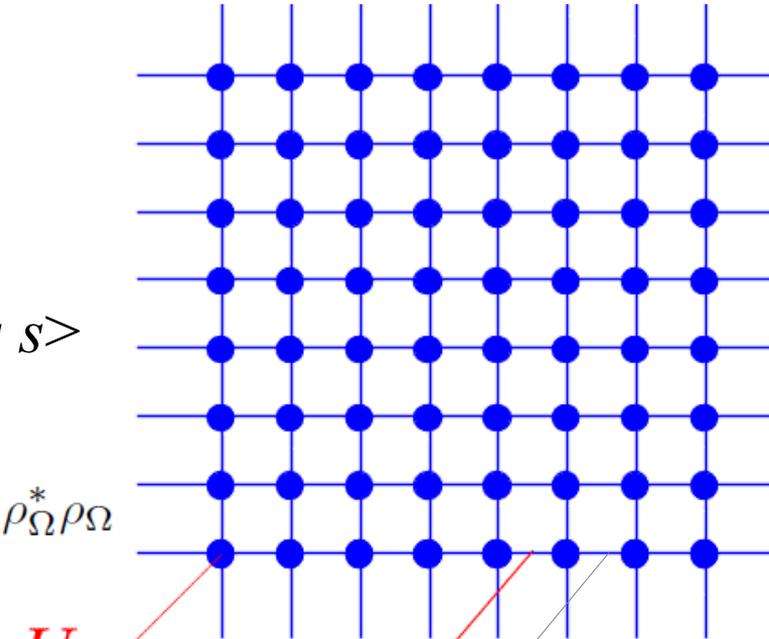
Дисперсия магнонов

$$\chi_{\Omega} = \sum_k \frac{1}{\chi_{\Omega}^{-1} + \Lambda_{\Omega} - J_k}$$

$$\chi = \langle s s \rangle$$

$$S_{imp} = S_{at} + \sum_{\omega} \Delta_{\omega} c_{\omega}^{\dagger} c_{\omega} + \sum_{\Omega} \Lambda_{\Omega} \rho_{\Omega}^* \rho_{\Omega}$$

0



U

t

$$J_{ij} = \frac{t^2}{U}$$

$V=0 \xleftrightarrow{EDMFT} \Lambda=0$

В EDMFT, суперобмен надо вводить ad hoc

От бозонных полей к бозонным модам

Цель: теория, включающая коллективные моды:

$$\chi_{\Omega} = \sum_k \chi_{\Omega k} \quad X_{\Omega K} = \frac{1}{\chi_{\Omega}^{-1} + \Lambda_{\Omega} - V_K - \Pi'_{\Omega K}}$$

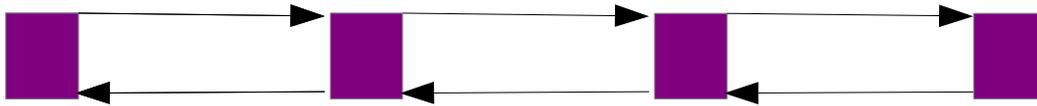
$$S_{imp} = S_{at} + \sum_{\omega} \Delta_{\omega} c_{\omega}^{\dagger} c_{\omega} + \sum_{\Omega} \Lambda_{\Omega} \rho_{\Omega}^* \rho_{\Omega}$$

Λ without V

$V=0 \longleftrightarrow^{EDMFT} \Lambda=0$

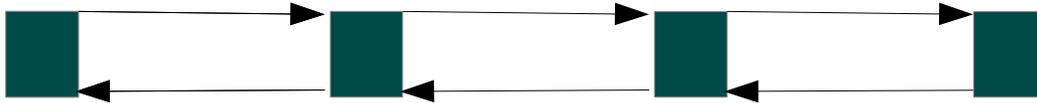
Стандартная диаграмматика

Формирование коллективных мод: лестницы



для систем с сильными корреляциями:
лестницы в дуальных фермионах

Взаимодействие коллективных мод: (дуальный) паркет



“Паркетные” – практически синоним “нерешаемые”

