



FAKULTA APLIKOVANÝCH VĚD  
ZÁPADOČESKÉ UNIVERZITY  
V PLZNI

KATEDRA  
FYZIKY

## Bakalářská práce

# Andersonův model příměsi v přiblížení FLEX

Jan Gebel



FAKULTA APLIKOVANÝCH VĚD  
ZÁPADOČESKÉ UNIVERZITY  
V PLZNI

KATEDRA  
FYZIKY

## **Bakalářská práce**

# **Andersonův model příměsi v přiblížení FLEX**

Jan Gebel

### **Vedoucí práce**

doc. Mgr. Šimon Kos, Ph.D.

© Jan Gebel, 2024.

Všechna práva vyhrazena. Žádná část tohoto dokumentu nesmí být reprodukována ani rozšiřována jakoukoli formou, elektronicky či mechanicky, fotokopírováním, nahráváním nebo jiným způsobem, nebo uložena v systému pro ukládání a vyhledávání informací bez písemného souhlasu držitelů autorských práv.

**Citace v seznamu literatury:**

GEBEL, Jan. *Andersonův model příměsi v přiblížení FLEX*. Plzeň, 2024. Bakalářská práce. Západočeská univerzita v Plzni, Fakulta aplikovaných věd, Katedra fyziky. Vedoucí práce doc. Mgr. Šimon Kos, Ph.D.

ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI

Fakulta aplikovaných věd  
Akademický rok: 2023/2024

# ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(projektu, uměleckého díla, uměleckého výkonu)

Jméno a příjmení:	Jan GEBEL
Osobní číslo:	A21B0007P
Studijní program:	B0533A110013 Aplikovaná fyzika a fyzikální inženýrství
Téma práce:	Andersonův model příměsi v přiblížení FLEX
Zadávatel katedra:	Katedra fyziky

## Zásady pro vypracování

1. Seznámit se s Andersonovým modelem příměsi a přiblížením FLEX.
2. Vytvořit program pro numerické řešení rovnic FLEX pro Andersonův model příměsi.
3. Provést analýzu numerických výsledků a její srovnání s analytickými výsledky.





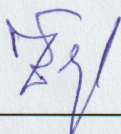
Rozsah bakalářské práce: **30-40 stran**  
Rozsah grafických prací:  
Forma zpracování bakalářské práce: **tištěná**

Seznam doporučené literatury:

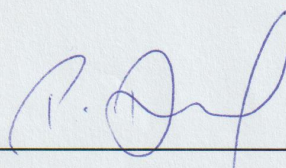
Dle pokynů vedoucího bakalářské práce.

Vedoucí bakalářské práce: **Doc. Mgr. Šimon Kos, Ph.D.**  
Katedra fyziky

Datum zadání bakalářské práce: **15. října 2023**  
Termín odevzdání bakalářské práce: **31. května 2024**



**Doc. Ing. Miloš Železný, Ph.D.**  
děkan



**Doc. Ing. Pavel Baroch, Ph.D.**  
vedoucí katedry

# Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného akademického titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Západočeská univerzita v Plzni má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona.

V Plzni dne 8. července 2024

.....

Jan Gebel

V textu jsou použity názvy produktů, technologií, služeb, aplikací, společností apod., které mohou být ochrannými známkami nebo registrovanými ochrannými známkami příslušných vlastníků.

## Abstrakt

Tato bakalářská práce se zaměřuje na Andersonův model příměsi v přiblížení FLEX (Fluctuation Exchange). Studium začíná úvodem do Andersonova modelu příměsi, který popisuje magnetické příměsi v kovech, a zkoumá jeho výsledky pomocí aproximace středního pole. Následně je představeno přiblížení FLEX jako sofistikovanější přístup, který zohledňuje fluktuace nad rámec teorie středního pole. Práce zahrnuje odvození klíčových rovnic v rámci přiblížení FLEX, jejich analytické řešení pro zjednodušené případy a použití numerických metod pro obecnější situace. Cílem je poskytnout ucelený přehled o Andersonově modelu příměsi a účinnosti přiblížení FLEX při zachycení podstatné fyziky systémů s korelovanými elektrony.

## Abstract

This bachelor's thesis focuses on the Anderson impurity model in the FLEX (Fluctuation Exchange) approximation. The study begins with an introduction to the Anderson impurity model, which describes magnetic impurities in metals, and explores its results using the mean-field approximation. Subsequently, the FLEX approximation is introduced as a more sophisticated approach that considers fluctuations beyond the mean-field theory. The thesis involves deriving the key equations within the FLEX framework, solving them analytically for simplified cases, and implementing numerical methods for more general situations. The aim is to provide a comprehensive understanding of the Anderson impurity model and the effectiveness of the FLEX approximation in capturing the essential physics of correlated electron systems.

## Klíčová slova

Andersonův model příměsi • FLEX • elektronové korelace • iterativní řešení nelineárních rovnic

## Poděkování

Na tomto místě bych rád poděkoval svému vedoucímu práce doc. Mgr. Šimonu Kosovi Ph.D, který mi poskytoval konzultace týkající se teoretické části této práce a analytického řešení problému. Rovněž mi poskytl zdroje ukazující na danou problematiku a případná dovysvětlení.

Rád bych na tomto místě poděkoval i matematikovi doc. Ing. Radku Cibulkovi Ph.D, který mi poskytl základy funkcionální analýzy, variačního počtu a operátorové algebry, což je základní matematický aparát kvantové mechaniky.

Rovněž bych chtěl poděkovat i matematikovi doc. Ing. Markovi Brandnerovi Ph.D za konzultace, rady a upozornění k numerickému řešení.

Veliké díky si zaslouží i můj kamarád Mgr. Jiří Mynář Ph. D, který mi poskytoval rady k numerickému řešení problému a poskytl mi zdroje, které zahrnovaly úvod do problematiky podobné teoretické části této práce.

*Jan Gebel,*  
(červenec 2024)



# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod do problematiky mnohačasticových systémů</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Andersonův model příměsi</b>	<b>3</b>
2.1	Úvod . . . . .	3
2.2	Andersonův Hamiltonián . . . . .	3
2.3	Odvození základních vlastností Andersonova modelu pomocí aproximace středního pole . . . . .	5
2.4	Závěry a jejich shoda s realitou . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Přiblížení a fyzikální podstata rovnic</b>	<b>13</b>
3.1	Dysonova rovnice . . . . .	13
3.2	Bethe-Salpeterova rovnice . . . . .	17
3.3	Swinger-Dysonova rovnice . . . . .	19
<b>4</b>	<b>Přiblížení flutující výměny (FLEX)</b>	<b>21</b>
<b>5</b>	<b>Analytické řešení</b>	<b>25</b>
<b>6</b>	<b>Numerické řešení</b>	<b>28</b>
6.1	Implementace Rovnic . . . . .	28
6.2	Jednotlivé cykly . . . . .	31
6.3	Výsledky a vykreslení . . . . .	33
6.4	Diskuze výsledků . . . . .	37
<b>7</b>	<b>Závěr</b>	<b>39</b>
<b>A</b>	<b>Kreační a anihilační operátory</b>	<b>41</b>
	<b>Bibliografie</b>	<b>44</b>
	<b>Seznam obrázků</b>	<b>46</b>

# Úvod do problematiky mnohačásticových systémů

1

Teorie mnohačásticových systémů se zabývá makroskopickými systémy tvořenými mnoha interagujícími částicemi popsanými kvantovou mechanikou. Už samotný název mnoho napovídá, že se bude jednat o systém částic, kde místo toho, abychom studovali každou částici zvlášť, budeme studovat všechny částice najednou. Naopak systémy s několika málo částicemi spadají do samostatné kategorie, ke které je přistupováno odlišně než ve standardní teorii mnohačásticových systémů.

Když uděláme srovnání s teorií zabývající se jednočásticovými systémy, tak zjistíme, že problémy popisující jednočásticový systém mohou (ale nutně nemusí) být složité, zatímco mnohačásticový problém může být až extrémně složitý. Extrémní složitostí máme na mysli opakovaný výskyt vzájemných interakcí nebo kvantových korelací, což je věc, která může činit vlnovou funkci tohoto systému dosti komplikovaným objektem, jehož přesné nalezení je extrémně komplikované. Když se daný mnohačásticový problém popisuje namísto vlnových funkcí pomocí Greenových funkcí, tak je problém nelineární a často se přibližná řešení hledají pomocí numerických metod, což poukazuje na další problematiku, a tou je mnohdy i extrémně náročná výpočetní složitost.

K mnohočásticovým problémům lze přistupovat různými způsoby. Uvedme zde některé z nich:

- Teorie funkcionalů hustoty (Převedení na efektivně jednočásticový problém)
- Dynamická teorie středního pole
- Teorie středního pole (Převedení na efektivně jednočásticový problém)
- Empirické potenciály
- Poruchový počet
- Kvantová chemie

# Andersonův model příměsí

## 2

### 2.1 Úvod

Andersonův model příměsí poprvé publikoval v roce 1961 americký teoretický fyzik Philip Warren Anderson ve svém článku [And61]. Tento model popisuje lokalizované magnetické momenty na atomech magnetických příměsí v kovech. Na základě experimentů bylo prokázáno, že výskyt lokalizovaných magnetických momentů na iontech železa je rozšířenější a zároveň komplikovanější jev, než se na první pohled může zdát. Tyto lokalizované momenty byly zpočátku vnímány převážně jako experimentální záležitost, ale postupem času začaly být studovány i z teoretického hlediska. Teoretické studium modelu ukázalo, že mnohočásticové jevy hrají zásadní roli v chování systému, a proto jsme se v této práci zabývali zrovna tímto modelem jakožto nejjednodušším případem těchto jevů. Navíc tento model je základ pro výše zmíněnou dynamickou teorii středního pole, což je v současné době jediný nástroj pro studium elektronových korelací ve skutečných materiálech.

### 2.2 Andersonův Hamiltonián

Anderson ve svém článku [And61] definoval tento model Hamiltoniánem:

$$\hat{H} = \hat{H}_f + \hat{H}_d + \hat{H}_{corr} + \hat{H}_{fd}, \quad (2.1)$$

kde první člen

$$\hat{H}_f = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \quad (2.2)$$

je neporušený Hamiltonián volných elektronů.  $\epsilon_k$  je tedy energie volných elektronů ve stavu s hybností  $k$  a se spinem  $\sigma$  a  $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ ,  $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$  jsou kreační a anihilační operátory tohoto stavu (viz Dodatek A).

Předpokládáme, že v reálném kovu stavy s volnými elektrony se skládají z orbitalů s- a p-elektronů. V některých případech, jako je V nebo Mo, by bylo vhodné

považovat za volné i část d-elektronů, které se u dna pásu chovají téměř stejně jako excitované s- a p- elektrony.

Druhý člen:

$$\hat{H}_d = \sum_{\sigma} \epsilon_d \hat{n}_{d\sigma} = \sum_{\sigma} \epsilon_d \hat{c}_{d\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{d\sigma} \quad (2.3)$$

je neporušený Hamiltonián d-elektronů atomů na příměsi. V kontextu s tímto členem si můžeme klást otázku týkající se vlastních funkcí, a to, proč považovat efekt elektronů na příměsi za samostatný člen, a ne jako formu potenciálu, která působí na volné elektrony. Asi hlavní důvod tohoto rozdělení je, že korelační efekty vlastní funkce  $\Psi_d$ , která je příslušná vnitřním energetickým hladinám, jsou větší než u volných elektronů.

Každopádně toto rozdělení je použitelné pouze v případě, že vlastní funkce  $\Psi_d$  je ortogonální k Wannierovým funkcím, které popisují všechny volné elektrony. Díky tomu je možné rozlišit stavy d – elektronů od stavů volných elektronů a není nutno používat poruchový počet pro Hamiltonián volných elektronů.

Třetí člen:

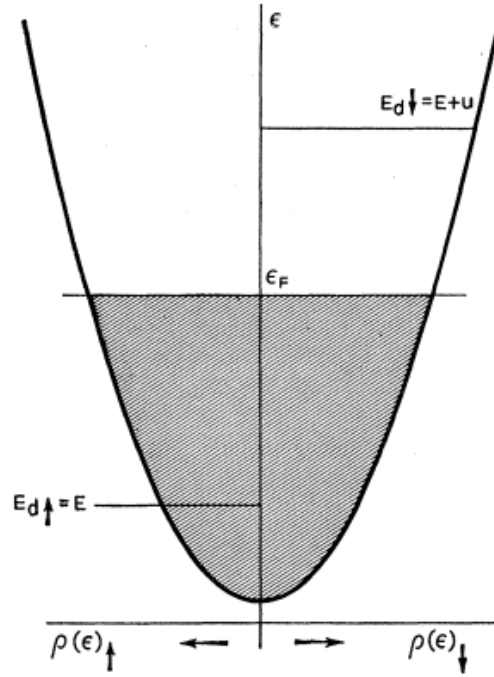
$$\hat{H}_{corr} = U \hat{n}_{d\uparrow} \hat{n}_{d\downarrow} \quad (2.4)$$

popisuje interakční energii mezi elektrony na příměsi:

$$U = \int |\Psi_d(\mathbf{r}_1)|^2 |\Psi_d(\mathbf{r}_2)|^2 e^2 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1} d^3 r_1 d^3 r_2, \quad (2.5)$$

kde odpuzující interakce mezi volnými elektrony a d-elektrony je zanedbána, a to hlavně proto, že na volné elektrony daleko více působí stínící efekt oproti d-elektronům obsaženým ve vnitřních orbitalech. Když nahlédneme do tabulek, tak zjistíme, že odpuzující interakce mezi s elektrony navzájem nebo mezi s- a d-elektrony jsou o 2 až 3 řády nižší než interakce mezi d-elektrony.





