

Коуровка - 35

Коллективные моды в сильнокоррелированных системах

Алексей Рубцов

*физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова;
Russian Quantum Center, Сколково*



Диэлектрики с запрещенной зоной свыше 3.5 эВ



Бриллиант, C, 5.5 eV



Корунд, Al_2O_3 , 9.5 eV



Кварц, SiO_2 , 8.5 eV

Диэлектрики с запрещенной зоной свыше 3.5 эВ (продолжение)



Оксид хрома, Cr_2O_3 , 4 eV



Оксид никеля, NiO , 4 eV

d-d переходы



Цвета оксидов хрома и никеля обусловлены переходами между (многоэлектронными) термами *d*-оболочек Cr^{3+} и Ni^{2+} .



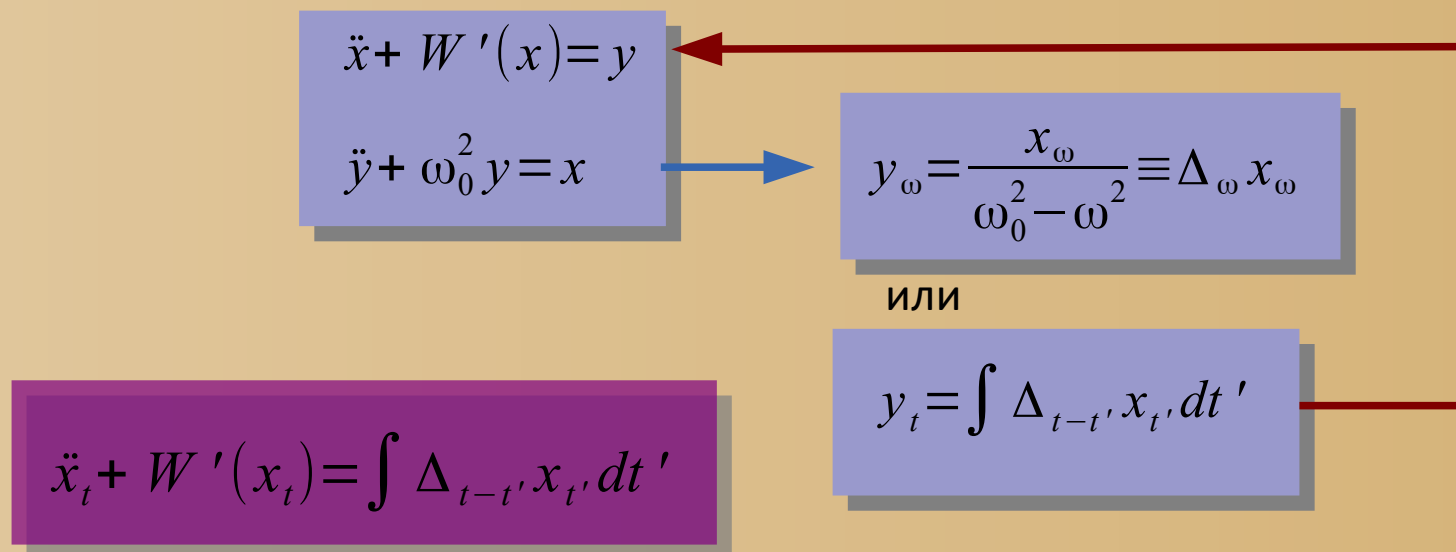
Энергии *d-d* переходов зависят от свойств окружения иона.

Электроны переходят с коррелированного узла в окружение и обратно.

Рубин: $\text{Al}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$, $x \sim 10^{-3}$

Элементарный пример интегрирования по гауссовым переменным

Классический аналог коррелированной примеси в некоррелированном окружении:
нелинейный осциллятор, связанный с линейными.

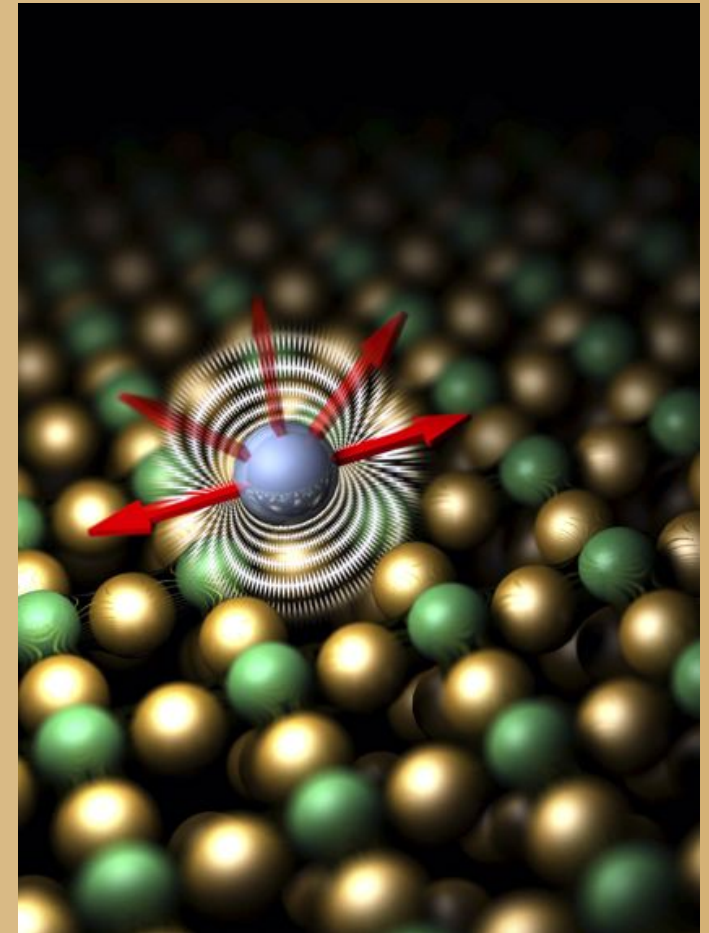


- +: удастся исключить все некоррелированные переменные
- : задача оказывается негамильтоновой

Действие примесной задачи

$$S = S_{at} + \int \Delta_{t-t'} c_t^\dagger c_{t'} dt dt'$$

Решение задачи с запаздыванием
требует использования
численных методов



DMFT: простейший вывод

$$S_{lattice} = \sum_j S_{at} + \sum_{\omega k} \epsilon_k c_{\omega k}^\dagger c_{\omega k}$$

$$S_{imp} = S_{at} + \Delta_\omega c_\omega^\dagger c_\omega$$

$$S_{lattice} = \sum_j S_{imp} + \sum_{\omega k} (\epsilon_k - \Delta_\omega) c_{\omega k}^\dagger c_{\omega k}$$

$$g_\omega$$

$$\tilde{S}_{lattice} = \sum_j \tilde{S}_{imp} + \sum_{\omega k} (\epsilon_k - \Delta_\omega) c_{\omega k}^\dagger c_{\omega k}$$

$$\tilde{S}_{imp} = -g_\omega^{-1} c_\omega^\dagger c_\omega$$

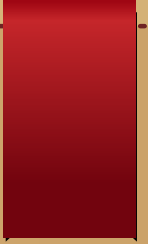
$$\mathcal{G}_{\omega k} = \frac{1}{g_\omega^{-1} + \Delta_\omega - \epsilon_k}$$

$$\Delta_\omega : g_\omega = \mathcal{G}_{\omega, r=0}$$

DMFT: другие интерпретации

- точная теория в пределе бесконечной размерности (или координационного числа)
- интерполяционная теория (между режимом слабой связи и атомным пределом)
- результат суммирования всех локальных на узле диаграмм
- (продолжение следует)

Малый параметр DMFT?



DMFT использует одночастичную функцию Грина примесной задачи и поэтому может быть рассмотрена как нулевой порядок теории, оперирующей разложением по вершинным частям примесной задачи.

Что это за теория?