Замена переменных

$$S = \sum_r S_{imp}[c_r^\dagger, c_r] + \sum_{\omega, k, \sigma} (\varepsilon_k - \Delta_{\omega\sigma}) c_{\omega k \sigma}^\dagger c_{\omega k \sigma} + \sum_{\Omega, k, j, j'} (V_{\Omega k}^{jj'} - \Lambda_{\Omega}^{jj'}) \rho_{\Omega k j}^* \rho_{\Omega k j'}$$

$$\int D[c^\dagger, c] e^{c^\dagger E c} = \int D[c^\dagger, c] \det(\alpha_f^{-1} E \alpha_f^{-1}) \int D[f^\dagger, f] e^{\{-f^\dagger \alpha_f E^{-1} \alpha_f f + f^\dagger \alpha_f c + c^\dagger \alpha_f f\}}$$

$$\int D[\rho^*, \rho] e^{\rho^* W \rho} = \int D[\rho^*, \rho] \det(\alpha_b W^{-1} \alpha_b) \int D[\eta^*, \eta] e^{\{-\eta^* \alpha_b W^{-1} \alpha_b \eta + \eta^* \alpha_b \rho + \rho^* \alpha_b \eta\}},$$



$$S = -\sum_{\omega k} \tilde{\mathcal{G}}_{\omega k}^{-1} f_{\omega k}^\dagger f_{\omega k} - \sum_{\Omega k} \tilde{\mathcal{X}}_{\Omega k}^{-1} \eta_{\Omega k}^* \eta_{\Omega k} + \sum_i \tilde{U}[\eta_i, f_i, f_i^\dagger]$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\omega k}^{-1} = g_{\omega}^{-1} (\varepsilon_k - \Delta_{\omega})^{-1} g_{\omega}^{-1} - g_{\omega}^{-1}$$

$$\tilde{\mathcal{X}}_{\Omega k}^{-1} = \chi_{\Omega}^{-1} (V_k - \Lambda_{\Omega})^{-1} \chi_{\Omega}^{-1} - \chi_{\Omega}^{-1}$$

$$\tilde{U}[\eta, f, f^\dagger] = \sum_{\omega \Omega} (\lambda_{\omega \Omega} \eta_{\Omega}^* f_{\omega+\Omega}^\dagger f_{\omega} + \lambda_{\omega \Omega}^* \eta_{\Omega} f_{\omega}^\dagger f_{\omega+\Omega}) + \frac{1}{4} \sum_{\omega \omega' \Omega} \gamma_{\omega \omega' \Omega} f_{\omega+\Omega}^\dagger f_{\omega'-\Omega}^\dagger f_{\omega} f_{\omega'} + \dots$$

$$\gamma_{\omega \omega' \Omega} = \frac{\langle c_{\omega+\Omega} c_{\omega'-\Omega} c_{\omega}^\dagger c_{\omega'}^\dagger \rangle_{imp} - g_{\omega} g_{\omega'} (\delta_{\Omega+\omega-\omega'} - \delta_{\Omega})}{g_{\omega+\Omega} g_{\omega'-\Omega} g_{\omega} g_{\omega'}}$$

$$\lambda_{\omega \Omega} = \frac{-\langle c_{\omega+\Omega} c_{\omega}^\dagger \rho_{\Omega} \rangle_{imp} - \langle \rho \rangle_{imp} g_{\omega} \delta_{\Omega}}{g_{\omega} g_{\omega+\Omega} \chi_{\Omega}}$$

Corrections to EDMFT:

self-energy and polarization-operator for initial and dual ensembles

DEFINITIONS

Real ensemble

$$\Sigma' = G^{-1} - \mathcal{G}^{-1}; \quad \Pi' = X^{-1} - \mathcal{X}^{-1}$$

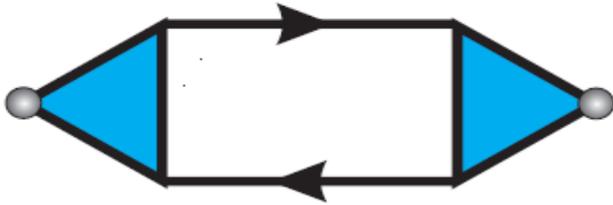
Dual ensemble

$$\tilde{\Sigma} = \tilde{G}^{-1} - \tilde{\mathcal{G}}^{-1}; \quad \tilde{\Pi} = \tilde{X}^{-1} - \tilde{\mathcal{X}}^{-1}$$

EXACT RELATIONS

$$(\Sigma'_{\omega k})^{-1} = \tilde{\Sigma}_{\omega k}^{-1} + g_{\omega}; \quad (\Pi'_{\Omega k})^{-1} = \tilde{\Pi}_{\Omega k}^{-1} + \chi_{\Omega}$$

Single-loop approximation



EDMFT+GW, and all the more EDMFT
are not charge conserving!!!

$$X_{K=0} \neq 0,$$

totally wrong description of plasmons etc.