Obrázek 2.1: Energetické hladiny bez hybridizace mezi volnými elektrony a elektrony na příměsi [And61].

Poslední člen Hamiltoniánu:

$$\hat{H}_{fd} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} t_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{d\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} t_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{d\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \quad (2.6)$$

popisuje hybridizaci mezi elektrony na příměsi a volnými elektrony. Bez této hybridizace jsou energetické hladiny znázorněny na obrázku 2.1.

## 2.3 Odvození základních vlastností Andersonova modelu pomocí aproximace středního pole

Když se opět podíváme do článku P.W. Andersona z roku 1961, kde publikoval své výsledky o vlastnostech lokalizovaných magnetických momentů v kovových příměsích, tak zaregistrujeme mimo jiné odvození vlastností jím navrhovaného modelu v přiblížení středního pole. V této sekci se budeme zabývat podrobněji tímto odvozením pro případ nulové teploty a podíváme se, jak moc tyto výsledky souhlasí s reálným systémem. Toto odvození lze nalézt méně podrobně také např. v [Mic16].

Začneme s Andersonovým Hamiltoniánem, který jsme si zavedli v sekci 2.2:

$$\hat{H} = \hat{H}_f + \hat{H}_d + \hat{H}_{corr} + \hat{H}_{fd} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{corr}. \quad (2.7)$$

Pokusme se na tento Hamiltonián aplikovat pravidlo, které říká:

$$[\hat{A}, \hat{c}_{d\sigma}(\tau)] = \partial_\tau \hat{c}_{d\sigma}(\tau), \quad (2.8)$$

kde  $\hat{c}_{d\sigma}(\tau)$ ,  $\hat{A}$  jsou operátory a :

$$\partial_\tau \hat{c}_{d\sigma}(\tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{c}_{d\sigma}(\tau). \quad (2.9)$$

Když za operátor  $\hat{A}$  dosadíme úplný Hamiltonián  $\hat{H}$ , dostáváme tzv. Heisenbergův obraz

[Mah90]:

$$\begin{aligned} \partial_\tau \hat{c}_{d\sigma}(\tau) &= [\hat{H}_1, \hat{c}_{d\sigma}(\tau)] + [\hat{H}_{corr}, \hat{c}_{d\sigma}(\tau)] = -\epsilon_d \hat{c}_{d\sigma}(\tau) - \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) + [\hat{H}_{corr}, \hat{c}_{d\sigma}(\tau)], \\ \partial_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) &= [\hat{H}, \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)] = -\epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) - t_{\mathbf{k}} \hat{c}_{d\sigma}(\tau). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Pro poslední člen první rovnice platí:

$$[\hat{H}_{corr}, \hat{c}_{d\sigma}(\tau)] = -U \hat{n}_{d-\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}(\tau), \quad (2.11)$$

kde jsme využili poznatků:

$$[\hat{n}_{d-\sigma}(\tau), \hat{c}_{d\sigma}(\tau)] = 0 \quad a \quad [\hat{n}_{d\sigma}(\tau), \hat{c}_{d\sigma}(\tau)] = -\hat{c}_{d\sigma}(\tau). \quad (2.12)$$

Touto úpravou dostáváme pohybové rovnice v následujícím tvaru:

$$\begin{aligned} \partial_\tau \hat{c}_{d\sigma}(\tau) &= -\epsilon_d \hat{c}_{d\sigma}(\tau) - \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) - U \hat{n}_{d-\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}(\tau), \\ \partial_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) &= -\epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) - t_{\mathbf{k}} \hat{c}_{d\sigma}(\tau). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Definujme nyní Matsubarovu Greenovu funkci [Mah90], [For83] pro stavy na příměši:

$$G_{d\sigma}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau [\hat{c}_{d\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}^\dagger(\tau')] \rangle, \quad (2.14)$$

kde pod závorkami  $\langle \rangle$  budeme v kontextu s Greenovými funkcemi v této práci rozumět:

$$-\langle T_\tau [\hat{c}_{d\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}^\dagger(\tau')] \rangle = -\frac{\text{Tr}[e^{-H_1\beta} T_\tau [\hat{S}(\beta) \hat{c}_{d\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}^\dagger(\tau')]]}{\text{Tr}[e^{-H_1\beta} \hat{S}(\beta)]}. \quad (2.15)$$

Pod  $\hat{S}(\beta)$  budeme rozumět  $S$ -matici, kterou spočteme poruchovým rozvojem interagujícího Hamiltoniánu, což jsou věci, kterým se podrobněji budeme věnovat v pozdějších kapitolách této práce, a podotkneme, že toto už není Heisenbergův obraz, ale interakční. Námi definovaná Greenova funkce splňuje následující rovnici:

$$\begin{aligned} (-\partial_{\tau-\tau'} - \epsilon_d) G_{d\sigma}(\tau - \tau') &= \delta(\tau - \tau') - \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}^* \langle T_\tau [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}^\dagger(\tau')] \rangle \\ &\quad - U \langle T_\tau [\hat{n}_{d-\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}^\dagger(\tau')] \rangle. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Pro lepší zápis následně definujeme Matsubarovu Greenovu funkci pro stavy jak na příměsi tak volných elektronů:

$$F_{\mathbf{k}\sigma}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}^\dagger(\tau')] \rangle, \quad (2.17)$$

která splňuje rovnici:

$$(-\partial_{\tau-\tau'} - \epsilon_{\mathbf{k}})F_{\mathbf{k}\sigma}(\tau - \tau') = t_{\mathbf{k}}G_{d\sigma}(\tau - \tau'). \quad (2.18)$$

Zapišme nyní tyto dvě rovnice pohromadě :

$$\begin{aligned} (-\partial_{\tau-\tau'} - \epsilon_d)G_{d\sigma}(\tau - \tau') &= \delta(\tau - \tau') + \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}^* F_{\mathbf{k}\sigma}(\tau - \tau') \\ &\quad - U \langle T_\tau [\hat{n}_{d-\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}^\dagger(\tau')] \rangle, \\ (-\partial_{\tau-\tau'} - \epsilon_{\mathbf{k}})F_{\mathbf{k}\sigma}(\tau - \tau') &= t_{\mathbf{k}}G_{d\sigma}(\tau - \tau'). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Poslední člen první pohybové rovnice tuto rovnici komplikuje, protože obsahuje dvoučásticovou Greenovu funkci. Pohybová rovnice pro dvoučásticovou Greenovu funkci by obsahovala tříčásticovou Greenovu funkci atd. Nabízí se možnost použít poruchovou teorii, ale tu lze použít pouze v případě slabých interakcí a existují též pruchové jevy, které poruchová teorie nepostihuje. Proto zde provedeme tzv. aproximaci středního pole ve shodě s Andersonem. Aproximací se faktorizuje dvoučásticová Greenova funkce na dvě jednočásticové funkce, čímž se dostává nealinity a self-konzistence:

$$\begin{aligned} \langle T_\tau [\hat{n}_{d-\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}^\dagger(0)] \rangle &= \langle T_\tau [\hat{c}_{d-\sigma}^\dagger(\tau) \hat{c}_{d-\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}^\dagger(\tau')] \rangle \\ &\approx \langle \hat{c}_{d-\sigma}^\dagger(\tau) \hat{c}_{d-\sigma}(\tau) \rangle \langle T_\tau [\hat{c}_{d\sigma}(\tau) \hat{c}_{d\sigma}^\dagger(\tau')] \rangle \\ &= -\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle G_{d\sigma}(\tau - \tau'). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Díky této aproximaci dostáváme pohybové rovnice ve tvaru:

$$\begin{aligned} (-\partial_{\tau-\tau'} - \epsilon_d - U \langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle)G_{d\sigma}(\tau - \tau') &= \delta(\tau - \tau') + \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}^* F_{\mathbf{k}\sigma}(\tau - \tau'), \\ (-\partial_{\tau-\tau'} - \epsilon_{\mathbf{k}})F_{\mathbf{k}\sigma}(\tau - \tau') &= t_{\mathbf{k}}G_{d\sigma}(\tau - \tau'). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Použijme nyní Fourierovu transformaci pro přetransformování do Matsubarových frekvencí. Transformace mezi těmito dvěma veličinami je dána vztahem:

$$G_{d\sigma}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} G_{d\sigma}(\tau), \quad (2.22)$$

kde :

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (2.23)$$

je fermionová Matsubarova frekvence.

Inverzní Fourierova transformace je:

$$G_{d\sigma}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G_{d\sigma}(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}. \quad (2.24)$$

Přetřansformujme nyní tyto rovnice:

$$\begin{aligned} (-\partial_{\tau-\tau'} - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle) G_{d\sigma}(\tau - \tau') &= \delta(\tau - \tau') + \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}^* F_{\mathbf{k}\sigma}(\tau - \tau') \\ &\rightarrow \left( -\partial_{\tau-\tau'} - \epsilon_{\mathbf{k}} - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle \right) \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} G_{d\sigma}(i\omega_n) \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}^* \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} F_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) \\ &\rightarrow (i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}} - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle) G_{d\sigma}(i\omega_n) = 1 + \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}^* F_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n), \end{aligned} \quad (2.25)$$

kde druhou rovnici budeme transformovat obdobným způsobem:

$$(i\omega_n - \epsilon_d) F_{\mathbf{k}}(i\omega_n) = t_{\mathbf{k}} G_{d\sigma}(i\omega_n). \quad (2.26)$$

Zavedme nyní Greenovu funkci neporušeného Hamiltoniánu:

$$G_{0,\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (2.27)$$

Poznamenejme, že toto zavedení se týká pouze této aktuální situace; pro situace popsané v dalších kapitolách budeme pod touto funkcí rozumět něco jiného.

Zavedení této funkce nám umožňuje přepsat pohybové rovnice do následujícího tvaru:

$$F_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega) = G_{0,\mathbf{k}}(i\omega_n) t_{\mathbf{k}} G_{d\sigma}(i\omega_n), \quad (2.28)$$

kterou následně dosadíme do první rovnice:

$$(i\omega_n - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma}(i\omega_n) \rangle) G_{d\sigma}(i\omega_n) = 1 + \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}^* G_{0,\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) t_{\mathbf{k}} G_{d\sigma}(i\omega_n), \quad (2.29)$$

kde po vynásobení obou stran rovnice funkcí:

$$G_{0,d\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle}, \quad (2.30)$$

dostaneme:

$$G_{d\sigma}(i\omega) = G_{0,d\sigma}(i\omega_n) + G_{0,d\sigma}(i\omega_n) \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}^* G_{0,\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) t_{\mathbf{k}} G_{d\sigma}(i\omega_n). \quad (2.31)$$



Definujme nyní self-energii elektronu na příměsi, kde se v tomto případě budeme zabývat jejím příspěvkem od hybridizace  $\Delta$ :

$$\Sigma_\sigma(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} |t_{\mathbf{k}}|^2 G_{0,\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n). \quad (2.32)$$

Po dosazení dostaneme:

$$G_{d\sigma}(i\omega_n) = G_{0,d\sigma}(i\omega_n) + G_{0,d\sigma}(i\omega_n) \Sigma_\sigma(i\omega_n) G_{d\sigma}(i\omega_n). \quad (2.33)$$

Odtud dostáváme pro  $G_{d\sigma}(i\omega_n)$

$$G_{d\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle - \Sigma_\sigma(i\omega_n)}. \quad (2.34)$$

Vyjádřeme nyní,  $\Sigma_\sigma(i\omega)$  s předpokladem, že  $t_k$  a  $\epsilon_k$  závisí pouze na  $k = |\mathbf{k}|$ :

$$\begin{aligned} \Sigma_\sigma(i\omega_n) &= \sum_{\mathbf{k}} |t_{\mathbf{k}}|^2 G_{0,\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|t_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \epsilon_k} \\ &= V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{|t_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \epsilon_k} \\ &= \frac{V}{(2\pi)^2} \int dk k^2 \frac{|t_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \epsilon_k} \\ &= \int d\epsilon \frac{N(\epsilon) |t_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \epsilon} \\ &= \int \frac{d\epsilon}{\pi} \frac{\Delta(\epsilon)}{i\omega_n - \epsilon}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

kde  $\Delta(\epsilon) = \pi N(\epsilon) |t_{\mathbf{k}}|^2$  je energie hybridizace a  $N(\epsilon)$  je hustota stavů, kterou definujeme následovně:

$$\frac{N(\epsilon)}{V} = \frac{1}{(2\pi)^2} \left( k^2 \frac{dk}{d\epsilon} \right). \quad (2.36)$$

Předpokládejme pro jednoduchost, že hybridizační energie je konstantní v celém pásu :

$$\Sigma_\sigma(i\omega_n) = \frac{\Delta}{\pi} \int_{-D}^D d\epsilon \frac{1}{i\omega_n - \epsilon}. \quad (2.37)$$