Дуальные фермионы

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

$$S[c, c^*] = \sum_i S_{imp}[c_i, c_i^*] - \sum_{\omega k \sigma} (\Delta_\omega - \epsilon_k) c_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma}$$

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

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

Дуальные фермионы (продолжение)

... Интегрирование дает

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

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

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

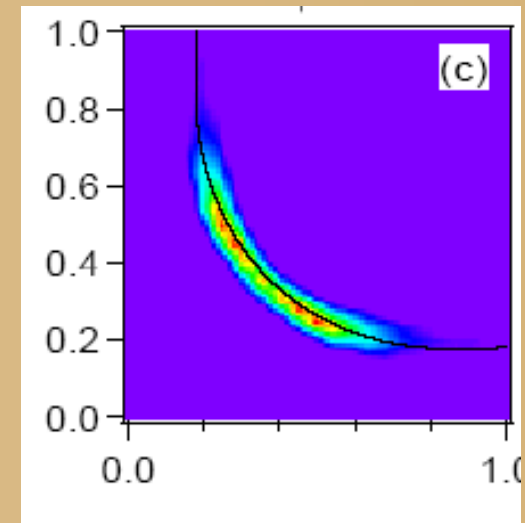
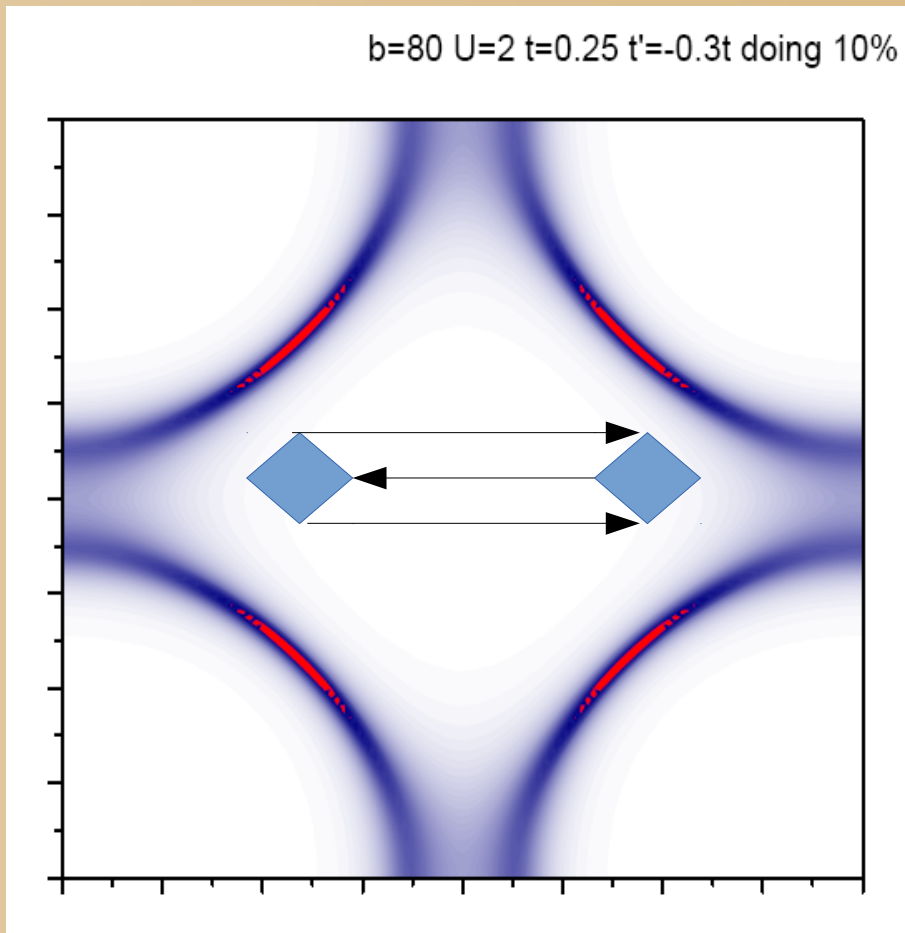
Средние в новых и старых переменных связаны точными соотношениями, например

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

Полученные выражения решают задачу о разложении по вершинам примесной задачи.

Пренебрежение V воспроизводит DMFT.

t - t' модель Хаббарда: арки

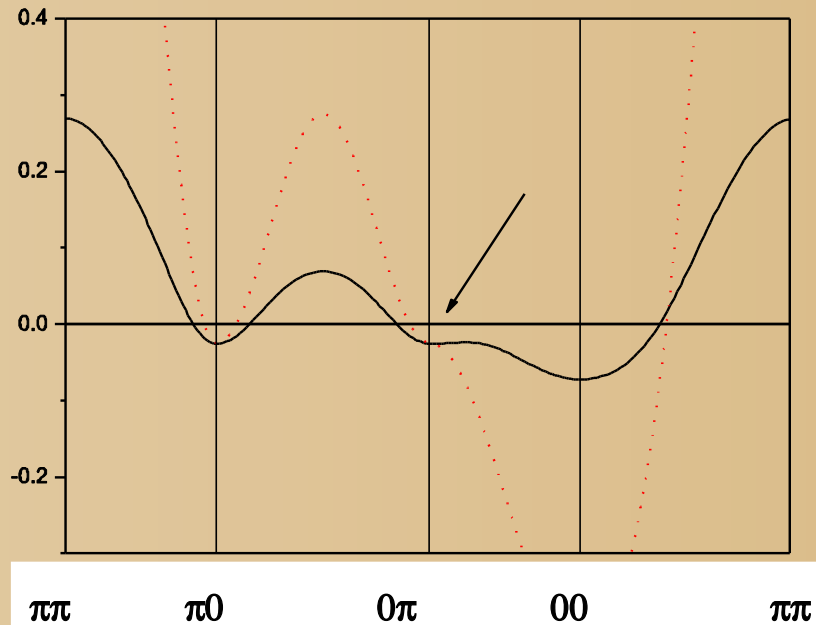


Фотоэмиссионная спектроскопия
(ARPES), $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$
Norman et al (2007).

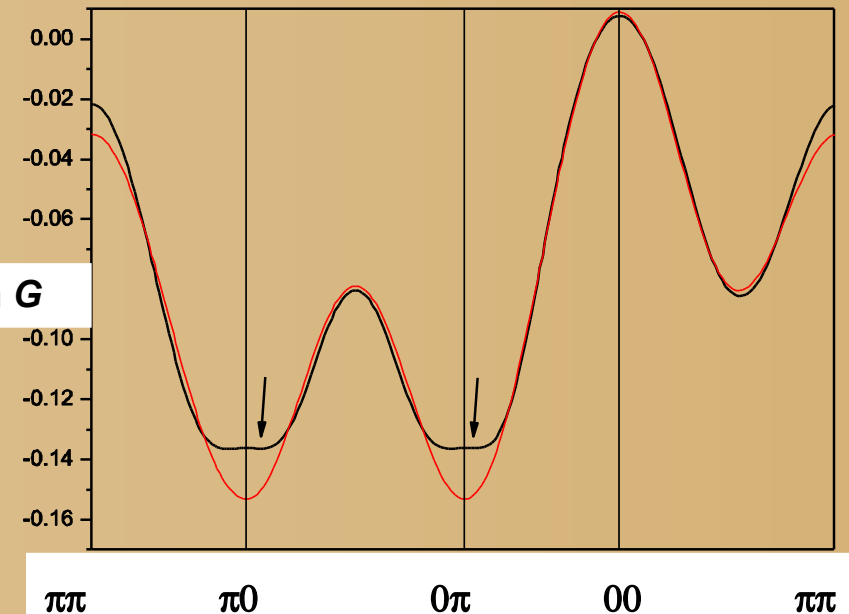
Расчет с полным учетом корреляций на узле и
частичным – корреляций между узлами

t-t' модель Хаббарда: flattening

Re G



Im G



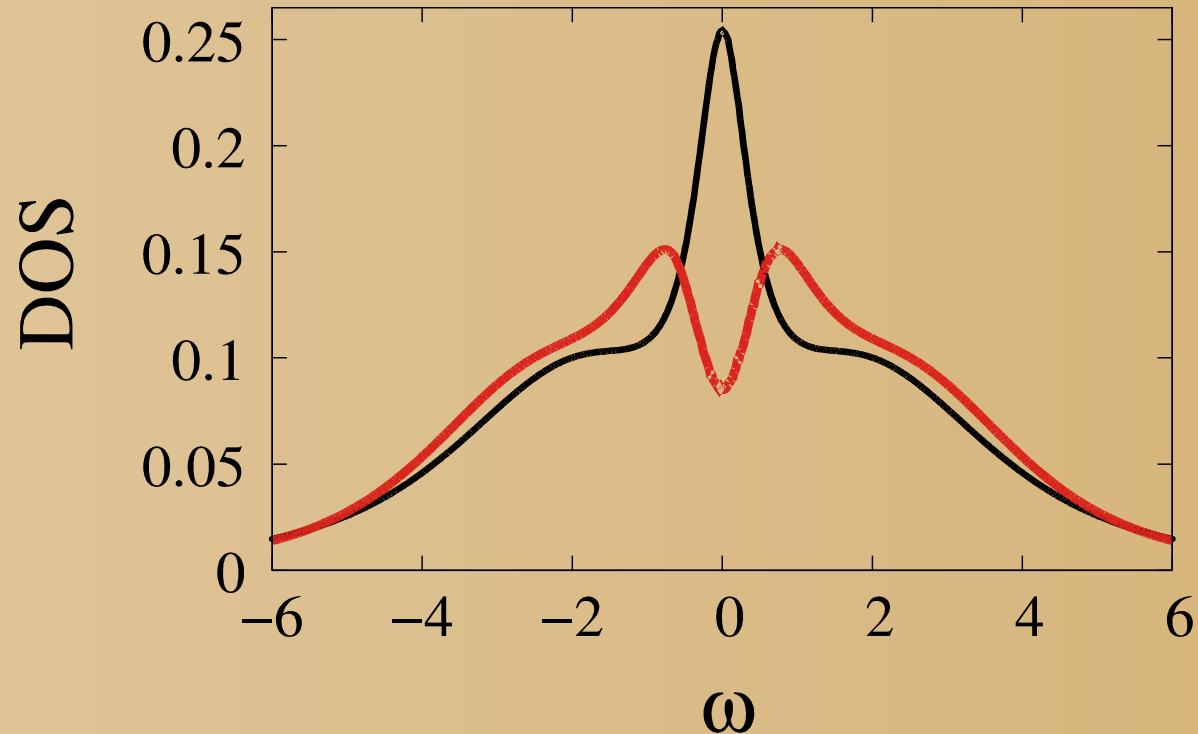
$U=4.0$, $t=0.25$, $t'=-0.075$

$\beta=80$

14% doping



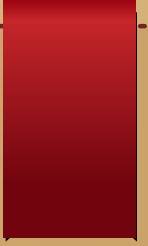
Антиферромагнитная псевдощель



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

H. Hafermann, G. Li, A.R., M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, and H. Monien
Phys. Rev. Lett. 102, 206401 (2009)