$$\tilde{\Pi}_{\Omega K} = \sum_{\omega k} \lambda_{\Omega\omega} \tilde{G}_{\omega k} \tilde{G}_{\Omega+\omega, K+k} \lambda_{\Omega\omega}^*$$

$$\lambda_{\omega\Omega} = \frac{-\langle c_{\omega+\Omega} c_{\omega}^{\dagger} \rho_{\Omega} \rangle_{imp} - \langle \rho \rangle_{imp} g_{\omega} \delta_{\Omega}}{g_{\omega} g_{\omega+\Omega} \chi_{\Omega}}$$

Similar to EDMFT+GW

$$X_{\Omega K} = \frac{1}{\left(\chi_{\Omega} + \sum_{\omega k} \tilde{G}_{\omega k} \tilde{G}_{\Omega+\omega, K+k} \right)^{-1} + \Lambda_{\Omega} - V_K}$$

$$\lambda_{\Omega\omega} = \chi_{\Omega}^{-1} \left(1 - \sum_{\omega'} \gamma_{\omega, \omega', \Omega} g_{\omega'} g_{\omega' - \Omega} s_{\sigma\sigma'} \right)$$

$$\gamma = 0$$

RPA+DMFT

$$X_{\Omega K} = \frac{1}{\left(\sum_{\omega k} g_{\omega k} g_{\Omega+\omega, K+k} \right)^{-1} + \Lambda_{\Omega} - V_K}$$

Консервативная теория

Консервативность связана с калибровочной инвариантностью

$$c_{r\tau} \rightarrow c_{r\tau} e^{i\Lambda_{r\tau}}$$

Законы сохранения в DMFT не нарушаются, если рассчитывать

восприимчивость вариационно, $\delta\epsilon_{\omega k} \rightarrow \delta\Delta_{\omega}, \delta g_{\omega}$

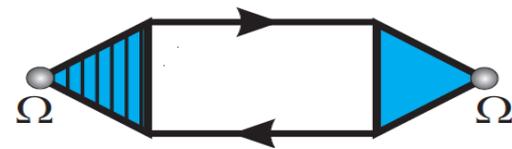
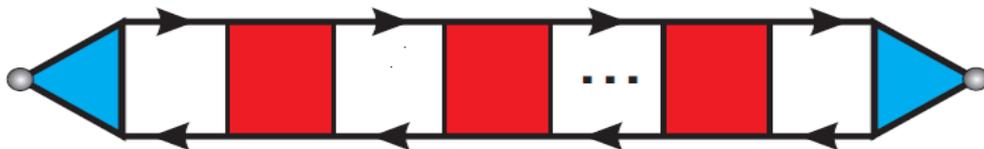
удерживая
$$g_{\omega} = \sum_k G_{\omega k}$$

Получается (индексы ω, ω' опущены!):

$$\frac{1}{X_{\Omega K}} - \frac{1}{x_{\Omega}} = \frac{1}{X_{\Omega K}^0} - \frac{1}{x_{\Omega}^0}$$

$$\begin{aligned} X_{\Omega K}^{0,\omega} &= -\sum_k G_{\omega k} G_{\omega+\Omega k+K} \\ X_{\Omega K}^{0,\omega} &= -g_{\omega} g_{\omega+\Omega} \end{aligned}$$

В дуальных переменных это соответствует суммированию лестницы



Локальный момент

случай большой вершинной части

Одиночный атом



$$g_{at} = \frac{-i\omega}{\omega^2 + (U/2)^2}$$

$$\gamma = \beta U^2 \delta_{\Omega 0}$$

Медленная динамика локального момента не проявляется в функции Грина, но определяет вершинную часть

Предел сильной связи

$$\gamma = \gamma_{\Omega}$$

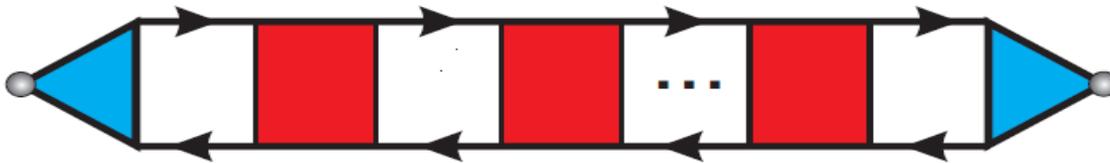
$$\chi_{\Omega} = \chi_{\Omega}^{(0)} \gamma_{\Omega} \chi_{\Omega}^{(0)}$$

$$\lambda_{\Omega} = (\chi_{\Omega}^{(0)})^{-1}$$

$$\chi_{\Omega}^{(0)} \equiv - \sum_{\omega\sigma} g_{\omega} g_{\Omega+\omega}$$