Upravme dále tento integrál :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta}{\pi} \int_{-D}^D d\epsilon \frac{1}{i\omega_n - \epsilon} &= -\frac{\Delta}{\pi} \int_{-D}^D d\epsilon \frac{1}{\epsilon - i\omega_n} \\ &= -\frac{\Delta}{\pi} \int_{-D}^D d\epsilon \frac{\epsilon + i\omega_n}{\epsilon^2 + \omega_n^2}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Reálná část tohoto integrálu vyjde nula, protože je to integrál liché funkce na symetrickém intervalu, a tedy budeme věnovat pozornost pouze imaginární části:

$$\begin{aligned} \text{Im} \left( -\frac{\Delta}{\pi} \int_{-D}^D \frac{d\epsilon(\epsilon + i\omega_n)}{\epsilon^2 + \omega_n^2} \right) &= -\frac{\Delta}{\pi} \int_{-D}^D \frac{d\epsilon(|\omega_n| \text{sign}(\omega_n))}{\epsilon^2 + \omega_n^2} \\ &= -\frac{\Delta}{\pi} \text{sign}(\omega_n) \left[ \arctan \left( \frac{D}{|\omega_n|} \right) - \arctan \left( \frac{-D}{|\omega_n|} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Předpokládejme, že  $D \gg |\omega_n|$ , takže platí:

$$\begin{aligned} &-\frac{\Delta}{\pi} \text{sign}(\omega_n) \left[ \arctan \left( \frac{D}{|\omega_n|} \right) - \arctan \left( \frac{-D}{|\omega_n|} \right) \right] \\ &\approx -\frac{\Delta}{\pi} \text{sign}(\omega_n) \left[ \arctan \left( \frac{D}{|\omega_n|} \right) - \arctan \left( \frac{-D}{|\omega_n|} \right) \right] \\ &\approx -\frac{\Delta}{\pi} \text{sign}(\omega_n) \left[ \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} \right] = -\frac{\Delta}{\pi} \text{sign}(\omega_n) \pi = -\Delta \text{sign}(\omega_n). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Takže pro  $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$  nakonec dostáváme:

$$\Sigma_\sigma(i\omega_n) = -i\Delta \text{sign}(\omega_n). \quad (2.41)$$

Dosaďme nyní do Greenovy funkce :

$$G_{d\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle + i\Delta \text{sign}(\omega_n)}. \quad (2.42)$$

Proveďme nyní analytické prodloužení do reálné osy z horní poloviny, kde Matsubarovu frekvenci  $i\omega_n$  nahradíme  $\omega + is$ , kde  $s > 0$ , takže dostáváme:

$$G_{d\sigma}(\omega + is) = \frac{1}{\omega + is - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle + i\Delta}, \quad (2.43)$$

což dále můžeme upravit na tvar :

$$G_{d\sigma}(\omega + is) = \frac{1}{\omega + is - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle + i\Delta} = \frac{(\omega - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle) - i(s + \Delta)}{(\omega - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle)^2 + (s + \Delta)^2}. \quad (2.44)$$

Pro získání Greenovy funkce  $G_{d\sigma}(\omega)$  zavedme limitní přechod pro  $s \rightarrow 0^+$ :

$$\begin{aligned} G_{d\sigma}(\omega) &= \lim_{s \rightarrow 0^+} G_{d\sigma}(\omega + is) = \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{(\omega - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle) - i(s + \Delta)}{(\omega - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle)^2 + (s + \Delta)^2} \\ &= \frac{(\omega - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle) - i\Delta}{(\omega - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle)^2 + \Delta^2}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Zavedme nyní funkci spektrální hustoty  $A_{d\sigma}(\omega)$ , pro kterou platí:

$$A_{d\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(G_{d\sigma}(\omega)) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(\omega - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle)^2 + \Delta^2}. \quad (2.46)$$

Pro operátor  $\langle \hat{n}_\sigma \rangle$  platí vztah plynoucí z Källén–Lehmannovy spektrální reprezentace :

$$\langle \hat{n}_{d\sigma} \rangle = \int d\omega n_F(\omega) A_{d\sigma}(\omega), \quad (2.47)$$

kde za  $n_F(\omega)$  je Fermiho funkce, která při nulové teplotě má tvar :

$$n_F(\omega) = \theta(-\omega). \quad (2.48)$$

$A_{d\sigma}(\omega)$  je výše zavedená funkce spektrální hustoty.

Když za toto dosadíme do integrálu, platí:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_{d\sigma} \rangle &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 d\omega \frac{\Delta}{(\omega - \epsilon - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle)^2 + \Delta^2} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 d\omega \frac{1}{\Delta \left( \frac{\omega - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle}{\Delta} \right)^2 + 1} \\ &= \frac{1}{\pi} \left[ \arctan \left( \frac{\omega - \epsilon_d - U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle}{\Delta} \right) \right]_{-\infty}^0 \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan \left( \frac{\epsilon_d + U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle}{\Delta} \right). \end{aligned} \quad (2.49)$$

S použitím vztahu:

$$\cot \left( \frac{\pi}{2} - \arctan(x) \right) = x \quad (2.50)$$

dostáváme:

$$\begin{aligned} \cot(\pi \langle \hat{n}_{d\sigma} \rangle) &= \cot \left( \frac{\pi}{2} - \arctan \left( \frac{\epsilon_d + U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle}{\Delta} \right) \right) = \frac{\epsilon_d + U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle}{\Delta} \\ \rightarrow \langle \hat{n}_{d\sigma} \rangle &= \frac{1}{\pi} \operatorname{arccot} \left( \frac{\epsilon_d + U\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle}{\Delta} \right). \end{aligned} \quad (2.51)$$

Takže nakonec platí

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle &= \frac{1}{\pi} \operatorname{arccot} \left( \frac{\epsilon_d + U\langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle}{\Delta} \right), \\ \langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle &= \frac{1}{\pi} \operatorname{arccot} \left( \frac{\epsilon_d + U\langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle}{\Delta} \right). \end{aligned} \quad (2.52)$$

Definujme nyní pojmy totální obsazenost  $N = \langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle$  a magnetizaci  $M = \langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle - \langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle$  a tyto pojmy nám umožňují přepsat tyto rovnice do tvaru:

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \operatorname{arccot} \left( \frac{\epsilon_d + \frac{U}{2}(N - \sigma M)}{\Delta} \right), \\ M &= \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \sigma \operatorname{arccot} \left( \frac{\epsilon_d + \frac{U}{2}(N - \sigma M)}{\Delta} \right). \end{aligned} \quad (2.53)$$

Totální obsazenost je dána  $N = 2n$ , kde  $n$  je obsazenost jedné z hladin. Často je užitečné uvažovat poloviční obsazenost. Pro splnění této podmínky položíme  $n = \frac{1}{2}$ , díky čemuž dostáváme:

$$N = 1, \quad \epsilon_d = -\frac{U}{2} \quad (\langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \iff M = 0). \quad (2.54)$$

## 2.4 Závěry a jejich shoda s realitou

Anderson ukázal, že aproximace středního pole vede na magnetické řešení, a právě toto magnetické řešení narušuje symetrii. Jelikož příměs je obecně 0–dimenzionální systém, tak nemůže dojít k žádnému narušení symetrie. Takže zde nenastává shoda z realitou a je nutno brát v potaz další členy za Hartreeho členem, čemuž se budeme věnovat v následujících kapitolách této práce.



# Přiblížení a fyzikální podstata rovnic

## 3

### 3.1 Dysonova rovnice

Když nahlédneme do Hamannova článku [Ham69], tak zjistíme, že na Andersonův model je používán poruchový počet, kde na Andersonův Hamiltonián je pohlíženo jako na porušený Hamiltonián. Pro výslednou jednočásticovou Greenovu funkci je pak použit poruchový rozvoj  $S$ -matice, který by však bylo neefektivní sčítat přímočaře. Můžeme však tuto řadu posčítat tím způsobem, že si Feynmanovy diagramy (které byly pro tuto kapitolu čerpány z: [Augo5], [Ham69], [LB14]) rozdělíme na :

- reducibilní diagramy, což jsou diagramy, které lze rozdělit souvislou čarou na dva poddiagramy,
- ireducibilní diagramy, což jsou diagramy, které na poddiagramy již rozdělit nelze.

A výsledná Greenova funkce je poté reprezentována pomocí Dysonovy rovnice, na jejíž odvození se nyní podíváme více dopodrobna. Kdybychom se chtěli dále zabývat podrobnějšími vlastnostmi této rovnice, lze je dohledat např. v [Mah90], [AGD63].

Začneme tedy Andersonovým Hamiltoniánem, který jsme si definovali v kapitole 2:

$$\hat{H} = \hat{H}_f + \hat{H}_d + \hat{H}_{corr} + \hat{H}_{fd} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{corr}, \quad (3.1)$$

kde

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d \hat{c}_{d\sigma}^\dagger \hat{c}_{d\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} t_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{d\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} t_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{d\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.2)$$

a

$$\hat{H}_{corr} = U \hat{n}_{d\uparrow} \hat{n}_{d\downarrow}. \quad (3.3)$$

Přepíšme nyní interakční člen Hamiltoniánu:

$$\hat{H}_{corr}(\tau) = U \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau) \hat{c}_{d\uparrow}(\tau) \hat{c}_{d\downarrow}^\dagger(\tau) \hat{c}_{d\downarrow}(\tau). \quad (3.4)$$

Poznamenejme nyní, že za dominantní člen bereme  $\hat{H}_1$  a člen  $\hat{H}_{corr}$  bereme jako poruchu.

Definujme Matsubarovu Greenovu funkce celkového systému jako Dysonovu řadu:

$$G_{d\uparrow}(\tau) = -\left\langle T_\tau \left[ \hat{c}_{d\uparrow}(\tau) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau') e^{-\int_0^\beta d\tau_1 \hat{H}_{corr}(\tau_1)} \right] \right\rangle. \quad (3.5)$$

Rozviňme nyní tuto Greenovu funkci v  $S$ - maticový rozvoj:

$$\begin{aligned} G_{d\uparrow}(\tau - \tau') &= -\left\langle T_\tau \left[ \hat{c}_{d\uparrow}(\tau) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau') - \int_0^\beta d\tau_1 \hat{c}_{d\uparrow}(\tau) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau') \hat{H}_{corr}(\tau_1) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \hat{c}_{d\uparrow}(\tau) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau') \hat{H}_{corr}(\tau_1) \hat{H}_{corr}(\tau_2) \right] \right\rangle \dots \\ &= G_{0,d\uparrow}(\tau - \tau') + \int_0^\beta d\tau_1 \langle T_\tau [U \hat{c}_{d\uparrow}(\tau) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{d\uparrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau') \hat{c}_{d\downarrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\downarrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\uparrow}(\tau')] \rangle \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \langle T_\tau [\hat{c}_{d\uparrow}(\tau) U \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{d\uparrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{d\downarrow}(\tau_1) \\ &\quad \times U \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau_2) \hat{c}_{d\uparrow}(\tau_2) \hat{c}_{d\downarrow}^\dagger(\tau_2) \hat{c}_{d\downarrow}(\tau_2) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau')] \rangle \dots \end{aligned} \quad (3.6)$$

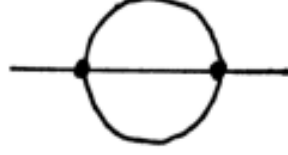
Na jednotlivé členy použijme Wickův theoreém. Jelikož pro členy vyšších řádů by bylo názorné použití zdlouhavé a komplikované, demonstrujme to pouze na členech maximálně do druhého řádu. Pro přiblížení FLEX, kterým se budeme zabývat v pozdějších kapitolách, se však potřebujeme dostat jen do řádu 2. Pro první člen se zabývejme diagramem, jehož tvar je uveden na následujícím obrázku:



což je Feynmanův diagram s faktorem symetrie je  $D = 1$ . Takže celý Wickův rozvoj tohoto členu bude vypadat následovně:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{D} \langle T_\tau [\hat{c}_{d\uparrow}(\tau) U \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{d\uparrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\downarrow}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{d\downarrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau')] \rangle \\ &= -U \langle T_\tau [\hat{c}_{d\uparrow}(\tau) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau_1)] \rangle \langle T_\tau [\hat{c}_{d\uparrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau')] \rangle \langle T_\tau [\hat{c}_{d\downarrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\downarrow}^\dagger(\tau_1)] \rangle \\ &= U G_{0,d\uparrow}(\tau - \tau_1) G_{0,d\uparrow}(\tau_1 - \tau') n_F(\epsilon_d). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Ve druhém členu rozvoje se budeme opět zabývat konkrétnějším případem, který je uveden na následujícím obrázku:



což je Saturnový Feynmanův diagram, jehož faktor symetrie je  $D = 1$ . Takže pro Wickův rozvoj tohoto členu dostáváme:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{D} \langle T_\tau [\hat{c}_{d\uparrow}(\tau) U \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{d\uparrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\downarrow}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{d\downarrow}(\tau_1) U \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau_2) \hat{c}_{d\uparrow}(\tau_2) \hat{c}_{d\downarrow}^\dagger(\tau_2) \\
 & \times \hat{c}_{d\downarrow}(\tau_2) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau')] \rangle \\
 & = -U^2 \langle T_\tau [\hat{c}_{d\uparrow}(\tau) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau_1)] \rangle \langle T_\tau [\hat{c}_{d\uparrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau_2)] \rangle \langle T_\tau [\hat{c}_{d\downarrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\downarrow}^\dagger(\tau_2)] \rangle \\
 & \langle T_\tau [\hat{c}_{d\downarrow}(\tau_2) \hat{c}_{d\downarrow}^\dagger(\tau_1)] \rangle \langle T_\tau [\hat{c}_{d\uparrow}(\tau_1) \hat{c}_{d\uparrow}^\dagger(\tau')] \rangle \\
 & = -U^2 G_{0,d\uparrow}(\tau - \tau_1) G_{0,d\uparrow}(\tau_1 - \tau_2) G_{0,d\downarrow}(\tau_1 - \tau_2) G_{0,d\downarrow}(\tau_2 - \tau_1) G_{0,d\uparrow}(\tau_2 - \tau') \\
 & \quad (3.8)
 \end{aligned}$$

a takto bychom postupovali dále. Dosadíme tyto členy do  $S$ -maticového rozvoje:

$$\begin{aligned}
 G_{d\sigma}(\tau - \tau') &= G_{0,d\uparrow}(\tau - \tau') + U \int_0^\beta G_{0,d\uparrow}(\tau - \tau_1) G_{0,d\uparrow}(\tau_1 - \tau') n_F(\epsilon_d) \\
 &+ U^2 \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 G_{0,d\uparrow}(\tau - \tau_1) G_{0,d\uparrow}(\tau_1 - \tau_2) G_{0,d\downarrow}(\tau_1 - \tau_2) G_{0,d\downarrow}(\tau_2 - \tau_1) \\
 &\times G_{0,d\uparrow}(\tau_2 - \tau') \dots \\
 & \quad (3.9)
 \end{aligned}$$