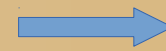
bDMFT



$$S = \sum S_{site} + \sum \epsilon b^* b$$

P.Anders et al, Phys. Rev. Lett. 105, 096402 (2010)

$$S_{imp} = S_{site} + \Lambda_{\omega} b^* b + \lambda b^* + \lambda^* b$$



$$\langle b \rangle_{imp}, g = \langle b b^{\dagger} \rangle_{imp}$$

$$S_{aux} = -g^{-1} (b - \langle b \rangle_{imp}) (b^{\dagger} - \langle b^{\dagger} \rangle_{imp})$$



$$S = \sum S_{imp} + \sum (\epsilon - \Lambda) b^* b - \sum (\lambda b^* + \lambda^* b)$$

$$\langle b \rangle = (\epsilon - \Lambda)^{-1} \lambda$$

$$\mathcal{G} = \frac{1}{g^{-1} + \Lambda - \epsilon}$$

$$\lambda, \Lambda_{\omega} : \quad \langle b \rangle = \langle b \rangle_{imp}, g_{\omega} = \sum_k G_{k\omega}$$

EDMFT



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

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

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

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

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

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

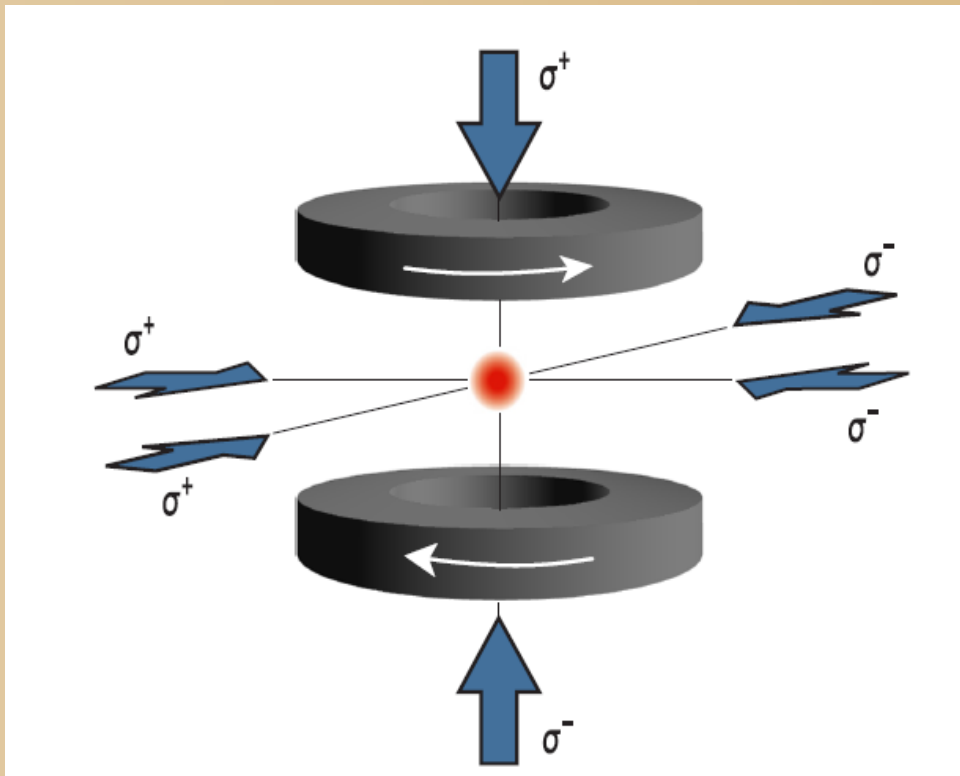
$$\chi_\Omega = \sum_k \mathcal{X}_{\Omega k}$$

Функции Грина EDMFT

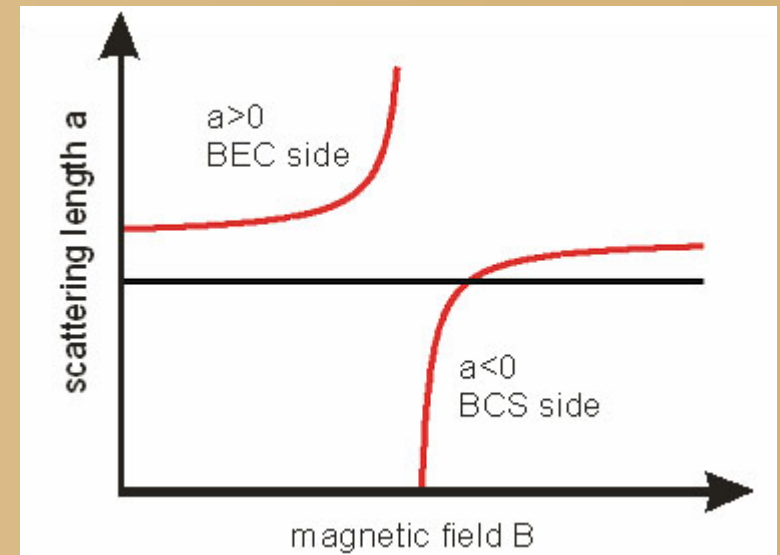
$$\mathcal{G}_{\omega k} = \frac{1}{g_\omega^{-1} + \Delta_\omega - \epsilon_k}$$