Суммирование лестницы

предел сильной связи



$$\chi_{\Omega} = \chi_{\Omega}^{(0)} \gamma_{\Omega} \chi_{\Omega}^{(0)}$$

$$\lambda_{\Omega} = (\chi_{\Omega}^{(0)})^{-1}$$

$$\Pi'_{\Omega K} = \left[\left(\lambda \frac{\tilde{X}_{\Omega K}^{(0)}}{1 - \gamma_{\Omega} \tilde{X}_{\Omega K}^{(0)}} \lambda \right)^{-1} + \chi_{\Omega} \right]^{-1}$$

$$\Pi'_{\Omega K} = \lambda_{\Omega} \tilde{X}_{\Omega K}^0 \lambda_{\Omega}$$

γ_{Ω} выпадает!

RPA дало бы формулу с J_k
в знаменателе!

$$\frac{1}{\chi_{\Omega}^{-1} + \Lambda_{\Omega} - J_k}$$

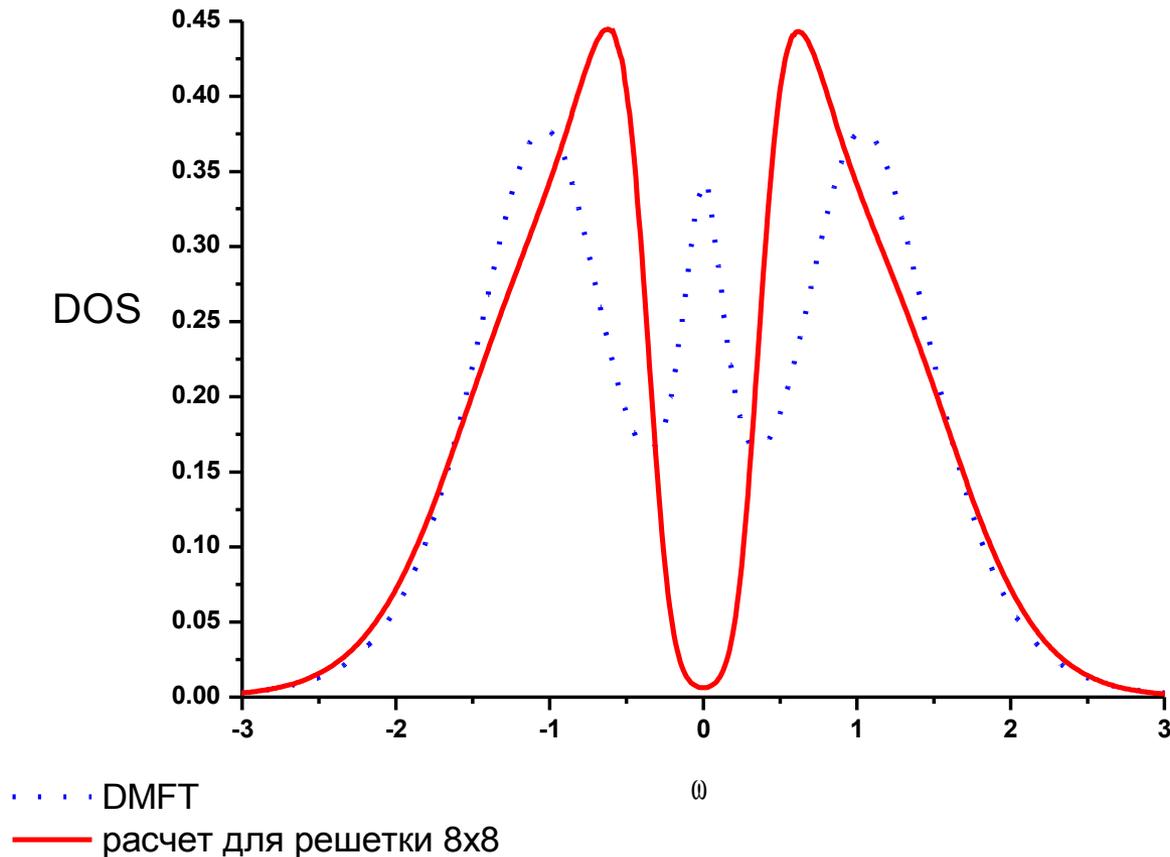
$$g = g_{at}$$

$$\tilde{X}_{\Omega=0} = \frac{t^2}{4U^3}$$

$$\chi_{\Omega=0}^{(0)} = \frac{1}{2U}$$

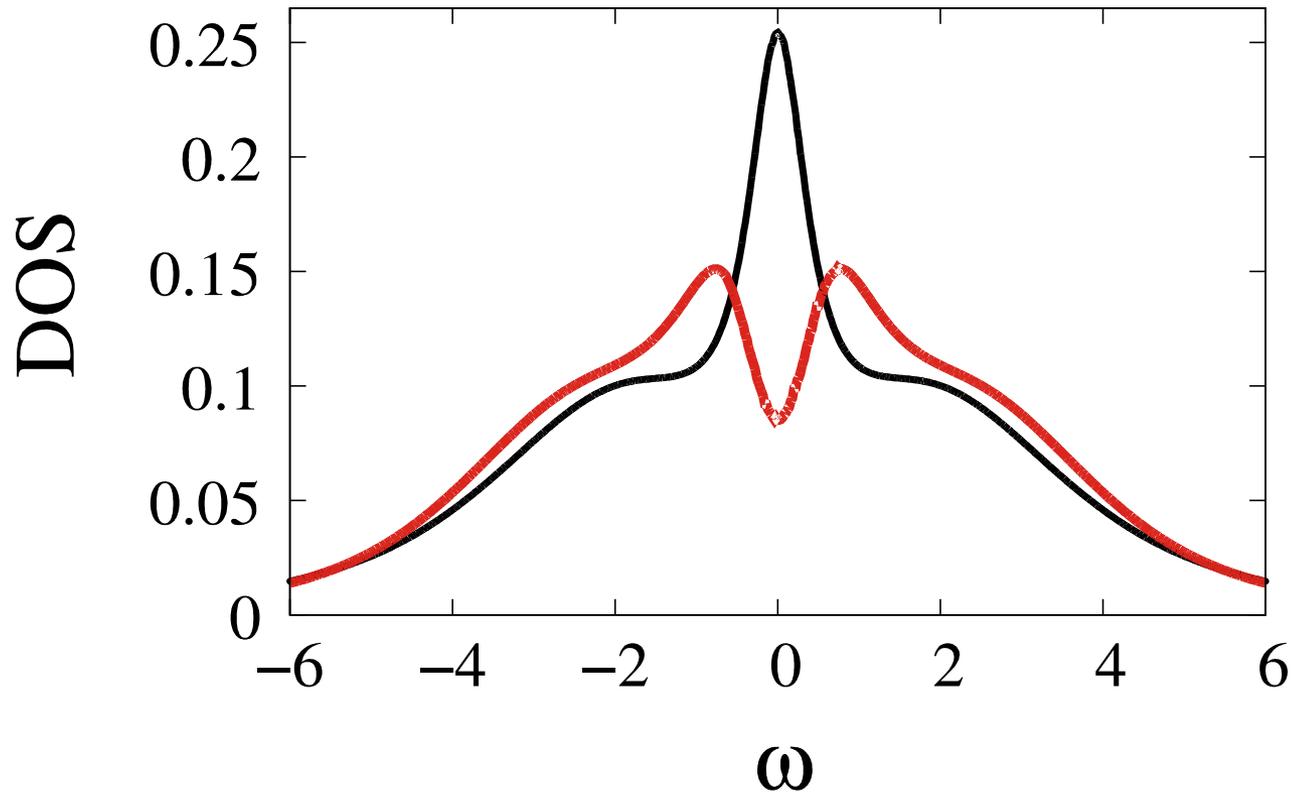
$$J_{ij} = \frac{t^2}{U} \text{ for nearest neighbors}$$

Problem of non-locality



Remind that the condition $\text{DOS}(0)=\text{const}$ results from the locality of Σ

Antiferromagnetic pseudogap



DMFT (black line), and dual-fermion AF ladder (red line) DOS at $U/t=4$, $\beta t=5$. The dual-fermion DOS exhibits an antiferromagnetic pseudogap.