Pomocí Fourierovy transformace, která je definovaná pomocí rovnic 2.22 a 2.24 v kapitole 2 přetransformujeme tento poruchový rozvoj do Matsubarových frekvencí:

$$\begin{aligned}
 G_{d\uparrow}(\tau - \tau') &= G_{0,d\uparrow}(\tau - \tau') + U \int_0^\beta G_{0,d\uparrow}(\tau - \tau_1) G_{0,d\uparrow}(\tau_1 - \tau') n_F(\epsilon_d) \\
 &+ U^2 \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 G_{0,d\uparrow}(\tau - \tau_1) G_{0,d\uparrow}(\tau_1 - \tau_2) G_{0,d\downarrow}(\tau_1 - \tau_2) G_{0,d\downarrow}(\tau_2 - \tau_1) \\
 &\times G_{0,d\uparrow}(\tau_2 - \tau') \\
 &\rightarrow \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G_{0,d\uparrow}(i\omega_n) e^{-i\omega_n(\tau - \tau')} = \sum_{\omega_n} \frac{1}{\beta} e^{-i\omega_n(\tau - \tau')} G_{0,d\uparrow}(i\omega_n) \\
 &+ \frac{U}{\beta} \sum_{\omega_{n_1}} e^{-i(\tau - \tau')\omega_{n_1}} G_{0,d\uparrow}^2(i\omega_{n_1}) n_F(\epsilon_d) \\
 &\frac{U^2}{\beta} \sum_{\omega_{n_1}} e^{-i\omega_{n_1}(\tau - \tau')} G_{0,d\uparrow}^2(i\omega_{n_1}) \\
 &\times \frac{1}{\beta^2} \sum_{\omega_{n_2}\omega_{n_3}} G_{0,d\uparrow}(i\omega_{n_2}) G_{0,d\downarrow}(i\omega_{n_3}) G_{0,d\downarrow}(i(-\omega_{n_1} + \omega_{n_2} + \omega_{n_3})) \dots,
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

kde jsme použili  $\omega_{n_1} = \omega_{n_5}$  a rovněž jsme využili následujícího poznatku:

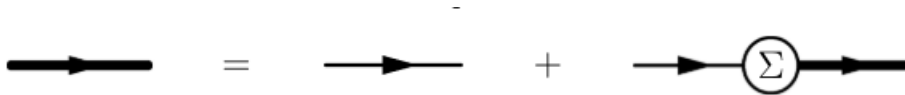
$$\frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{-i\tau(\omega_{n_1} - \omega_{n_2})} = \delta_{\omega_{n_1}, \omega_{n_2}}. \tag{3.11}$$

Jak už bylo zmíněno výše, místo abychom pracně získali výslednou Greenovu funkci, tím, že budeme počítat komplexní Feynmanovy diagramy, tak budeme počítat pouze ireducibilní diagramy. Tyto ireducibilní diagramy tvoří self-energie  $\Sigma$ :

$$G_{d\uparrow}(i\omega_n) = \frac{G_{0,d\uparrow}(i\omega_n)}{1 + G_{0,d\uparrow}(i\omega_n)\Sigma(i\omega_n)}, \tag{3.12}$$

kde :

$$\Sigma(i\omega_n) = U n_F(\epsilon_d) + \frac{U^2}{\beta^2} \sum_{\omega_{n_2}\omega_{n_3}} G_{0,d\uparrow}(i\omega_{n_2}) G_{0,d\downarrow}(i\omega_{n_3}) G_{0,d\downarrow}(i(-\omega_{n_1} + \omega_{n_2} + \omega_{n_3})) \dots \tag{3.13}$$



Obrázek 3.1: Grafická reprezentace Dysonovy rovnice [Aug05]



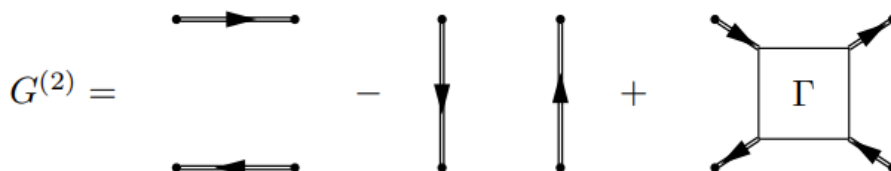
## 3.2 Bethe-Salpeterova rovnice

Podívejme se nyní na dvoučásticový případ. Jako jsme naznačili myšlenku odvození Dysonovy rovnice, tak existuje i dvoučásticová obdoba této rovnice, která se nazývá Bethe-Salpeterova rovnice. Jelikož tato problematika je už komplikovanější, pomozme si proto grafickou reprezentací pomocí Feynmanových diagramů.

Začneme tím, že si zavedeme dvoučásticovou Greenovu funkci nejdříve obecně algebraicky (kde informace jsme čerpali z [Zag14]):

$$G(1, 2, 1', 2') = G(1, 1')G(2, 2') - G(1, 2')G(2, 1') + \int d3 \int d3' \int d4 \int d4' G(1, 3)G(2, 4)i\Gamma(33'; 44')G(3', 1')G(4', 2'). \quad (3.14)$$

A nyní reprezentujme tuto funkci obecně graficky:



Obrázek 3.2: Grafická reprezentace dvou částicové Greenovy funkce

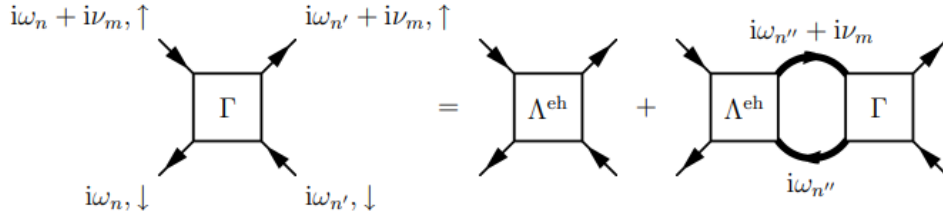
Když se podíváme na tento obrázek a rovnici, tak vidíme, že tato rovnice se skládá stejně jako v případě Dysonovy rovnice z ireducibilních a reducibilních částí. První dva členy na obrázku jsou oddělené. Reducibilních členů může být několik podle druhu interakce, kterou reprezentují a jakým směrem směřují. Uvedme si zde pár případů pro vertikální a horizontální členy:

- horizontální reprezentující interakci elektron-díra je reprezentován horizontálním diagramem, kde jednotlivé šipky mají opačný směr,
- horizontální reprezentující elektron-elektronovou interakci,
- vertikální.

Ireducibilní části se v tomto případě říká ireducibilní vrchol (jinak vrcholová funkce)  $\Gamma$ , který je dvoučásticovou obdobou self-energie v Dysonově rovnici 3.12. Tento vrchol  $\Gamma$  lze rozdělit na součty dvoučásticově reducibilních a ireducibilních diagramů. Součty dvoučásticově ireducibilních diagramů budeme označovat  $\Lambda^{ee}$  v případě, kdy tento vrchol bude reprezentovat elektron-elektronovou interakci, nebo

$\Lambda^{eh}$  v případě reprezentace interakce elektron-díra. Podívejme se více dopodrobna na Bethe-Salpeterovu rovnici pro interakci elektron-díra.

Bethe-Salpeterova rovnice je obdobou Dysonovy rovnice pro dvoučásticový případ. Tak jako jsme mohli poruchovou řadu pro jednočásticovou Greenovu funkci posčítat pomocí Dysonovy rovnice, tak můžeme totéž udělat s poruchovou řadou pro dvoučásticovou Greenovu funkci. Jak jsme již uvedli dříve, tak dvoučásticový ireducibilní vrchol lze rozdělit na dvoučásticově reducibilní a ireducibilní část. Když nebudeme uvažovat vnější linie, jako jsme to udělali dříve, tak vlastně dostaneme kompletní grafickou reprezentaci Bethe-Salpeterovy rovnice:



Obrázek 3.3: Grafická reprezentace Bethe-Salpeterovy rovnice

Analytická reprezentace grafického vyjádření na 3.2 má potom tvar:

$$\begin{aligned} \Gamma(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m)_{\sigma, \sigma'} &= \Lambda^{eh}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) + \frac{1}{\beta} \sum_{n''} \Lambda^{eh}(i\omega_n, i\omega_{n''}, i\nu_m) G_{d\sigma}(i\omega_{n''} + i\nu_m) \\ &\times G_{d\sigma'}(i\omega_{n''}) \Gamma_{\sigma, \sigma'}(i\omega_{n''}, i\omega_{n'}, i\nu_m), \end{aligned} \quad (3.15)$$

kde :

$$\nu_m = \frac{2m\pi}{\beta} \quad (3.16)$$

je bosonová Matsubarova frekvence.

Odvození této rovnice je možno provést mnoha způsoby, což jsou věci, které vyžadují poměrně složitý matematický aparát. Proto se odvozením této rovnice v této práci zabývat nebudeme.

Jelikož ze samotné definice Bethe-Salpeterovy rovnice vyplývá, že se jedná o integrální rovnici, tak ji není možné obecně analyticky řešit.

Jako jsme se zde podívali na Bethe-Salpeterovu rovnici pro elektron-děrový kanál, tak bychom ji mohli rovněž reprezentovat pro různé druhy interakcí a kanálů (např. elektron-elektronový).

### 3.3 Swinger-Dysonova rovnice

Když se podíváme na rovnice odvozené dříve, tak obsahují Greenovu funkci, a to jak jednočásticovou tak dvoučásticovou. Existují však vztahy, které obě tyto funkce propojují, a to například v kapitole 2, kdybychom nepoužívali aproximaci středního pole, tak za interakční člen je pak rozuměn  $U$ -násobek dvoučásticové Greenovy funkce, kde  $U$  je síla interakce. Tato funkce vznikla odvozením pomocí Heisenbergova obrazu (viz rovnice 2.8). Když tuto rovnici budeme nadále upravovat, tak získáme Swinger-Dysonovu rovnici. Pojdme si ten průběh alespoň naznačit.

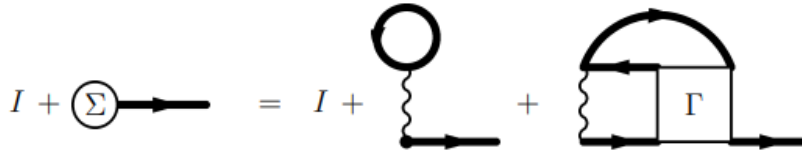
Začněme nejdříve tím, že si napíšeme vztah pro plnou Greenovu funkci pro Andersonův model, kde interakční člen jsme již rozepsali a přetransformovali do reprezentace Matsubarových frekvencí:

$$(i\omega_n - \epsilon_d + i\Delta \text{sign}(\omega_n))G_{d\sigma}(i\omega_n) = 1 - \frac{U}{\beta^2} \sum_{m,n_2} G_{d\sigma,\sigma'}(i\omega_n + i\nu_m, i\omega_n, i\omega_{n_2} - i\nu_m), \quad (3.17)$$

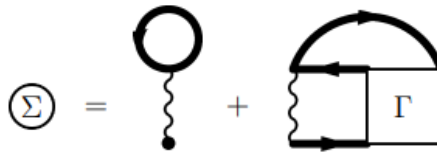
kde za  $(i\omega_n - \epsilon_d + i\Delta \text{sign}(\omega_n))^{-1}$  budeme rozumět neinteragující Greenovu funkci  $G_{0,d\sigma}$ , která se liší od té, kterou jsme definovali v téže kapitole. Pod symbolem  $\Sigma(i\omega_n)$  budeme rozumět rovněž self-energii, ale narozdíl od rovnice 2.32 budeme rozumět její příspěvek z interakce na příměsí. Za  $G_{d\sigma}(i\omega_n)$  budeme rozumět Greenovu funkci, kterou jsme dostali z Dysonovy rovnice 3.12:

$$G_{0,d\sigma}^{-1}(i\omega_n)G_{d\sigma}(i\omega_n) = 1 - \frac{U}{\beta^2} \sum_{m,n_2} G_{d\sigma,\sigma'}(i\omega_n + i\nu_m, i\omega_n, i\omega_{n_2} - i\nu_m). \quad (3.18)$$

Podrobné rozložení pravé strany pomocí vrcholové funkce zde provádět nebudeme, ale je to možno dohledat (třeba v [Zag14]). Každopádně ten rozklad pomocí vrcholové funkce můžeme reprezentovat podstatně snadněji pomocí Feynmanových diagramů (které pro tuto kapitolu byly čerpány z [Aug05]):



kde  $I$  je grafická interpretace 1, kterou když odečteme od obou stran rovnice a obě strany rovnice na to vydělíme plným propagátorem, pak dostaneme:



Swinger-Dysonova rovnice v algebraické formě má potom tvar:

$$\begin{aligned} \Sigma(i\omega_n) = & U \langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle \\ & + \frac{U}{\beta^2} \sum_{m,n_2} G_{d\sigma}(i\omega_n + i\nu_m) G_{d\sigma'}(i\omega_{n_2} + i\nu_m) \\ & \times G_{d\sigma'}(i\omega_{n_2}) \Gamma_{\sigma,\sigma'}(i\omega_n + i\nu_m, i\omega_n, i\omega_{n_2} + i\nu_m). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Poznamenejme na závěr, že mimo Hartreeho členu může před vrcholovou funkcí vystupovat i rovněž Fockův výměnný člen, což vychází přímo z obecné definice ireducibilní dvoučásticové Greenovy funkce (viz rovnice 3.14), ale jelikož je v tomto případě uvažována pouze interakce mezi částicemi s opačnými spiny, tak tento člen bude nakonec nula.