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

Холодные атомы

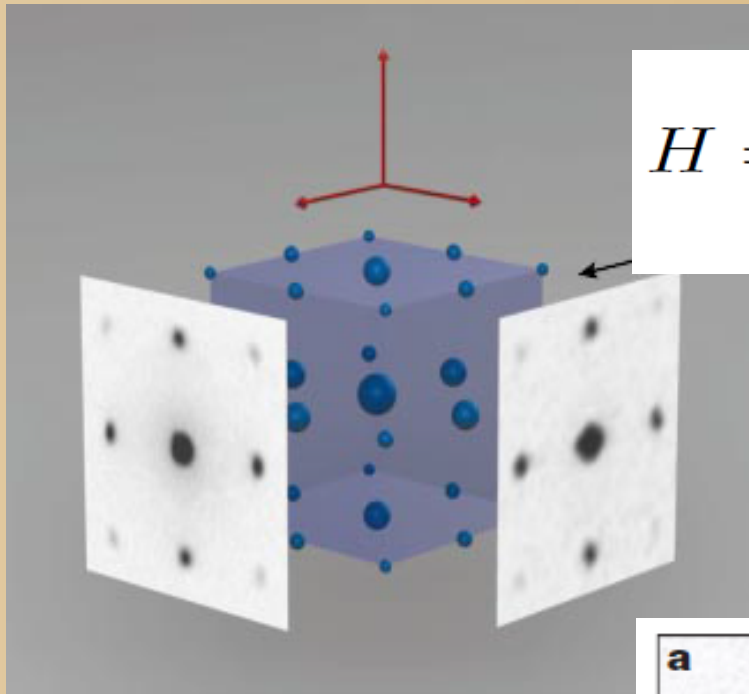


Magneto-optical trap



Feshbach resonance

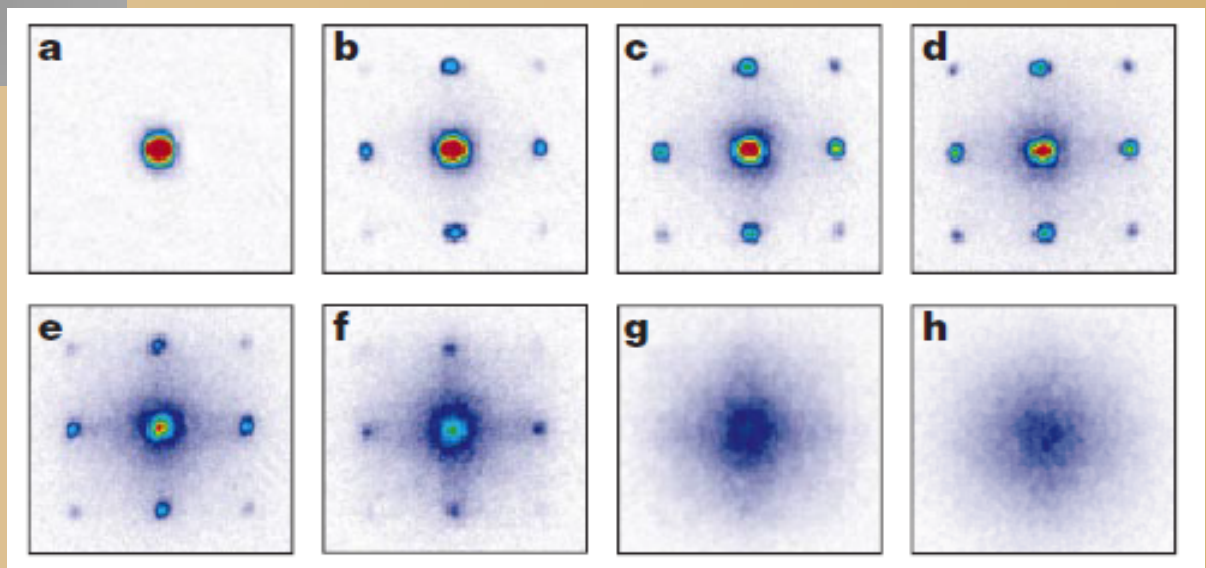
Модель Бозе-Хаббарда



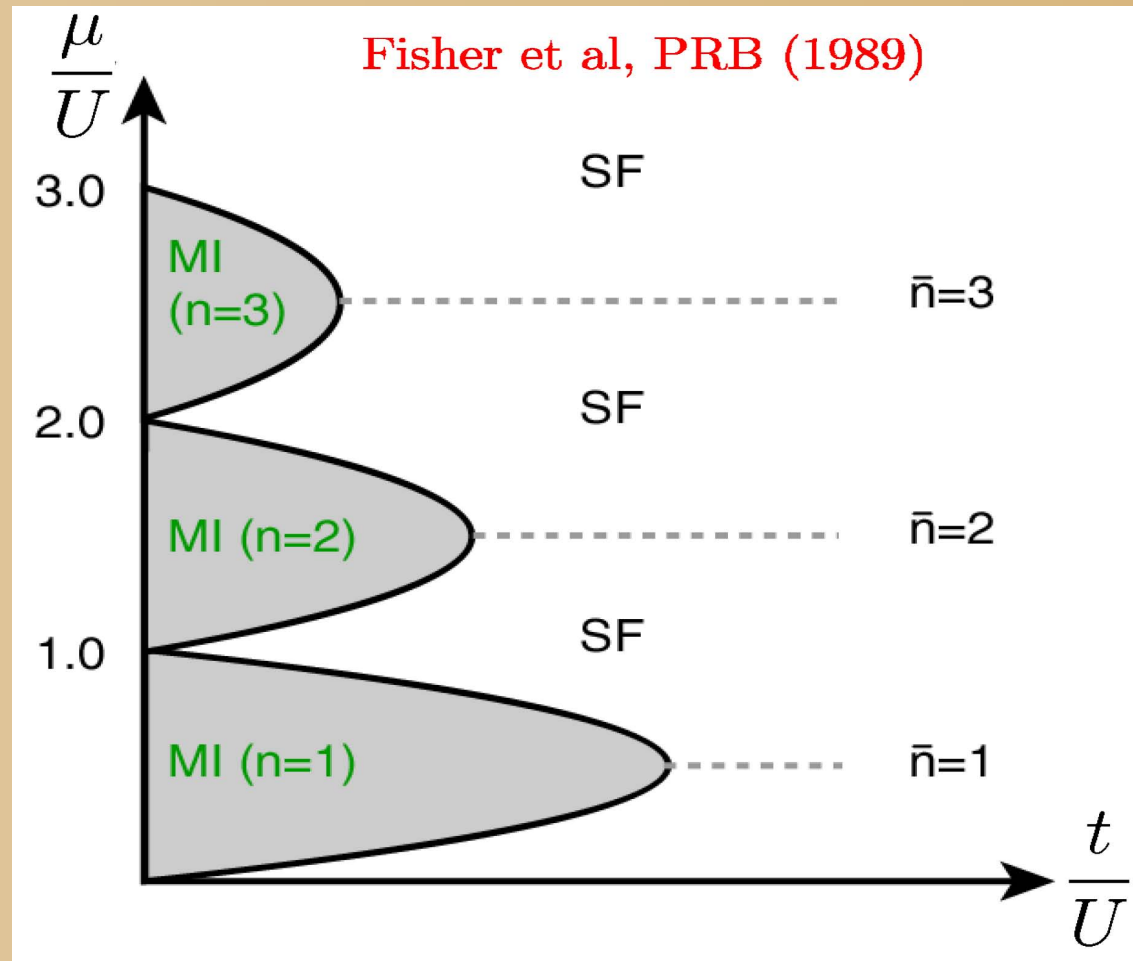
$$H = \sum_j (U n_j^2 - \mu n_j) + \sum_{\langle jj' \rangle} t b_j^\dagger b_{j'}$$

M. Greiner et al Nature 415 39 (2002)

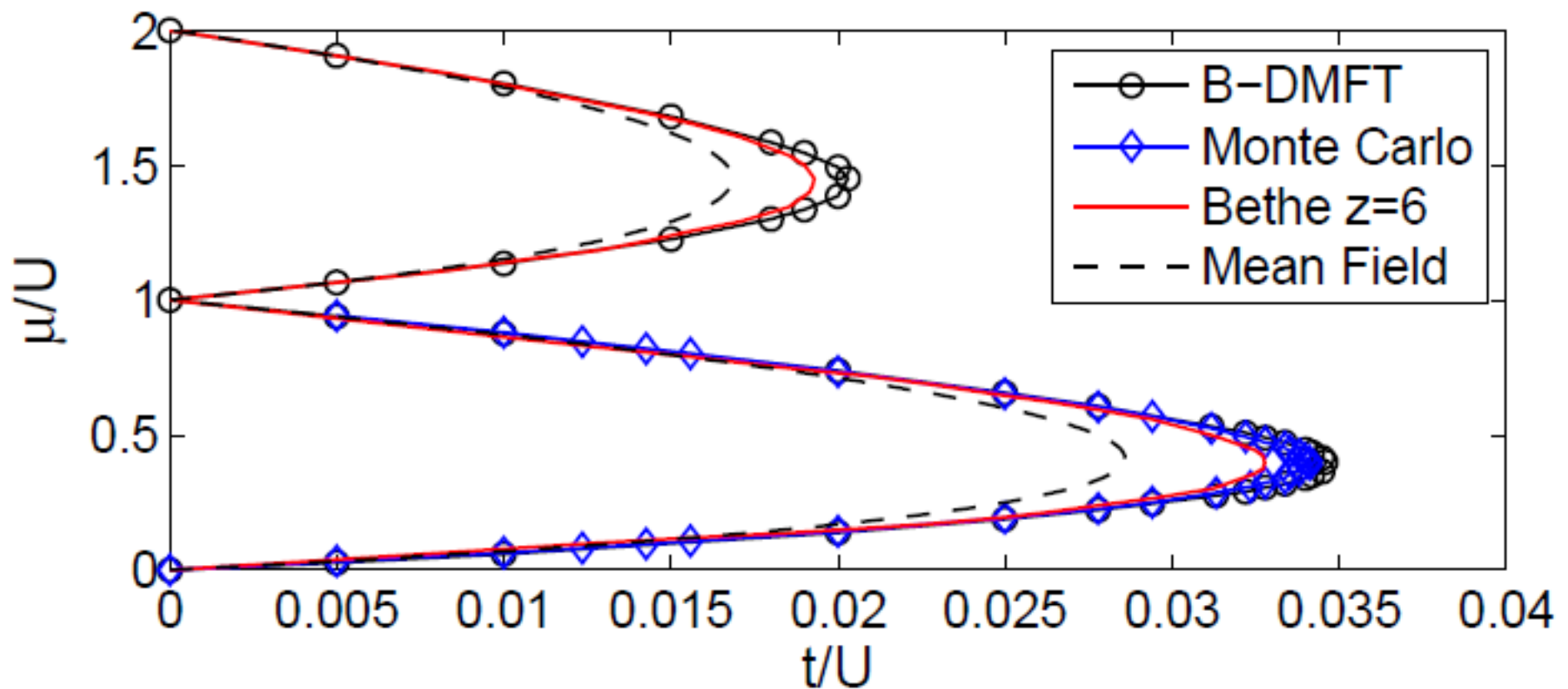
Momentum distribution
for different values of U