Modeling the Fermi arc in underdoped cuprates

M. R. Norman,¹ A. Kanigel,² M. Randeria,³ U. Chatterjee,² and J. C. Campuzano^{2,1}

arXiv:0708.1713v1

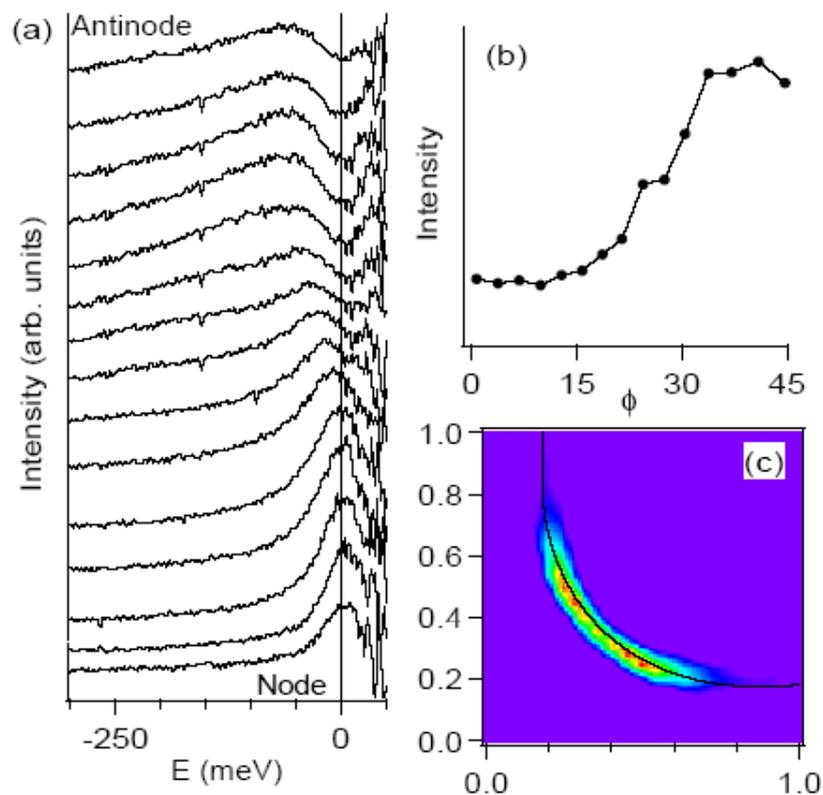
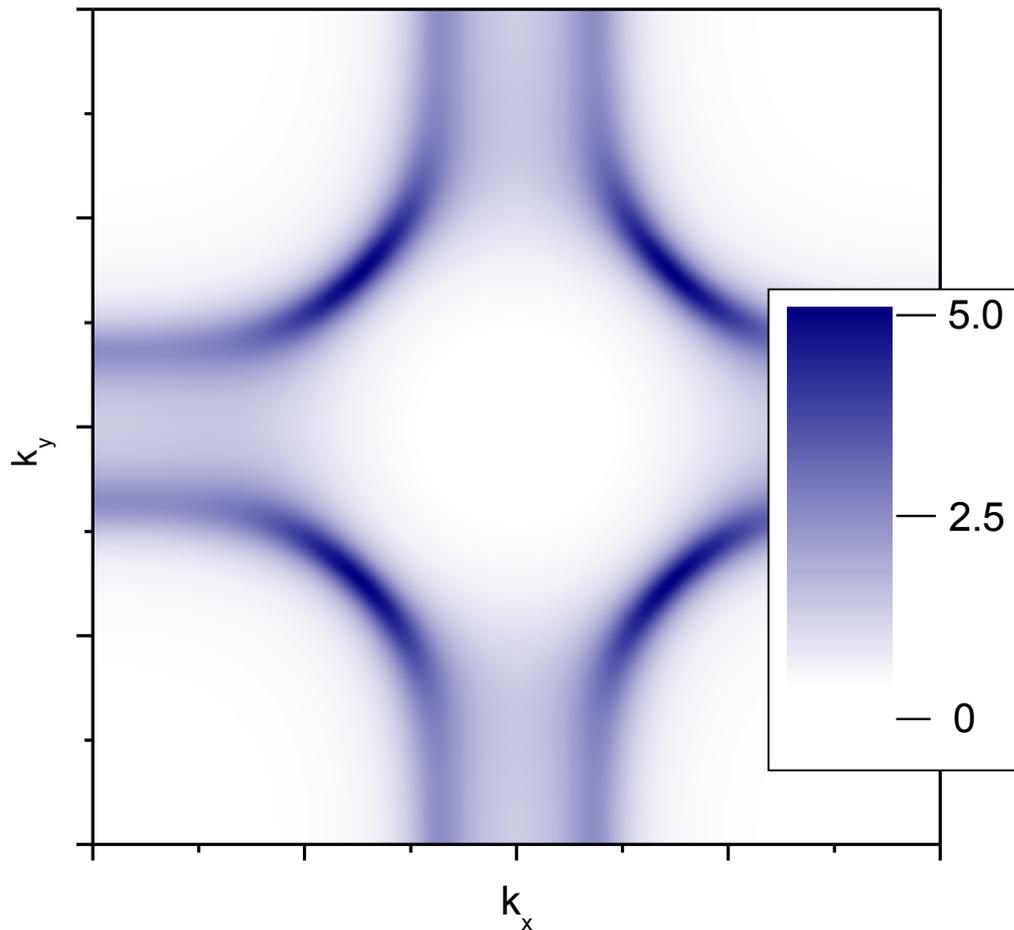


FIG. 2: (Color online) (a) Experimental energy distribution curves (EDCs) for optimal doped Bi₂Sr₂CaCu₂O₈ (Bi2212) around the underlying Fermi surface in the pseudogap phase (T=140K) divided by a resolution broadened Fermi function.