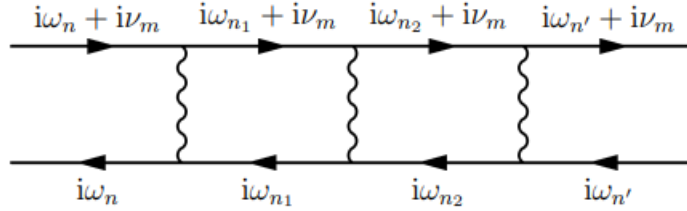
# Přiblížení flutující výměny (FLEX)

## 4

Přiblížení flutující výměny vychází z RPA (Ranom phase aproximation) a aproximace stíněné interakce, kde dvoučasticově ireducibilní část  $\Lambda^{eh}$  nahradíme holou interakcí. Použijme ve zbytku této práce značení ze Suhlova článku z roku 1967 [Suh67], kde interakce je značena  $V$  :

$$\Lambda^{eh} = V.$$

Jak už bylo ukázáno výše, tak Bethe-Salpeterova rovnice reprezentuje součetsoučet všech dvoučasticově reducibilních diagramů s danými dvoučasticově ireducibilními pro elektrony z opačným spinem:



Obrázek 4.1: Příspěvek ireducibilního členu 3. řádu[Augos]

Vrcholová funkce je potom:

$$\begin{aligned} \Gamma(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m)_{\sigma, -\sigma} &= V - \frac{V}{\beta} \sum_{n_1} G_{d\sigma}(i\omega_{n_1} + i\nu_m) G_{d-\sigma}(i\omega_{n_1}) V \\ &+ \frac{V}{\beta} \sum_{n_1} G_{d\sigma}(i\omega_{n_1} + i\nu_m) G_{d-\sigma}(i\omega_{n_1}) V \frac{1}{\beta} \sum_{n_2} G_{d\sigma}(i\omega_{n_2} + i\nu_m) G_{d-\sigma}(i\omega_{n_2}) V + \dots \end{aligned} \quad (4.1)$$

Povšimněme si, že v tomto případě je vrcholová funkce závislá jen na jedné proměnné a to  $i\nu_m$ . S tímto poznatkem dostává tato vrcholová funkce charakter geome-

trické řady. Definujme proto funkci:

$$\chi_0(i\nu_m) = -\frac{1}{\beta} \sum_n G_{d\sigma}(i\omega_n + i\nu_m) G_{d-\sigma}(i\omega_n). \quad (4.2)$$

a vrcholová funkce má potom tvar:

$$\Gamma_{\sigma,-\sigma}(i\nu_m) = \frac{V}{1 - V\chi_0(i\nu_m)}. \quad (4.3)$$

Matsubarovy Greenovy funkce jsou značeny v Suhlově článku [Suh67] :

$$G_{d\sigma}(i\omega_n) = h(i\omega_n). \quad (4.4)$$

Kvůli následné numerice bylo vhodné převést systém do bezrozměrného tvaru a do reálných veličin. Pro Greenovu funkci je tento převod dán následovně:

$$g(n) = ih(i\omega_n) \left( \frac{V}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} = iG_{d\sigma}(i\omega_n) \left( \frac{V}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.5)$$

Zaveďme nyní v duchu tohoto značení Matsubarovu Greenovu funkci pro Andersonův model, ale pod  $\Sigma$  budeme rozumět příspěvky k self-energii, které jsou navíc k Harteeho členu. Rovněž předpokládáme to pro symetrický Andersonův model:

$$h(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + i\Delta \text{sign}(i\omega_n) - \Sigma(i\omega_n)}. \quad (4.6)$$

Pro inverzi této funkce dostáváme :

$$\frac{1}{h(i\omega_n)} = i\omega_n + i\Delta \text{sign}(\omega_n) - \Sigma(i\omega_n) = i \left( \frac{(2n+1)\pi}{\beta} + \text{sign}(2n+1)\Delta \right) - \Sigma(i\omega_n). \quad (4.7)$$

Zaveďme nyní Greenovu funkci  $h_0(i\omega_n)$ , která oproti rovnici 2.30 z kapitoly 2 bude mít zahrnutou hybridizační energii  $\Delta$ . Nebudeme zde ale uvažovat zahrnutí příspěvku self-energie z interakce na příměsí:

$$h_0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + i\Delta \text{sign}(\omega_n)} = \frac{1}{i \left( \frac{(2n+1)\pi}{\beta} + \text{sign}(2n+1)\Delta \right)}. \quad (4.8)$$

Pomocí vrcholové funkce  $\Gamma_{\sigma,-\sigma}(i\nu_m)$  spočteme self-energii, když ji spolu s funkcí  $\chi_0(i\nu_m)$  dosadíme do Swinger-Dysonovy rovnice (viz rovnice 3.12). Mějme na paměti, že Hatreeho člen jsme již započítali do  $h_0(i\omega_n)$ :

$$\Sigma(i\omega_n) = \frac{V}{\beta} \sum_m h(i\omega_n + i\nu_m) \Gamma_{\sigma,-\sigma}(i\nu_m) \chi_0(i\nu_m) = \frac{V^2}{\beta} \sum_m h(i\omega_n + i\nu_m) \frac{\chi_0(i\nu_m)}{1 - V\chi_0(i\nu_m)}. \quad (4.9)$$

Zavedme součin  $\Gamma(i\nu_m)\chi_0(i\nu_m)$ , který budeme označovat jako  $\chi$ :

$$\chi(i\nu_m) = \frac{V\chi_0(i\nu_m)}{1 - V\chi_0(i\nu_m)} \quad (4.10)$$

Když tuto self-energii dosadíme do rovnice 4.7, dostáváme:

$$\frac{1}{h(i\omega_n)} = i\omega_n + i\Delta \text{sign}(\omega) - \Sigma(i\omega_n) = \frac{1}{h_0(i\omega_n)} - \frac{V}{\beta} \sum_m h(i\omega_n + i\nu_m)\chi(i\nu_m). \quad (4.11)$$

Vynásobme tuto rovnici faktorem  $-i\left(\frac{\beta}{V}\right)^{\frac{1}{2}}$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{g(n)} &= \frac{1}{g_0(n)} + i\frac{V^2}{\beta}\left(\frac{\beta}{V}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_m h(i\omega_n + i\nu_m)\chi(i\nu_m) \\ &\rightarrow \frac{1}{g(n)} = \frac{1}{g_0(n)} + i\frac{V}{\beta}\left(\frac{\beta}{V}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_m h(i\omega_n + \nu_m)\chi(i\nu_m) \frac{-i\left(\frac{\beta}{V}\right)^{\frac{1}{2}}}{-i\left(\frac{\beta}{V}\right)^{\frac{1}{2}}} \\ &\rightarrow \frac{1}{g(n)} = \frac{1}{g_0(n)} + \sum_m g(n+m)\chi(i\nu_m). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Když nahlédneme opět do Suhlova článku [Suh67], zjistíme, že pod součinem  $V\chi(i\nu_m)$  je myšlena funkce  $\gamma(m)$ . Pro tuto funkci tedy nakonec dostáváme:

$$\gamma(m) = \frac{\sum_n g(n)g(n+m)}{1 - \sum_n g(n)g(n+m)}, \quad (4.13)$$

kde suma  $\sum_n$  je ve stejném článku značena jako  $s(m)$ . Když pro změnu nahlédneme do Hamannova článku z roku 1969 [Ham69], vidíme, že před sumou reprezentující self-energii je brán v potaz numerický faktor  $\frac{3}{4}$  místo  $\frac{3}{2}$  u Suhla, což na samotný numerický výpočet zásadní vliv nemá:

$$\frac{1}{g(n)} = \frac{1}{g_0(n)} + \frac{3}{4} \sum_m \gamma(m)g(n+m). \quad (4.14)$$

Vyjměme ze sumy na pravé straně člen pro  $m = 0$ , který je nejvyšší, což je také opět v souladu se Suhlovým článkem:

$$\frac{1}{g(n)} - \frac{3}{4}\gamma(0)g(n) = \frac{1}{g_0(n)} + \frac{3}{4} \sum_{m \neq 0} \gamma(m)g(n+m), \quad (4.15)$$

kde výraz

$$\frac{1}{g_0(n)} + \frac{3}{4} \sum_{m \neq 0} \gamma(m)g(n+m) \quad (4.16)$$



je v Levinově a Suhlově článku z roku 1968 [LS68] označován jako  $B(n)$ . Vydělme obě strany rovnice  $g(n)$ :

$$\left(\frac{1}{g(n)}\right)^2 - \frac{3}{4}\gamma(0) = \frac{B(n)}{g(n)} \rightarrow \left(\frac{1}{g(n)}\right)^2 - \frac{B(n)}{g(n)} = \frac{3}{4}\gamma(0). \quad (4.17)$$

Doplňme levou stranu rovnice na čtverec:

$$\left(\frac{1}{g(n)} - \frac{B(n)}{2}\right)^2 - \left(\frac{B(n)}{2}\right)^2 = \frac{3}{4}\gamma(0). \quad (4.18)$$

Odtud dostáváme:

$$g(n) = \frac{2}{(B(n) \pm \sqrt{(B(n))^2 + 3\gamma(0)})},$$

kde znaménko před odmocninou je určeno znaménkem hodnoty funkce  $B(n)$ .

Napišme nyní tuto sadu rovnic pohromadě:

$$g(n) = \frac{2}{(B(n) + \text{sign}(B(n))\sqrt{(B(n))^2 + 3\gamma(0)})}, \quad (4.19)$$

$$B(n) = \frac{1}{g_0(n)} + \frac{3}{4} \sum_{m \neq 0} \gamma(m)g(n+m), \quad (4.20)$$

$$g_0^{-1}(n) = \frac{(2n+1)}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} + \text{sign}(2n+1)\Delta\left(\frac{\beta}{V}\right), \quad (4.21)$$

$$\gamma(m) = \frac{\sum_n g(n)g(n+m)}{1 - \sum_n g(n)g(n+m)}, \quad (4.22)$$

$$s(m) = \sum_n g(n)g(n+m). \quad (4.23)$$

Dostali jsme nyní soustavu nelineárních rovnic, které jsou obsaženy v článkách [Suh67] a [LS68]. Řešením těchto rovnic se budeme zabývat v následujících kapitolách a jelikož tyto rovnice jsou nelineární, tak bude nutné použít numerických metod a iteračních cyklů.