Фазовая диаграмма



Фазовая диаграмма bDMFT



Вариационное вычисление функции Грина

$$S \rightarrow S + \sum (\delta f b^* + \delta f^* b)$$

Варьирование уравнения для аномального среднего

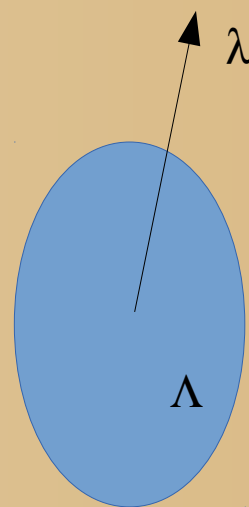
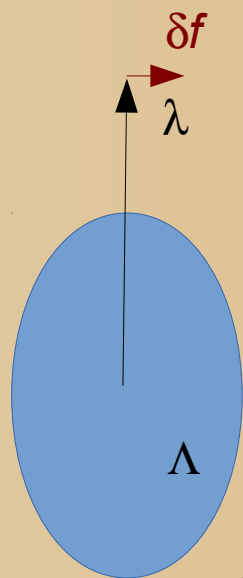
$$(\epsilon - \Lambda) \langle b \rangle = \lambda - f$$

приводит к выражению

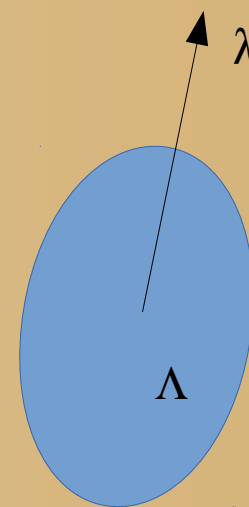
$$G^{-1} = g^{-1} + \Lambda - \epsilon + \langle b \rangle \frac{\delta \Lambda}{\delta \langle b \rangle}$$

Калибровочная инвариантность

Боголюбовские (голдстоновские) возбуждения в сверхтекучей фазе связаны с вращением фазы волновой функции конденсата. Калибровочная инвариантность обеспечивается только вычислением полной производной.