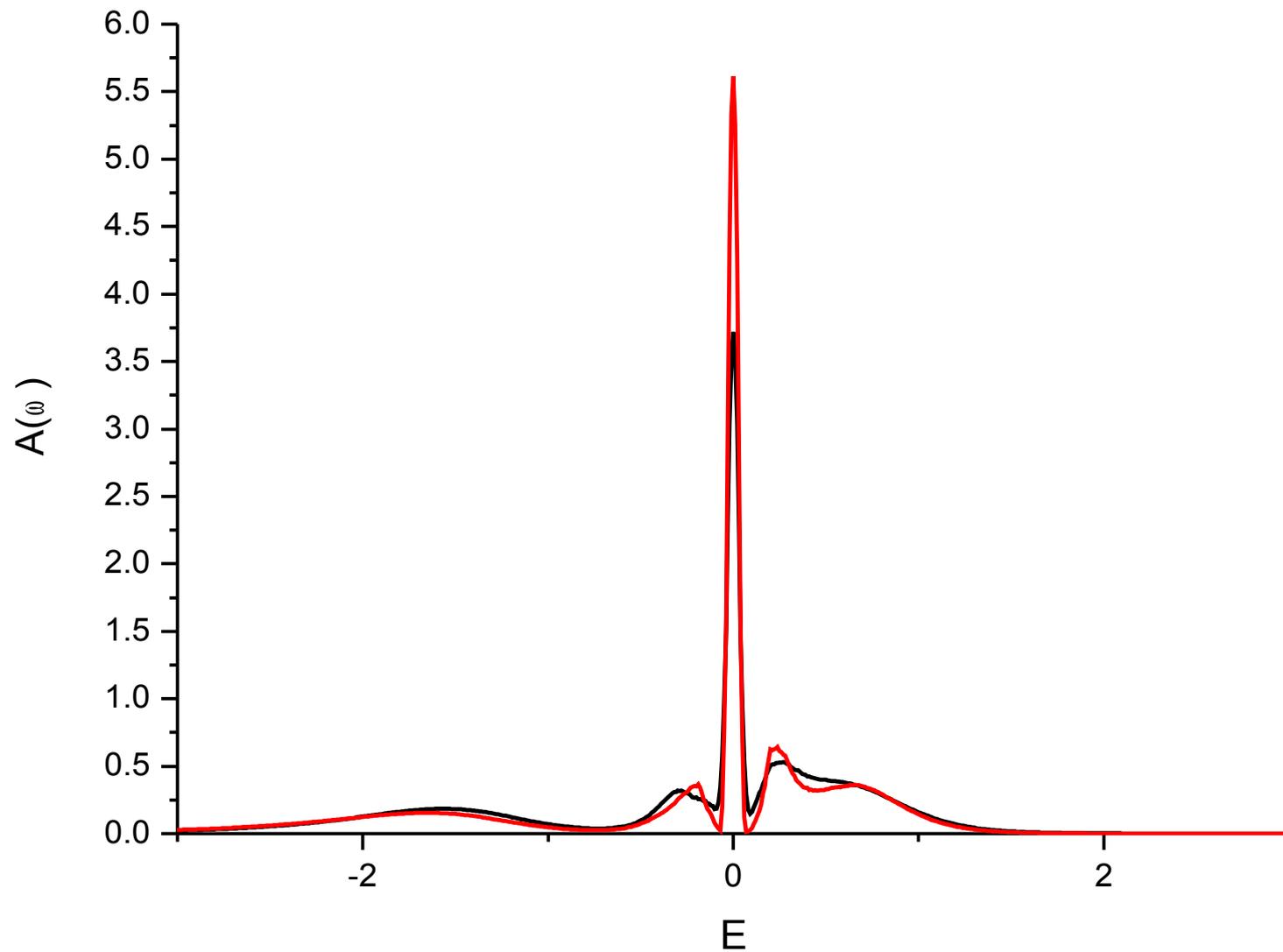
Spectral density at Fermi level for doped t - t' Hubbard model