# Analytické řešení

## 5

Když se podíváme na rovnice odvozené v kapitole 4, tak zjistíme, že se jedná o soustavu nelineárních rovnic, které nelze řešit obecně analyticky. Podívejme se však v této kapitole na analytické řešení zjednodušeného případu s nulovou hybridizační energií  $\Delta = 0$ :

$$g_0^{-1}(n) = \frac{(2n+1)}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} + \text{sign}(2n+1)\Delta\left(\frac{\beta}{V}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.1)$$

Začneme tak, že rovnici 5.1 s  $\Delta = 0$  dosadíme do rovnice 4.23 za  $g(n)$ :

$$s(m) = \sum_n g(n)g(n+m) = \frac{V}{\beta} \sum_n \frac{1}{\frac{(2n+1)\pi}{\beta}} \frac{1}{\frac{(2(n+m)+1)\pi}{\beta}}. \quad (5.2)$$

Zavedme opět Matsubarovu Greenovu funkci pro neinteragující elektrony  $h(i\omega_n)$ :

$$h(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E}, \quad (5.3)$$

kde  $E$  je energie dočasně zavedená pro případ, kdy budeme potřebovat rozdělit pól druhého řádu na dva póly prvního řádu. Nakonec pošleme energii k nule. Dosadíme ji do definice funkce  $s(m)$ :

$$s(m) = -\frac{V}{\beta} \sum_n \frac{1}{i\omega_n - E} \frac{1}{i\omega_{n+m} - E'} = -\frac{V}{\beta} \sum_n \frac{1}{i\omega_n - E} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_m - E'}. \quad (5.4)$$

Přetransformujme tuto sumu na konturový integrál kolem imaginární osy přidáním Fermiho funkce, která má póly ve fermionových Matsubarových frekvencích:

$$-\frac{V}{\beta} \sum_n \frac{1}{i\omega_n - E} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_m - E'} = V \oint_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{z - E} \frac{1}{z + i\nu_m - E'}. \quad (5.5)$$

Spočítejme tento integrál použitím reziduové věty, kde jednotlivá rezidua zjistíme pomocí pólů (pól  $z_0$  najdeme roztažením kontury od imaginární osy do nekonečna) a vztahu :

$$r_{z_0} = \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0)f(z). \quad (5.6)$$

V našem konkrétním případě jsou póly  $z_1 = E$  a  $z_2 = E' - i\nu_m$ . Jednotlivá rezidua potom vychází:

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow z_1} (z - z_1)f(z) &= \lim_{z \rightarrow E} (z - E) \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{z - E} \frac{1}{z + i\nu_m - E'} \\ &= \lim_{z \rightarrow E} \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{z + i\nu_m - E'} = \lim_{z \rightarrow E} \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{e^{z\beta} + 1} \frac{1}{z + i\nu_m - E} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{e^{\beta E} + 1} \frac{1}{E + i\nu_m - E'} \end{aligned} \quad (5.7)$$

a

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow z_2} (z - z_2)f(z) &= \lim_{z \rightarrow E' - i\nu_m} (z - E' + i\nu_m) \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{z - E} \frac{1}{z + i\nu_m - E'} \\ &= \lim_{z \rightarrow E' - i\nu_m} \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{z - E} = \lim_{z \rightarrow E' - i\nu_m} \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{e^{z\beta} + 1} \frac{1}{z - E} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{e^{\beta(E' - i\nu_m)} + 1} \frac{1}{E' - i\nu_m - E}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Poznamenejme, že platí:

$$e^{-\beta i\nu_m} = 1, \quad (5.9)$$

čímž dostáváme :

$$\begin{aligned} s(m) &= V \int_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{z - E} \frac{1}{z + i\nu_m - E'} \\ &= -V \left( \frac{1}{e^{\beta E} + 1} \frac{1}{E + i\nu_m - E'} + \frac{1}{e^{\beta E'} + 1} \frac{1}{E' - i\nu_m - E} \right) \\ &= -V \left( \frac{n_F(E) - n_F(E')}{E + i\nu_m - E'} \right) \end{aligned} \quad (5.10)$$

pro  $E, E' \rightarrow 0$ .

Vidíme, že pro  $m \neq 0$  je limita triviální a dá  $s(m) = 0$ . Pro  $m = 0$  provedme limitu ve dvou krocích:

$$\begin{aligned} \lim_{E \rightarrow E'} -V \left( \frac{n_F(E) - n_F(E')}{E + i\nu_m - E'} \right) &= \lim_{E \rightarrow E'} -V \left( \frac{\frac{1}{e^{\beta E} + 1} - \frac{1}{e^{\beta E'} + 1}}{E + i\nu_m - E'} \right) \\ &= \lim_{E \rightarrow E'} -V \left( \frac{\frac{d}{dE} \left( \frac{1}{e^{\beta E} + 1} - \frac{1}{e^{\beta E'} + 1} \right)}{\frac{d}{dE} (E + i\nu_m - E')} \right) = \frac{V\beta e^{\beta E'}}{(e^{\beta E'} + 1)^2}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Když pak uděláme limitu  $E' \rightarrow 0$ :

$$s(0) = \lim_{E' \rightarrow 0} \frac{V\beta e^{\beta E'}}{(e^{\beta E'} + 1)^2} = \frac{V\beta}{4}. \quad (5.12)$$

Provedme nyní zkoušku tak, že položíme  $m = 0$  v rovnici 4.23:

$$s(0) = \sum_n g^2(n) = \frac{\beta V}{\pi^2} \sum_n \frac{1}{(2n+1)^2} = \frac{2\beta V}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2}. \quad (5.13)$$

Když se na tuto sumu podíváme dopodrobna, zjistíme, že obsahuje liché členy Riemannovy funkce zeta:  $\zeta()$  pro hodnotu 2, kde součet této řady je znám jako Basilejský problém:

$$\zeta(2) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}. \quad (5.14)$$

a tato řada se dá rozložit na sudé a liché členy:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2} + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}. \quad (5.15)$$

Pro součet sudých členů platí :

$$\frac{1}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{24}, \quad (5.16)$$

a pro součet lichých členů tedy nakonec dostáváme:

$$\frac{1}{(2n+1)^2} = \frac{\pi^2}{6} - \frac{\pi^2}{24} = \frac{\pi^2}{8}. \quad (5.17)$$

Tedy výsledek je nakonec:

$$s(0) = \frac{2\beta V}{\pi^2} \sum_n \frac{1}{(2n+1)^2} = \frac{\beta V}{4}, \quad (5.18)$$

což je v souladu s rovnicí 5.12.

Poznamenejme ještě, že funkci  $s(m)$  můžeme vypočítat též pro  $\Delta > 0$  v rovnici 5.1 analyticky a to řešení vede na Sommerfeldův rozvoj [LL80]. Z tohoto řešení bychom dostali, že pro velká  $m$  funkce  $s(m)$  klesá jako  $\frac{1}{m^2}$  narozdíl od  $g(n)$ , která pro vysoké hodnoty  $n$  klesá jako  $\frac{1}{n}$ . Kvůli rychlejšímu klesání lze potom v numerických výpočtech uvažovat menší rozsah  $m$  než  $n$ .

# Numerické řešení

## 6

Soustavu rovnic 4.19 až 4.23 nelze vyřešit analyticky, a proto je nutno využít numerických metod a iteračních postupů. Podívejme se v této kapitole, jaký numerický výpočet jsme použili a jaké algoritmy byly použity. Za jazyk byl kvůli své jednoduché syntaxi a univerzálnosti použit Python, který ale má nevýhodu, že je dosti pomalý ve srovnání s jazyky např. C, C++ nebo Fortran. Proto byl na výkonově náročné výpočty použit jazyk Cython, který má stále relativně jednoduchou syntaxi a má výpočetní složitost stejnou jako právě jazyk C.

Když se podíváme na rovnice odvozené v kapitole 4, zjistíme, že mezi rovnicemi 4.19, 4.20, 4.22, a 4.21 existují vzájemné vztahy a závislosti. V rovnici 4.23 je  $s(m)$  vyjádřeno pomocí  $g(n)$  a v rovnici 4.22 je  $\gamma(m)$  vyjádřeno pomocí funkce  $s(m)$ . Tyto rovnice tedy vytvářejí iterační systém, kde se vzájemně ovlivňují a generují nové funkce  $g(n)$  a  $\gamma(m)$ . Jedná se o dvě vnořené iterační smyčky, z nichž každá má svou zastavovací podmínku: iterace se zastaví, když následné kroky vykazují menší než určitou procentuální odchylku. V této kapitole se podrobně zaměříme na řešení tohoto systému.

## 6.1 Implementace Rovnic

Celková implementace rovnic je rozdělena na 2 případy. První případ je, když se jedná o nultou iteraci, a tedy o neinteragující případ, který je reprezentován rovnicí 4.21. Tuto rovnici následně dosadíme do rovnice 4.20, která v tomto případě je dána následovně:

$$B(n) = \frac{1}{g_0(n)}. \quad (6.1)$$

Tuto rovnici dosadíme do rovnice 4.19 a z toho pak jsme schopni vytvořit nultou iteraci rovnice 4.22 s mezikrokem v rovnici 4.23.

Podívejme se nyní na vybrané části kódu popisující tuto problematiku.

Implementace rovnic 4.21 a 4.19 byla zvolena následovně:

```
def double g_o_inverse(int n, double beta):  
    return ((2 * n + 1) * pi) / sqrt(V * beta) +
```

```
Delta * sqrt(beta / V) * np.sign(2 * n + 1)
```

```
cdef double g(int n, double beta):
    cdef double g_o_inv = g_o_inverse(n, beta)
    return 2 / (g_o_inv + np.sign(g_o_inv) *
        sqrt(g_o_inv**2 +
            3 * gamma_o))
```

Vzniklá funkce  $g(n)$  se dosadí do rovnice 4.23:

```
cdef double s(int m, int max_n, double beta):
    cdef int n
    cdef double suma = 0
    for n in range(-max_n, max_n + 1):
        suma += g(n, beta) * g(n + m, beta)
    return suma
```

pomocí které definujeme nultou iteraci rovnice 4.22:

```
cdef double calculate_gamma
(int m, int max_n, double beta):
    return s(m, max_n, beta)
    / (1 - s(m, max_n, beta))
```

Po získání této funkce můžeme nyní tuto rovnici dosadit do rovnice 4.20, což je právě druhý případ implementace rovnic a což jsme v kódu reprezentovali pomocí těchto funkcí a hash-tabulek:

```
cdef double B(int n, double beta, int max_m, dict
    tab_1, dict tab_2):
    return g_o_inverse(n, beta) + 0.75 * soucet_gamma
        (max_m, tab_1, tab_2, n)

cdef dict napln_tabulku_B(func, int max_n, int max_m,
    dict tab_1, dict tab_2, double beta):
    cdef dict table = {}
    for n in range(-max_n, max_n + 1):
        table[n] = func(n, beta, max_m, tab_1, tab_2)
    return table
```

a

```
cdef double soucet_gamma(int max_m, dict tabulka_1
    , dict tabulka_2, int n):
    cdef int m
```

```

cdef double suma = 0
for m in range(-max_m, max_m + 1):
    if (n + m) in tabulka_1 and m != 0:
        suma += tabulka_1[n + m] * tabulka_2[m]
return suma

```

Když se na ně podíváme podrobněji, tak rutina `napln_tabulku_B` spíš funkce  $B$  v diskrétních hodnotách argumentu, kde klíčem  $n$  je reprezentována hodnota funkce  $B$  v  $n$ . Za jednotlivé hodnoty byla zvolena celá čísla. Tato rutina se může teď zdát poněkud zbytečná, ale později, až se podíváme na jednotlivé smyčky, se ukáže její užitečnost zejména kvůli přístupu k jednotlivým hodnotám.

Rutina `soucet_gamma` popisuje sumu v rovnici 4.20. Jako vstupní parametry jsou mimo jiné i hash-tabulky, které reprezentují hodnoty funkcí  $\gamma$  z předchozí iterace.

Po získání hodnot funkce  $B(n)$  můžeme tuto funkci dosadit do rovnice 4.19:

```

def new_g(n, beta, B):
    return 2 / (B + np.sign(B) * np.sqrt(B**2 + 3 * gamma_o))

```

a kterou opět dosadíme do rovnice 4.20 a tímto způsobem budeme iterovat, dokud není rozíl mezi oběma iteracemi menší než daná zastavovací podmínka. Těmito algoritmy se podrobněji budeme zabývat později.

Po získání stabilní funkce  $g(n)$  můžeme tuto funkci dosadit do rovnice 4.23:

```

cdef double s_2
(int m, int max_n, int max_m,
double beta, dict tab_2, double tol):
cdef int n
cdef double suma = 0
cdef dict pole_1 = iteration_process_G
(max_iterations, beta, tol, max_n, max_m, tab_2)
for n in range(-max_n, max_n + 1):
    if ((n + m) < max_n + 1 and (n + m) >= -max_n):
        suma += pole_1[n] * pole_1[n + m]
return suma

```

Když se podíváme na tuto funkci  $s(m)$  v rovnici 4.23, tak tato funkce je vypočítána pomocí rutiny `iteration_process_G`, kterou se budeme zabývat později a která má výstupní parametr právě poslední iteraci funkce  $g(n)$ .  $s(m)$  následně dosadíme do rovnice 4.22:

```

cdef double gamma_2(int m, int max_n, int max_m,
double beta, dict tab_2, double tol):
cdef double s2_val = s_2(m, max_n, max_m, beta,
    tab_2, tol)

```



```
return s2_val / (1 - s2_val)
```

kterou pak opět dosadíme do rovnice 4.20 a celý cyklus opakujeme, dokud námi definovaná zastavovací podmínka tento iterační proces nepřeruší.

## 6.2 Jednotlivé cykly

Jak už bylo naznačeno výše, celkový výpočet se skládá ze dvou vzájemně vnořených cyklů, které popisují iterační procesy funkcí  $\gamma$  a  $g$  v rovnicích 4.19 a 4.22. Tyto procesy jsou opatřeny zastavovací podmínkou, kterou v našem případě byl 2% rozdíl oproti předchozí iteraci. Jednotlivé smyčky byly interpretovány v Cythonu pomocí for cyklů.

První smyčka tedy popisuje iterační proces funkce  $g(n)$  :

```
cdef dict iteration_process_G(int iterae, double
    beta, double tol, int max_n, int max_m, dict tab_2
):
    cdef list pole_tabulek = []
    cdef dict B_pole = {}
    cdef dict g_n = {n: g(n, beta) for n in range(-
        max_n, max_n + 1)}
    pole_tabulek.append(g_n)

    cdef int iteration
    cdef dict new_g_n
    cdef list g_n_values, new_g_n_values,
        deviation_values
    cdef double deviation

    for iteration in range(1, iterae + 1):
        B_pole = napln_tabulku_B(B, max_n, max_m, g_n
            , tab_2, beta)
        new_g_n = {n: new_g(n, beta, B_pole[n]) for n
            in range(-max_n, max_n + 1)}
        deviation_values = [abs(new_g_n[n] - g_n[n])
            / g_n[n] for n in range(-max_n, max_n + 1)
        ]
        deviation = max(deviation_values)
        g_n = new_g_n
        pole_tabulek.append(g_n)
```

```

    if deviation < tol:
        break

    return g_n

```

```

return g_n

```

Když se na tuto smyčku podíváme, tak tam vidíme stále se zvyšující číslo iterace od jedné nejvýše do námi předem definovaného maximálního počtu. Nultá iterace je mimo cyklus, protože je to startovní bod, od kterého se odvíjí další iterace. Jednotlivé iterace jsou vkládány do seznamu hash-tabulek a mezi dvěma posledními iteracemi je měřen rozdíl. Jakmile tento rozdíl je menší než zastavovací podmínka, tak cyklus skončí. Pokud by se jednalo o nekonvergující případ a rozdíl by byl stále větší než zastavovací podmínka, tak je vrácena poslední iterace funkce  $g$ .