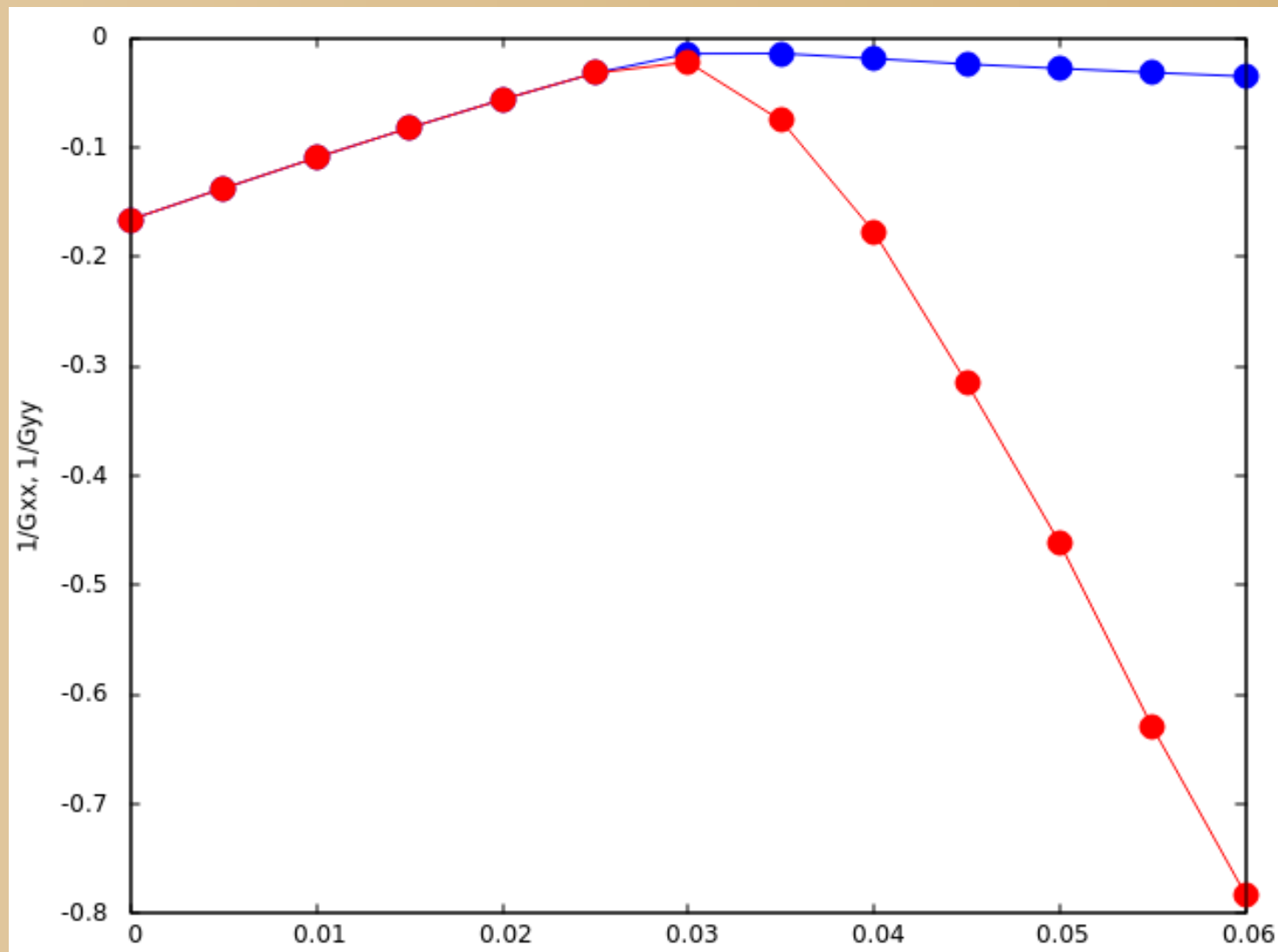


bDMFT



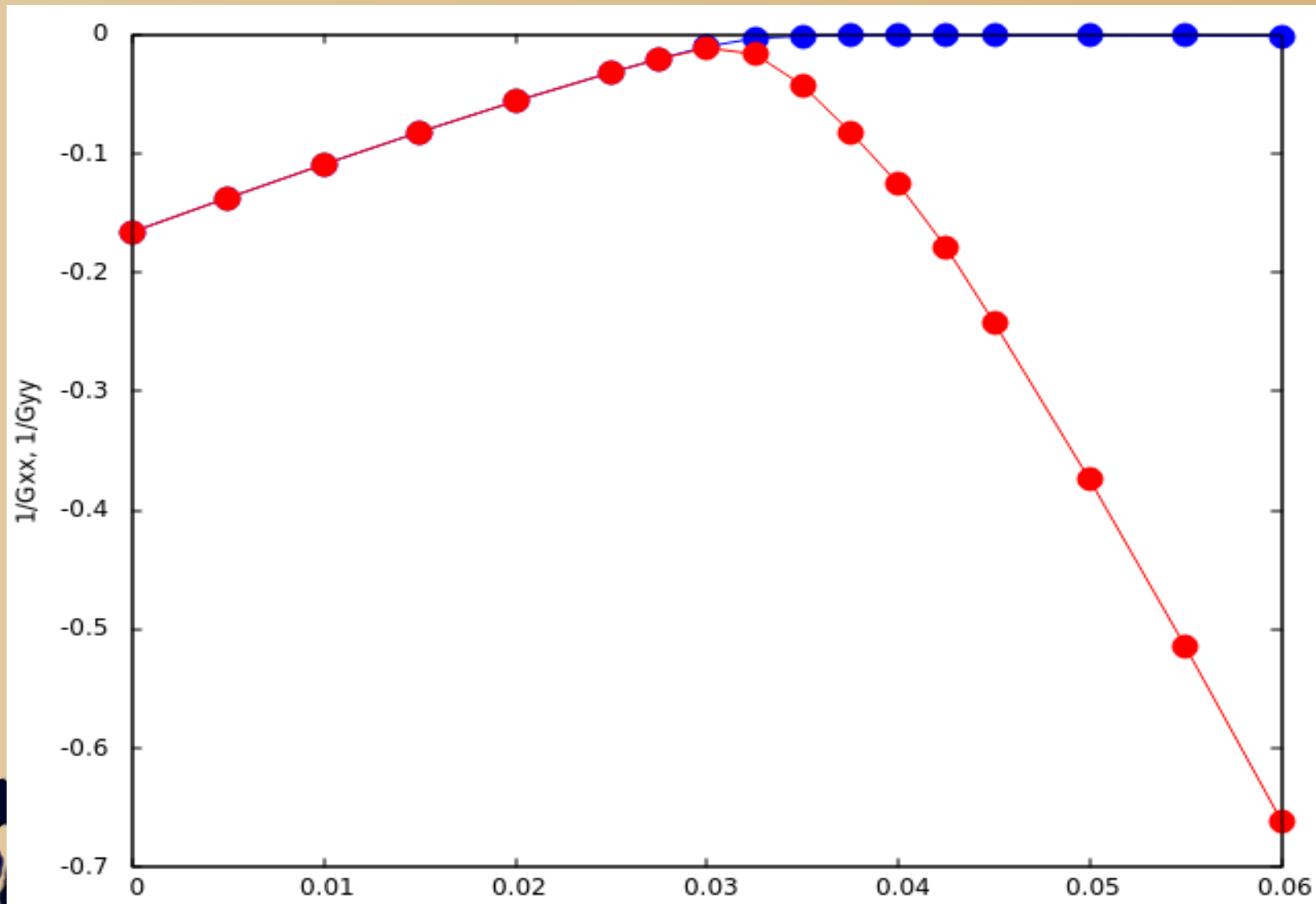
full variation

$G(\Omega=0, q=0)$, 3D bDMFT



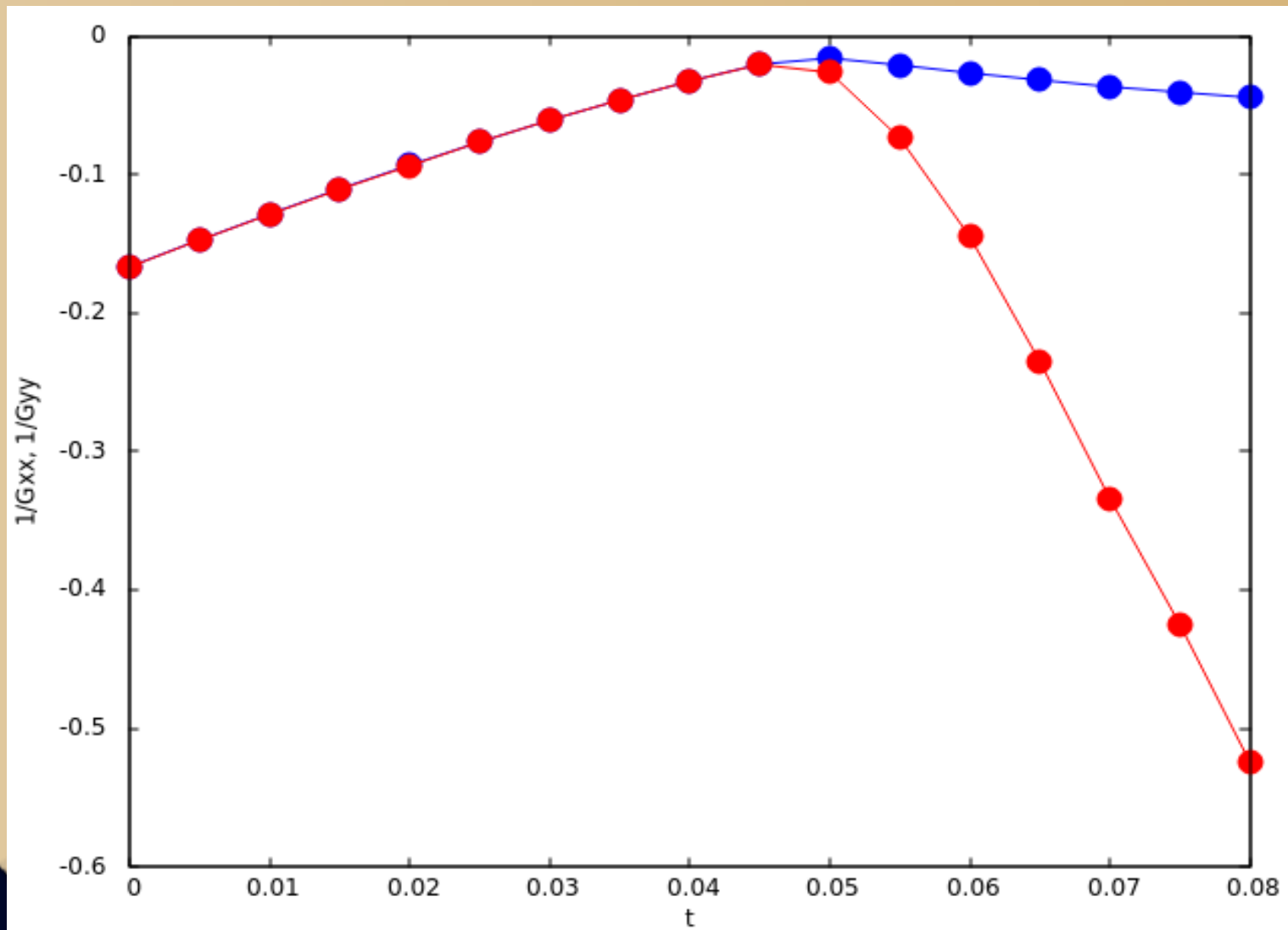
$U=1$
 $\mu=0.5$
 $\langle n \rangle=1$
 $\beta=50$

$G(\Omega=0, q=0)$, 3D bDMFT, гибридизация без аномальных компонент



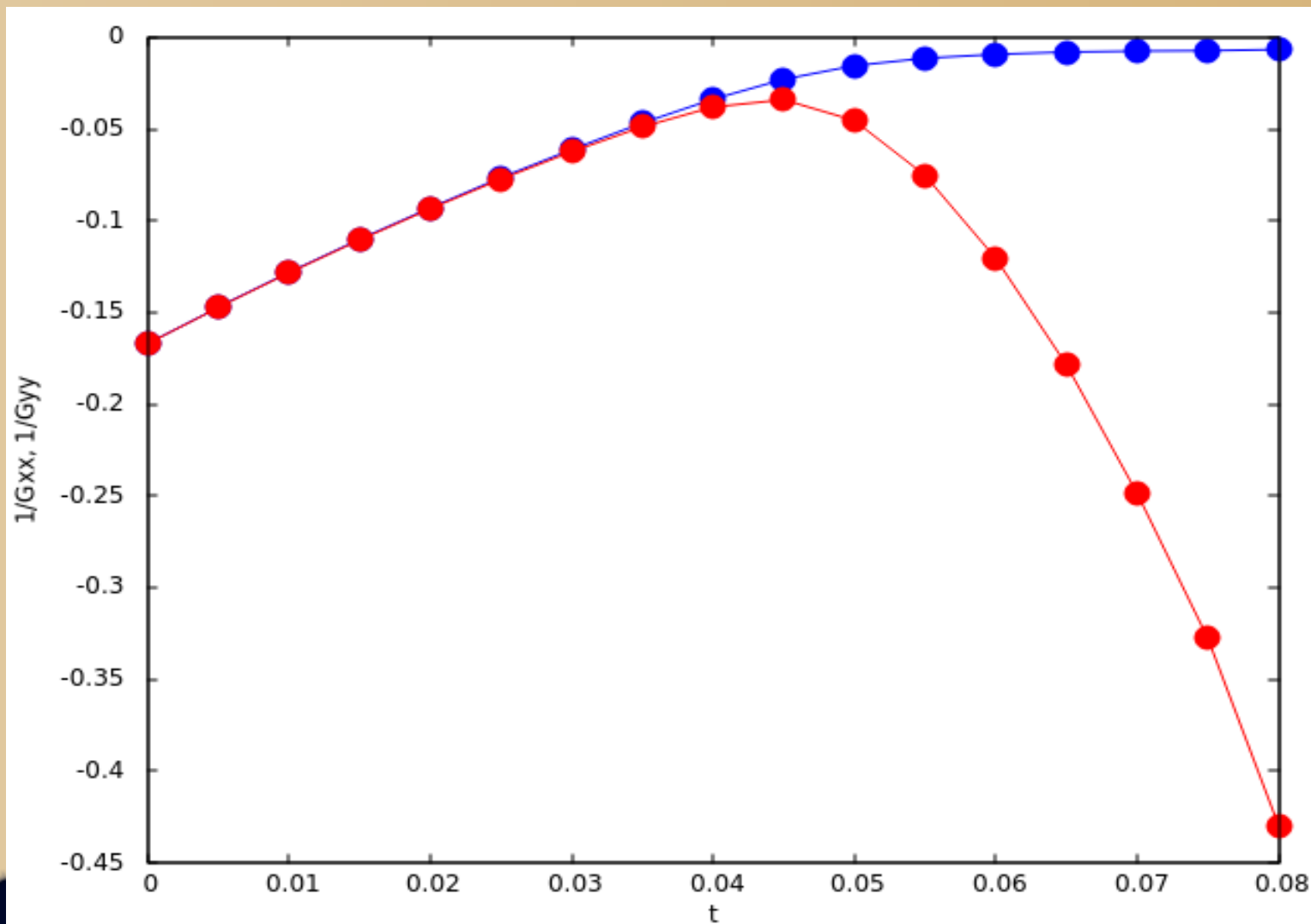
$U=1$
 $\mu=0.5$
 $\langle n \rangle=1$
 $\beta=50$