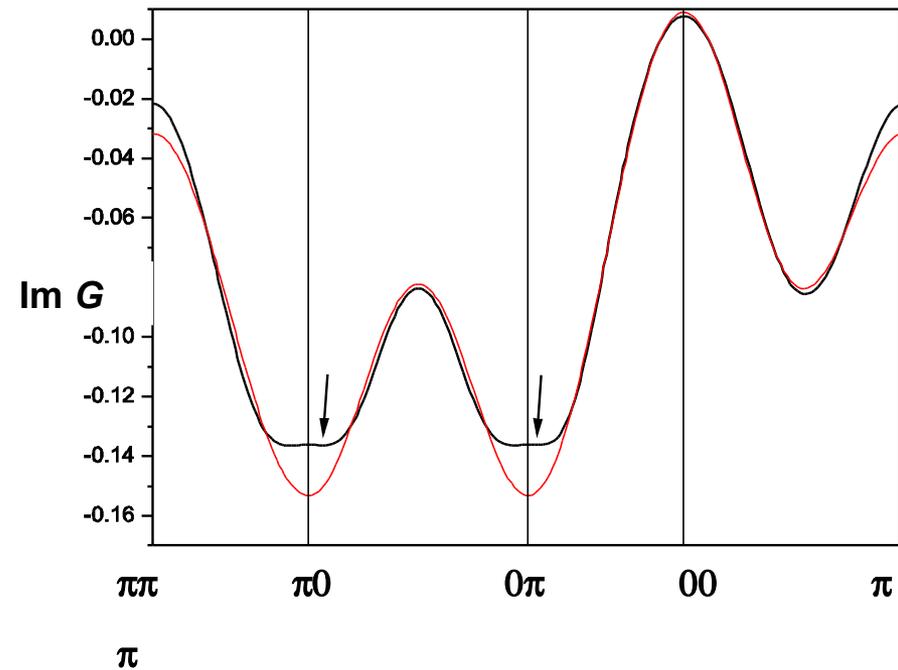
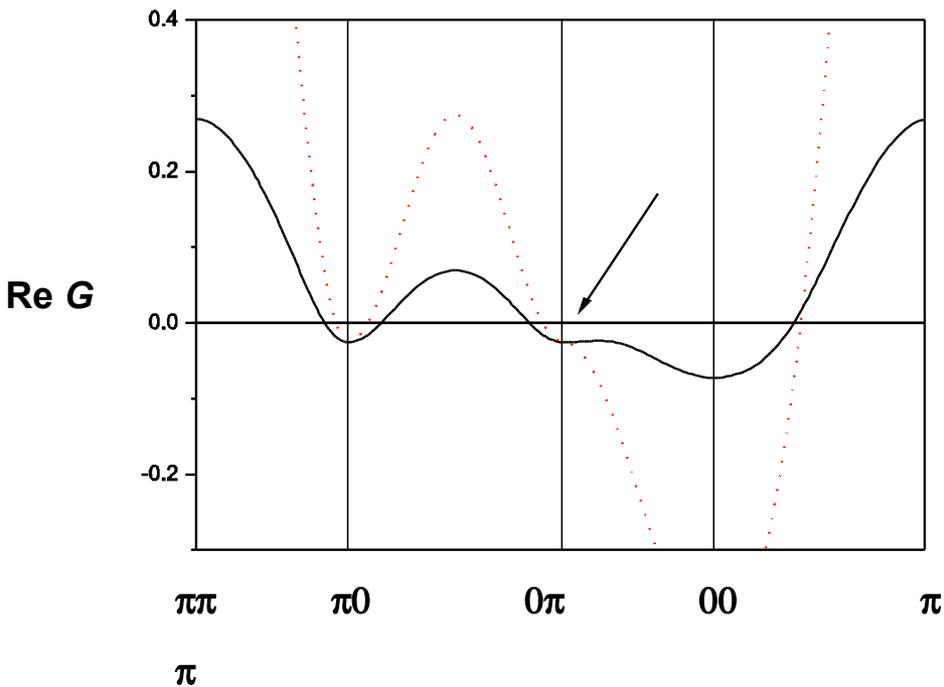
$U=4.0$, $t=0.25$, $t'=-0.075$
 $\beta=80$
14% doping

Calculations with
diagram (b)

***t-t'* Hubbard model:
reconstructed spectral function at nodal and antinodal points**



Renormalization of the spectral function near Van Hove singularities



$U=4.0$, $t=0.25$, $t'=-0.075$
 $\beta=80$

1.4% density