Druhá smyčka popisuje iterační proces funkce  $\gamma$

```

cdef dict iteration_process_gamma(int max_n, int
    max_m, double beta, int iterace, np.ndarray[
    int, ndim=1] pole_m, double tol):
cdef dict gamma_m_tab = {m: calculate_gamma(m,
    max_n, beta) for m in range(-max_m, max_m + 1)
    }
cdef int iteration
cdef dict new_gamma_m
cdef list gamma_m_tab_values, new_gamma_m_values,
    deviation_values
cdef double deviation

for iteration in range(1, iterace + 1):
    new_gamma_m = {m: gamma_2(m, max_n, max_m,
        beta, gamma_m_tab, tol) for m in range(-
        max_m, max_m + 1)}
    deviation_values = [abs(new_gamma_m[m] -
        gamma_m_tab[m]) / gamma_m_tab[m] for m in
        range(-max_m, max_m + 1)]
    deviation = max(deviation_values)
    gamma_m_tab = new_gamma_m
    if deviation < tol:
        break
    return gamma_m_tab

```

```
return gamma_m_tab
```

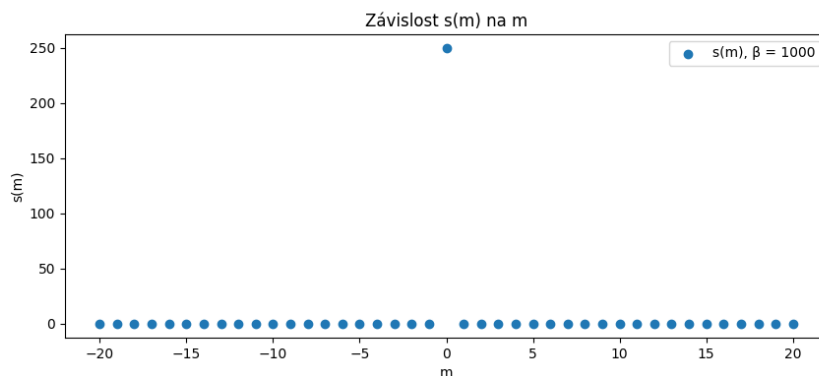
Tak jako v případě první smyčky i zde je nultá iterace mimo cyklus jakožto startovní bod. Pro číslo iterace různé od nuly se pak pracuje z předchozími iteracemi. Nové iterace jsou opět vkládány do seznamu hash-tabulek a je opět měřen rozdíl mezi dvěma po sobě jdoucími iteracemi. Jakmile je dosaženo rozdílu menšího, než je zastavovací podmínka, tak se cyklus ukončí a opět je vrácena poslední iterace funkce  $\gamma$ . Jako u funkce  $g$  je i zde stejným způsobem řešen nekonvergující případ.

## 6.3 Výsledky a vykreslení

Mimo výše definovaných rutin pro získání výsledků skript obsahuje rovněž rutiny, které slouží ke grafické reprezentaci vypočítaných funkcí  $g$  a  $\gamma$  v závislosti na  $n$  a  $m$ . Nutno je poznamenat, že jedním ze zásadních faktorů chování výpočtu jsou hodnoty vstupních parametrů, inverzní teplota  $\beta = \frac{1}{T}$ , energie hybridizace  $\Delta$  a interakce  $V$ . Potřebujeme zároveň zavést rozsah  $n$  takový, aby v rovnici 4.21 byl dominantní první člen pro  $n_{max}$ .

Nejvíce korelované chování elektronů nastává v limitě  $\beta \rightarrow \infty$  a  $V \rightarrow \infty$ . Numerika však s sebou nese omezení v podobě toho, že vždy musíme počítat s konečnými hodnotami, a také zde bylo omezení, že pro vysoké hodnoty  $V$  byl výpočet nekonvergující. Numericky jsme tedy zjišťovali, pro jaké hodnoty  $\beta$  a  $V$  se stává výpočet numericky stabilní. Ve všech výpočtech pokládáme energii hybridizace  $\Delta = 0.1$ , ve shodě s Levinem a Suhlem [LS68], což naznačuje, že za jednotky energie můžeme považovat eV.

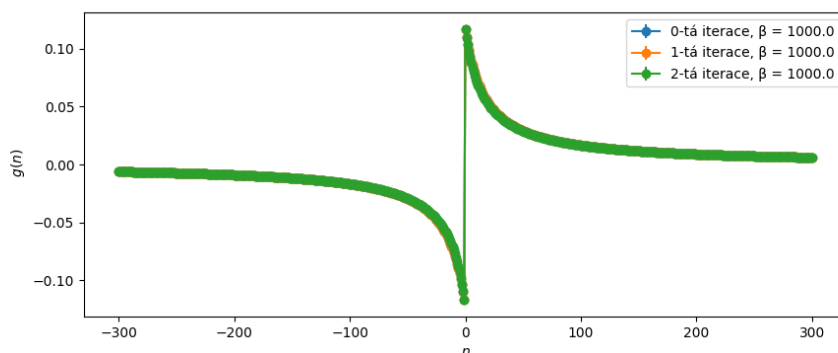
Podívejme se nejdříve na grafickou reprezentaci výpočtu, který jsme udělali pro srovnání s analytickým řešením.



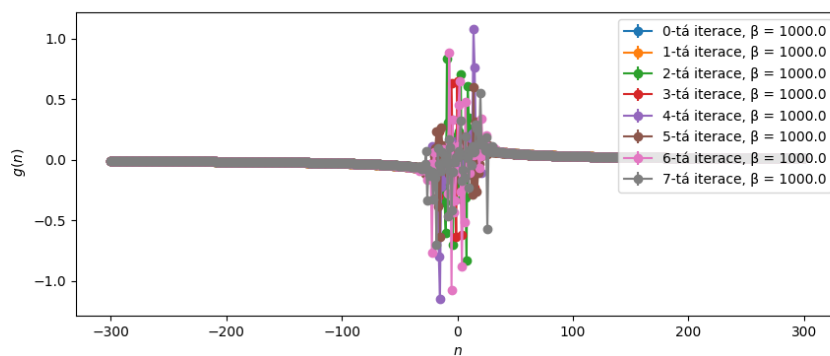
Obrázek 6.1: Grafická reprezentace analytického řešení pro  $V = 1$

Z obrázku je hned patrná shoda s výsledky z kapitoly 5.

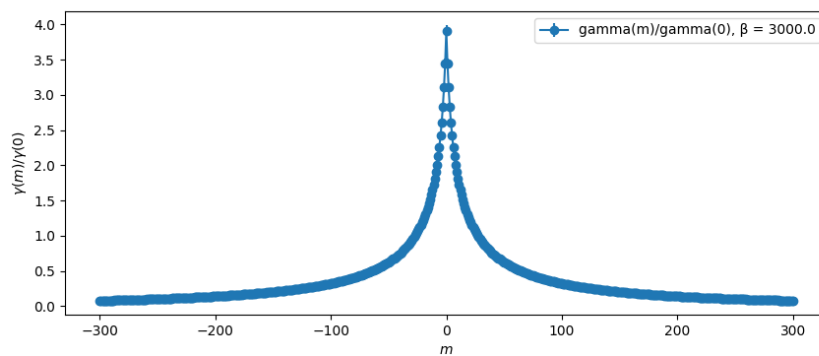
Podívejme se nyní na grafické reprezentace výsledků numerického řešení.



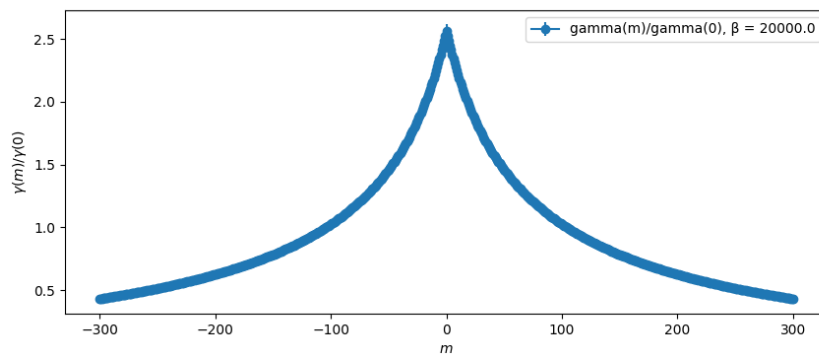
Obrázek 6.2: Grafická reprezentace konvergujícího výpočtu funkce  $g(n)$ , pro  $V = 0.148$  a rozsah  $n_{max} = 300$



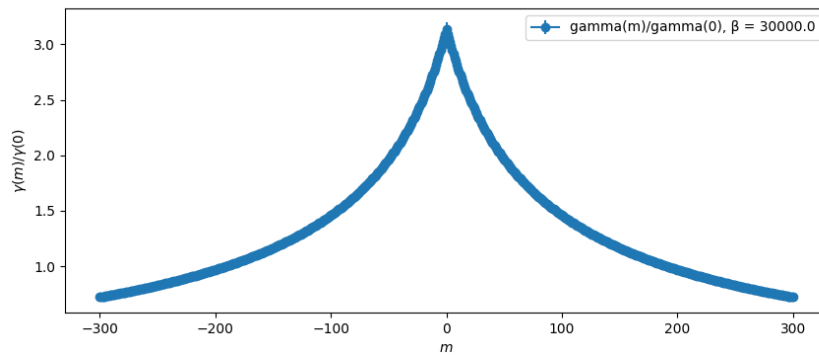
Obrázek 6.3: Grafická reprezentace nekonzvergujícího výpočtu funkce  $g(n)$  pro  $V = 0.464$  a rozsah  $n_{max} = 300$



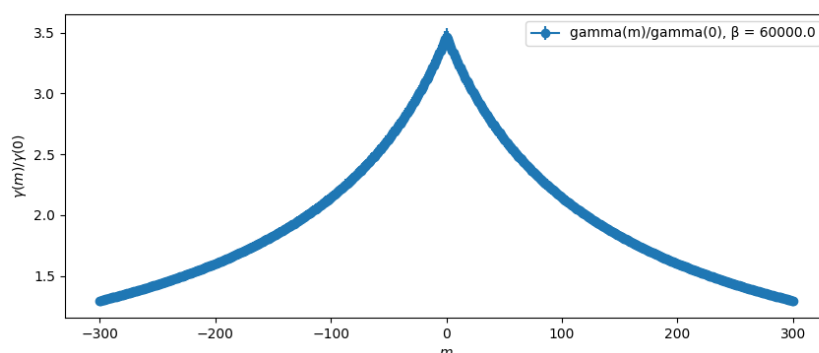
Obrázek 6.4: Grafická reprezentace výpočtu funkce  $\gamma(m)$  pro  $V = 0.148$  a  $n_{max} = 300$



Obrázek 6.5: Grafická reprezentace výpočtu funkce  $\gamma(m)$  pro  $V = 0.148$  a  $n_{max} = 2000$



Obrázek 6.6: Grafická reprezentace výpočtu funkce  $\gamma(m)$  pro  $V = 0.32$  a  $n_{max} = 3000$



Obrázek 6.7: Grafická reprezentace výpočtu funkce  $\gamma(m)$  pro  $V = 0.35$  a  $n_{max} = 60000$

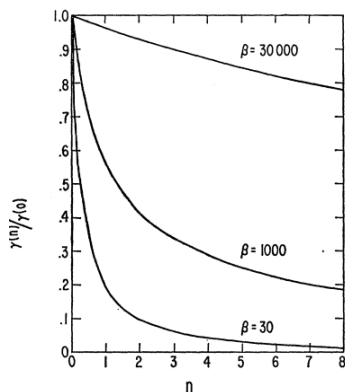
## 6.4 Diskuze výsledků

Chování numerického výpočtu v Pythonu lze rozdělit na dvě situace. První situace je pro  $\beta < 20000$ . Celková konvergence má průběh skládající se ze 3 fází a to, konvergující, nekonvergující a chaotické chování kolem 0. Hranici mezi konvergujícím a nekonvergujícím výpočtem jsme byli schopni určit relativně přesně a to byla hodnota  $V = 0.148$ . Chaotické chování kolem bodu 0 nejčastěji nastávalo kolem  $V \geq 0.3$ .

Druhá situace je pro hodnoty  $\beta > 20000$  a to se výpočet choval tak, že pro každou hodnotu  $V$  bylo nutno zvolit dostatečně velké  $\beta$ , aby výpočet konvergoval. Z důvodu dlouhé doby výpočtu nejsme v tuhle dobu schopni říct konkrétnější informace.



Když námi vypočítané výsledky porovnáme s výsledky od Levina a Suhla, tak zjistíme, že námi vypočítané funkce  $\gamma$  se kvalitativně shodují s jejich.