$G(\Omega=0, q=0)$, 2D bDMFT



$U=1$
 $\mu=0.5$
 $\langle n \rangle=1$
 $\beta=50$

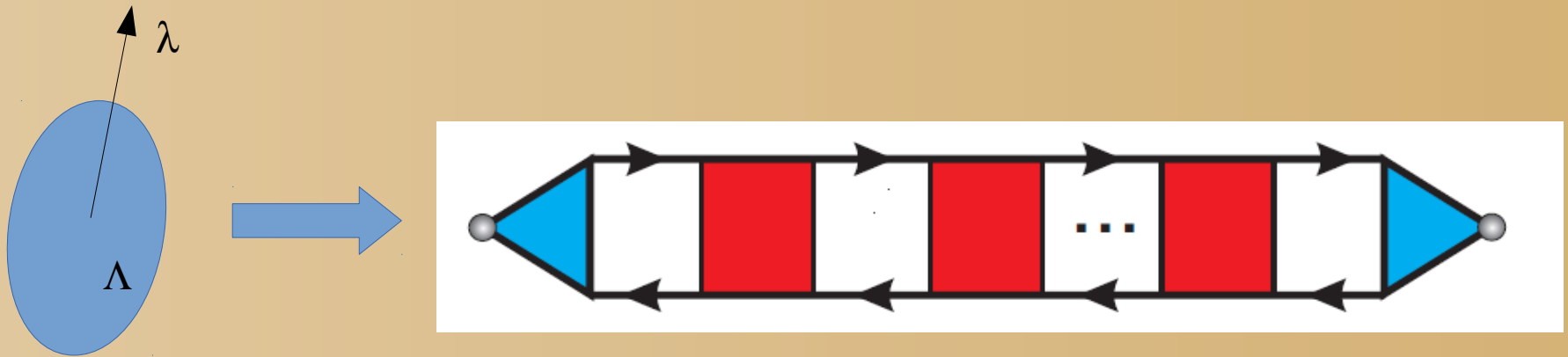
$G(\Omega=0, q=0)$, 2D bDMFT, гибридизация без аномальных компонент



$U=1$
 $\mu=0.5$
 $\langle n \rangle=1$
 $\beta=50$
 $f=0.005$

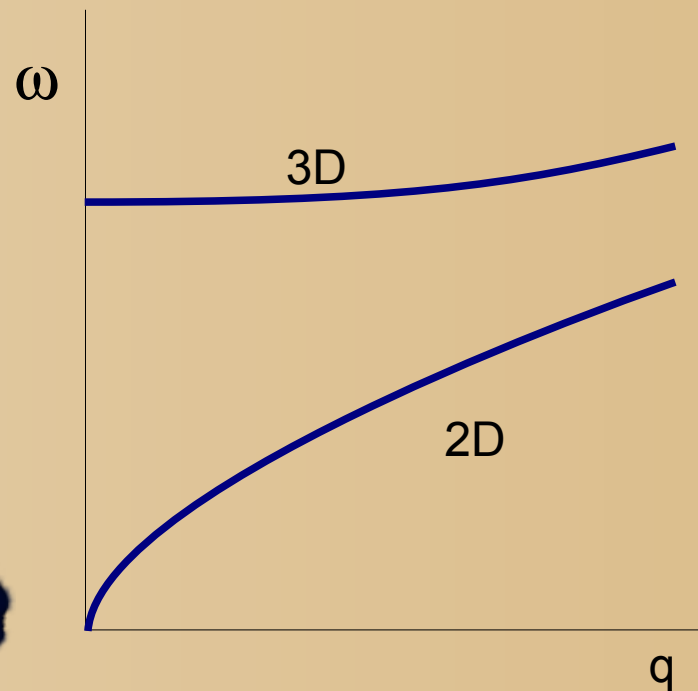
Дуальная лестница

It is proven that in new variables, one can calculate a susceptibility to the external source from a standard ladder series, at fixed hybridization. The result is gauge invariant.



Плазмоны в коррелированных средах

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i U \rho_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}}$$



EDMFT

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

Модель Хаббарда в пределе сильной связи

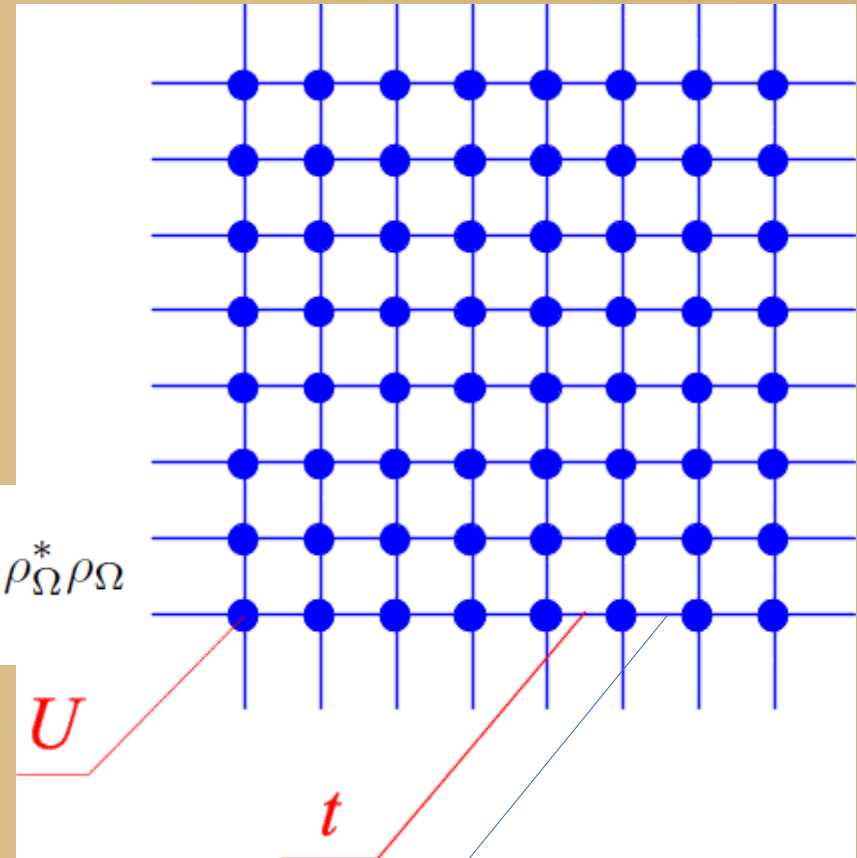
Effective-medium
dispersion law for magnons