Obrázek 6.8: Grafická reprezentace výpočtu funkce  $\gamma(m)$  Levina a Suhla [LS68]

Dále pak, když se podíváme na vypočítané funkce  $\gamma$ , vidíme, že s rostoucí interakcí  $V$  se zvyšuje hodnota funkce  $\gamma$  v 0, což právě odpovídá rostoucím elektronovým korelacím, které potlačují nefyzikální magnetické uspořádání z teorie středního pole. Pro kvantitativní vyšetření závislosti bychom potřebovali lepší konvergenci a rychlost výpočtu.

V rámci této práce jsme se nejprve seznámili s Andersonovým modelem magnetické příměsi v kovech definovaným Andersonovým interagujícím Hamiltoniánem a s některými teoretickými přístupy. Na interagující Hamiltonián jsme nejprve zkusili použít aproximaci středního pole, která zahrnovala jen Hartreeho člen a korelační členy byly zanedbány. Tato aproximace už Andersona v jeho článku z roku 1961 [And61] dovedla po několika úpravách na magnetické řešení, které se však ukázalo, že není v souladu s realitou.

Z toho důvodu bylo nutné zahrnout též korelační členy, jejichž tvar vychází z členů v poruchovém rozvoji vyjádřených Feynmanovými diagramy. Řešení nej-jednodušší Bethe-Salpeterovy rovnice dává přiblížení fluktuující výměny (FLEX), o které se opíral Suhla ve svém článku z roku 1967 [Suh67] a spolu s Levinem v článku z roku 1968 [LS68].

V rámci tohoto přiblížení jsme provedli úpravy, které nás přivedly k soustavě 5 rovnic Levina a Suhla. Tuto soustavu je potřeba řešit numericky. Elektronové korelace se nejvíce projevují pro  $V \rightarrow \infty$  a  $\beta \rightarrow \infty$ . Bylo také provedeno řešení analyticky pro případ  $\Delta = 0$ , kde numerický výpočet a následné vykreslení tohoto řešení se shodují s tím, co jsme získali analyticky.

Numerický výpočet byl velice náročný na výkon počítače, a proto nám to umožnilo se pohybovat jen v užších okruzích, abychom zachovali rozumné hodnoty pro konvergenci této metody.

Přiblížení ke korelačně významným hodnotám  $V$  bylo velice pomalé, neboť s jeho zvyšováním jsme museli kvůli konvergenci navýšit dostatečně i hodnotu  $\beta$ , a také navýšit rozsah  $n$ , což právě bylo dosti omezené výkonem počítače. Pro danou hodnotu  $\beta$  existovala vždy zlomová hodnota interakce  $V$ , která rozdělovala výpočet na konvergující a nekonvergující případ. Jako pravděpodobná příčina komplikací numerického řešení by mohla být hybridizační energie, která způsobuje skok v Greenově funkci na imaginární ose.

Když se však podíváme na výsledky konvergujících výpočtů, tak zjistíme, že se kvalitativně shodují s výsledky Levina a Suhla.

Rostoucí hodnota vypočítaných funkcí  $\gamma$  v 0 s rostoucí interakcí  $V$  odpovídá

rostoucím elektronovým korelacím, což zabraňuje nefyzikálnímu magnetickému uspořádání, které jsme dostali z teorie středního pole. Pro kvantitativní vyšetření závislosti bychom potřebovali lepší konvergenci a rychlost výpočtu.

# Kreační a anihilační operátory

## A

Kreační a anihilační operátory jsou matematické operátory, které ve kvantové mechanice mají aplikace zejména ve studiu kvantových harmonických oscilátorů nebo při studiu mnohačasticových systémů, se kterými úzce souvisí i Andersonův model.

Uvedme zde nejjednodušší příklad kreačních a anihilačních operátorů pro bosony, kterým je kvantový harmonický oscilátor [Unkwn] [For83], kde operátory vystupující v Andersonově modelu, mají podobné vlastnosti o kterých budeme hovořit níže. Hamiltonián kvantového harmonického oscilátoru:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \quad (\text{A.1})$$

kde  $m$  je hmotnost,  $\hat{x}$  je operátor polohy,  $\hat{p}$  je operátor hybnosti a  $\omega$  je úhlová frekvence.

Tento Hamiltonián můžeme pomocí anihilačních a kreačních operátorů napsat ve tvaru :

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{A.2})$$

Zavedme nyní operátor počtu částic  $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ . Pro vlastní čísla a vlastní stavy operátorů  $\hat{a}^\dagger$  a  $\hat{a}$  potom platí:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \\ \hat{a} |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

kde  $|n\rangle$  je vlastní stav operátoru  $\hat{n}$  příslušný vlastní hodnotě  $n$ . Pro speciální případ platí:

$$\hat{a} |0\rangle = 0, \quad (\text{A.4})$$

kde stav  $|0\rangle$  reprezentuje stav systému, ve kterém se nenachází žádný boson a říká se mu tzv. bosonové vakuum.

Operátory  $\hat{a}^\dagger$  a  $\hat{a}$  zároveň splňují následující komutační relace:

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}] &= 0, \\ [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] &= 0, \\ [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= 1, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

kde komutativita těchto operátorů vyplývá z bosonovského charakteru částic.

Celkově lze říct, že kreační operátor  $\hat{a}^\dagger$  vytvoří kvantum energie v kvantovém harmonickém oscilátoru. Definujme také operátor  $\hat{a}$  který zničí kvantum energie v tom samém harmonickém oscilátoru.

Obecně se v mnohačasticových systémech nevyskytuje jen jeden kreační a anihilační operátor, ale jsou od sebe rozlišeny pomocí indexů  $\mathbf{j}$  a  $\sigma$ , tedy píšeme  $\hat{a}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger$ ,  $\hat{a}_{\mathbf{j}\sigma}$ , kde  $\mathbf{j}$  označuje polohu a  $\sigma$  označuje spin (nahoru nebo dolů) a to jak v případě fermionů, tak bosonů. Díky většímu počtu operátorů není jeden stav charakterizován pomocí jednoho čísla  $n$ , ale pomocí několika čísel  $n_{\mathbf{j}\sigma}$ , kterým se říká obsazovací čísla daného stavu. Jeden stav systému mnoha částic tedy píšeme jako:  $|n_{1\sigma} n_{2\sigma} n_{3\sigma} \dots\rangle$ , Definujme nyní operátor celkového počtu částic:

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{j}} \hat{n}_{\mathbf{j}\sigma}, \quad (\text{A.6})$$

kde  $\hat{n}_{\mathbf{j}\sigma}$  je operátor počtu částic nacházejících se ve stavu  $|k_{\mathbf{j}\sigma}\rangle$ .

Jelikož operátory v Andersonově modelu popisují fermiony, tak narozdíl od operátorů kvantového harmonického oscilátoru, tyto operátory splňují tzv. antikomutační relace, kde pro antikomutátor mezi dvěma operátory platí:

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \quad (\text{A.7})$$

Operátory  $\hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger$ ,  $\hat{c}_{\mathbf{l}\sigma}$  splňují následující antikomutační relace:

$$\begin{aligned} \{\hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{l}\sigma'}\} &= \delta_{\mathbf{j},\mathbf{l}} \delta_{\sigma,\sigma'}, \\ \{\hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{l}\sigma'}^\dagger\} &= 0, \\ s\{\hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{l}\sigma'}^\dagger\} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Doposud jsme si definovali anihilační a kreační operátory pro tvorbu a zánik částic na určitém místě a s určitým spinem. V Andersonově modelu se však vyskytují situace, při kterých je vhodné tyto operátory transformovat do hybnostního prostoru pomocí následující transformace :

$$\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma}^\dagger, \quad (\text{A.9})$$

kde  $N$  je celkový počet pozic pro vytvoření/zaniknutí částic v krystalové mříži. a celková antikomutativnost těchto operátorů plyne z Pauliho vylučovacího principu, kterým se fermiony řídí.

Nutno je podotknout, že  $\mathbf{k}$  nenabývá vždy spojitých hodnot. Uvedme proto zde příklad konečné trojrozměrné krystalové mříže, kde pro případě konečné krystalové mříže o  $N$  bodech, kdy  $\mathbf{k}$  nabývá hodnot  $k_n = \frac{2\pi n}{N}$ , pokud jsou splněny periodické

okrajové podmínky. Pro dvourozměrnou a třírozměrnou mřížku má každá složka zvlášť takovou diskretizaci. Jelikož se jedná o Fourierovy transformace, tak různé funkce mezi sebou musí splňovat relace ortogonality:

$$\begin{aligned}\frac{1}{N} \sum_l e^{i(k_n - k_m)l} &= \delta_{n,m}, \\ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} e^{ik_n(l-j)} &= \delta_{l,j}\end{aligned}\tag{A.10}$$

# Bibliografie

- [AGD63] ABRIKOSOV, A. A.; GORKOV, L. P.; DZIALOSHINSKII, I. E. *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*. Englewood Cliffs, NJ, USA: Prentice-Hall, 1963.
- [And61] ANDERSON, P. W. Localized Magnetic States in Metals. *Physical Review*. 1961, roč. 124, č. 1, s. 41–53. Dostupné z doi: 10.1103/PhysRev.124.41.
- [Aug05] AUGUSTINSKÝ, Pavel. *Studium silných elektronových korelací v průměrových modelech pomocí diagramatických metod*. Prague, Czech Republic, 2005. Diplomová práce. Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta.
- [For83] FORMÁNEK, Jiří. *Úvod do kvantové teorie*. Praha, Česká republika: Academia, 1983. ISBN 978-80-200-1176-3.
- [Ham69] HAMANN, D. R. Properties of the Renormalized Random-Phase Approximation for Dilute Magnetic Alloys. *Physical Review*. 1969, roč. 186, č. 2, s. 549–561. Dostupné z doi: 10.1103/PhysRev.186.549.
- [LB14] LANCASTER, Tom; BLUNDELL, Stephen J. *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur*. 1st. Oxford, United Kingdom: Oxford University Press, 2014. ISBN 978-0-19-969932-2.
- [LL80] LANDAU, Lev D.; LIFSHITZ, Evgeny M. *Statistical Physics*. 2nd revised and enlarged. Oxford: Pergamon Press, 1980.
- [LS68] LEVINE, M.; SUHL, H. Further Investigation of Local Moments in Metals. *Physical Review*. 1968, roč. 171, č. 2, s. 567–574. Dostupné z doi: 10.1103/PhysRev.171.567.
- [Mah90] MAHAN, Gerald D. *Many-Particle Physics*. 2nd. New York, NY, USA: Plenum Press, 1990. ISBN 978-0-306-43473-3.
- [Mic16] MICHELSEN, Jens. *TKM II: Equation of Motion Technique - Anderson Model and Screening (RPA)* [[https://www.tkm.kit.edu/downloads/ss2018\\_tkm2/TKM2\\_2016.pdf](https://www.tkm.kit.edu/downloads/ss2018_tkm2/TKM2_2016.pdf)]. 2016. Lecture notes for Theory of Condensed Matter II, Karlsruhe Institute of Technology (KIT).



- [Suh67] SUHL, H. Formation of Local Magnetic Moments in Metals. *Physical Review Letters*. 1967, roč. 19, č. 8, s. 442–444. Dostupné z DOI: 10.1103/PhysRevLett.19.442.
- [Unkwn] UNKNOWN, Author. *Elementary Introduction to the Hubbard Model*. Unknown. Dostupné také z: path%20to%20the%20document%20or%20location%20where%20it%20can%20be%20accessed. PDF file.
- [Zag14] ZAGOSKIN, Alexandre. *Quantum Theory of Many-Body Systems: Techniques and Applications*. 2nd. Cham, Switzerland: Springer, 2014. Graduate Texts in Physics. ISBN 978-3-319-07048-3. Dostupné z DOI: 10.1007/978-3-319-07049-0.

# Seznam obrázků

2.1	Energetické hladiny bez hybridizace mezi volnými elektrony a elektrony na příměsi [And61]. . . . .	5
3.1	width=5.5cm . . . . .	16
3.2	Grafická reprezentace dvou částicové Greenovy funkce . . . . .	17
3.3	Grafická reprezentace Bethe-Salpeterovy rovnice . . . . .	18
4.1	Příspěvek ireducibilního členu 3. řádu[Augos] . . . . .	21
6.1	Grafická reprezentace analytického řešení pro $V = 1$ . . . . .	34
6.2	Grafická reprezentace konvergujícího výpočtu funkce $g(n)$ , pro $V = 0.148$ a rozsah $n_{max} = 300$ . . . . .	34
6.3	Grafická reprezentace nekonvergujícího výpočtu funkce $g(n)$ pro $V = 0.464$ a rozsah $n_{max} = 300$ . . . . .	35
6.4	Grafická reprezentace výpočtu funkce $\gamma(m)$ pro $V = 0.148$ a $n_{max} = 300$ . . . . .	35
6.5	Grafická reprezentace výpočtu funkce $\gamma(m)$ pro $V = 0.148$ a $n_{max} = 2000$ . . . . .	36
6.6	Grafická reprezentace výpočtu funkce $\gamma(m)$ pro $V = 0.32$ a $n_{max} = 3000$ . . . . .	36
6.7	Grafická reprezentace výpočtu funkce $\gamma(m)$ pro $V = 0.35$ a $n_{max} = 60000$ . . . . .	37
6.8	Grafická reprezentace výpočtu funkce $\gamma(m)$ Levina a Suhla [LS68] . . . . .	38