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

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

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

0



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

От бозонных полей к бозонным модам

EDMFT: no bosonic fluctuations without nonlocal interaction

$$\chi_{\Omega} = \sum_k \chi_{\Omega k}$$

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

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

Desirable theory: an account of collective modes

$$\chi_{\Omega} = \sum_k \chi_{\Omega k}$$

$$X_{\Omega K}$$

Λ without V

Дуальные бозоны

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

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

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

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

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

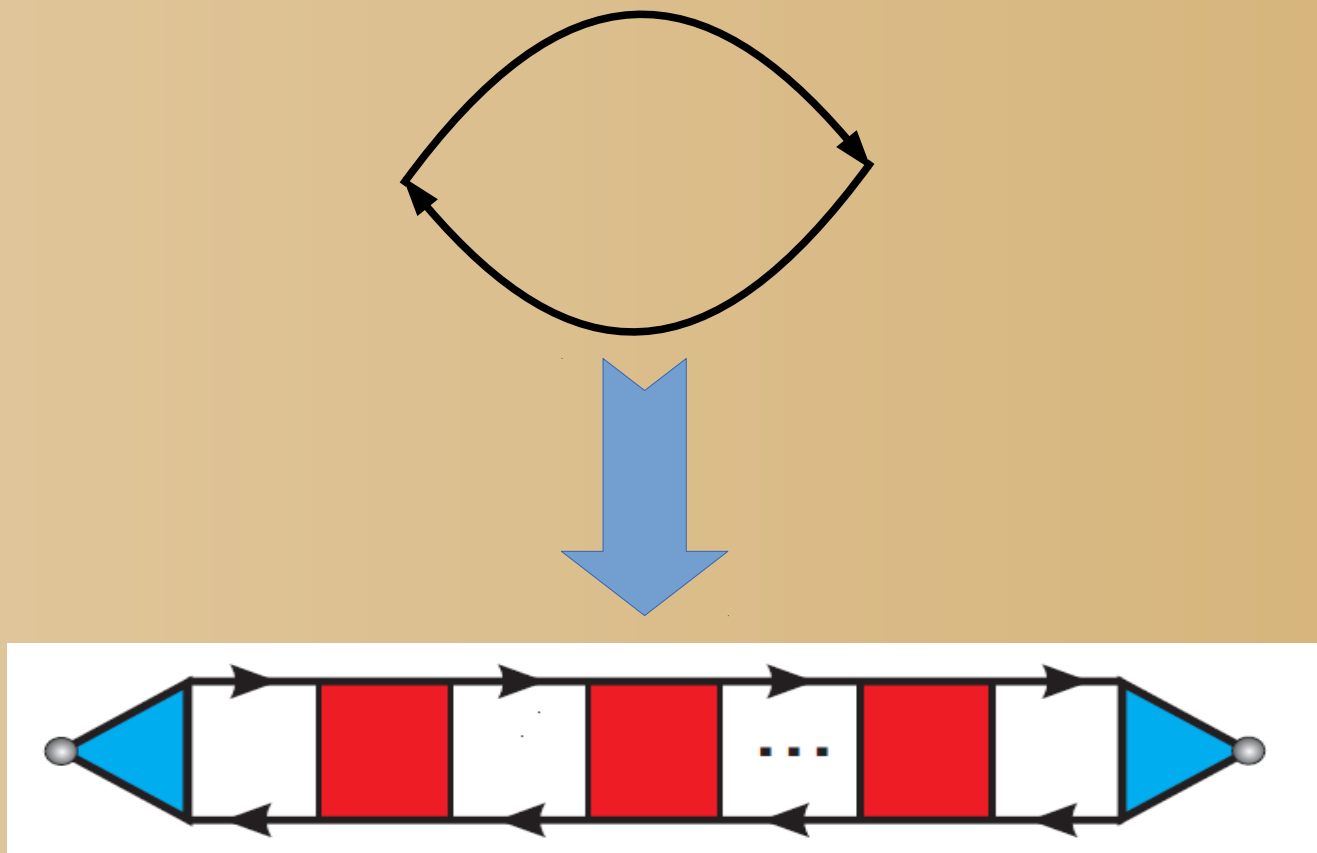
$$\tilde{\chi}_{\Omega k}^{-1} = \chi_{\Omega}^{-1} (V_k - \Lambda_{\Omega})^{-1} \chi_{\Omega}^{-1} - \chi_{\Omega}^{-1}$$

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

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

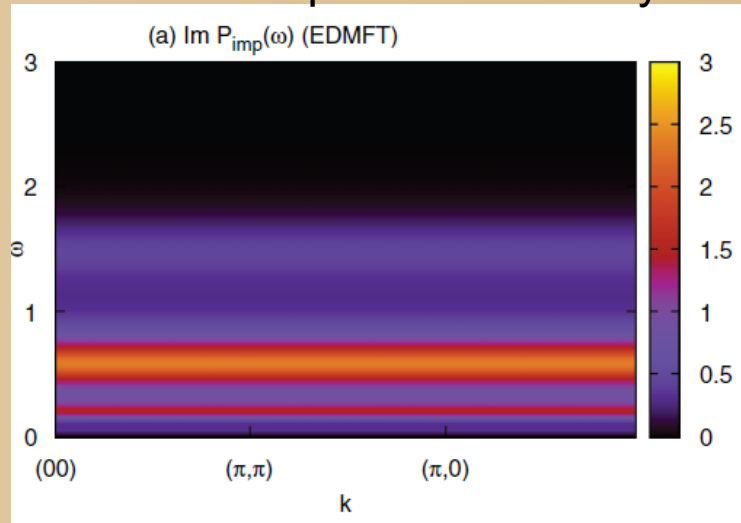
$$\lambda_{\omega \Omega} = \frac{-\langle c_{\omega+\Omega} c_{\omega}^\dagger \rho_{\Omega} \rangle_{imp} - \langle \rho \rangle_{imp} g_{\omega} \delta_{\Omega}}{g_{\omega} g_{\omega+\Omega} \chi_{\Omega}}$$

Дуальные лестницы как минимальное приближение (аналог RPA) для коррелированных систем с плазмонами

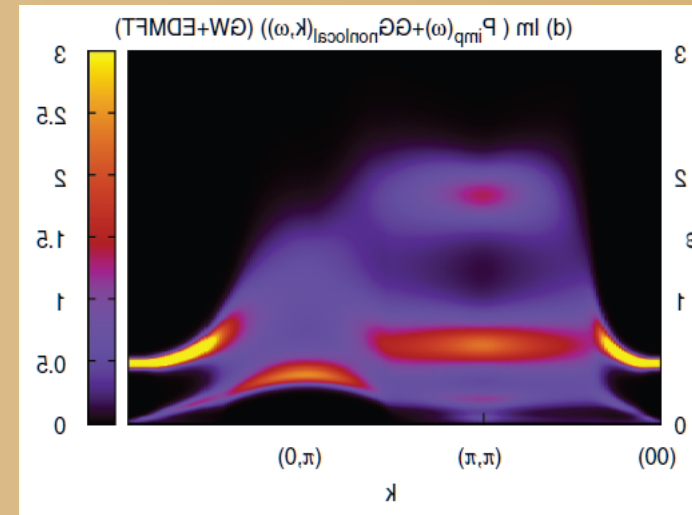


Плазмоны в 2D модели Хаббарда

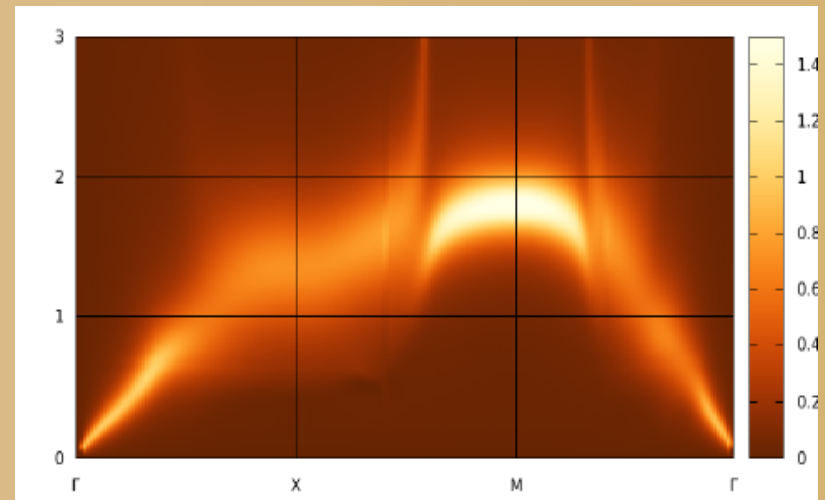
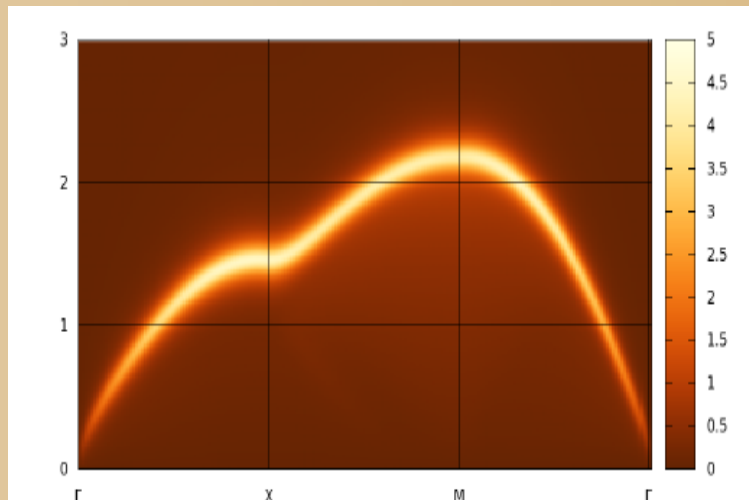
EDMFT: no spatial nonlocality



GW+EDMFT: non-conservative



Th. Ayrat, S. Biermann, Ph. Werner Phys. Rev. B 87, 125149 (2013)



E. van Loon, H. Hafermann, A. Lichtenstein, A.R., M. Katsnelson, to be published

Гибридизация как калибровочное поле

$$Z = \int e^{-S[c^\dagger, c]} Dc^\dagger c = \int e^{-S[f^\dagger, f; \Delta]} Df^\dagger f$$

$$\frac{\delta Z}{\delta \Delta} = 0 \quad \text{уравнение на } G$$

$$Z = \int e^{-S[a^\dagger, a]} Da^\dagger a = \int e^{-S[b^\dagger, b; \Lambda, \lambda]} Db^\dagger b$$

$$\frac{\delta Z}{\delta \lambda} = 0 \quad \text{уравнение на } \langle a \rangle$$

$$\frac{\delta Z}{\delta^2 \lambda} = 0 \quad ?$$

$$\frac{\delta Z}{\delta \Lambda} = 0 \quad \text{уравнение на } G$$