

Многочастичные функции Грина коррелированных электронов в решеточных структурах

Николай Мурзин

Московский Государственный Университет им.Ломоносова

23 Мая 2013

1 Оглавление

2 Введение

- Модель Хаббарда
- Dynamic Mean Field Theory
- Устранение нелокальностей

3 Диаграммы

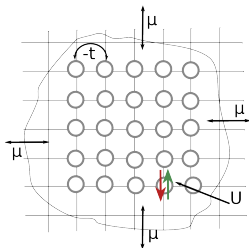
- Лестничные диаграммы
- Вершины шестого порядка

4 Проделанная работа

- Базовые формулы
- Временное представление
- Частотное представление
- Конечные результаты
- Выводы

Модель Хаббарда

$$H = \underbrace{-t \sum_{i,j,\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.)}_{\text{Кинетический член}} + \underbrace{U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}_{\text{Кулоновское взаимодействие}} - \underbrace{\mu \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}}_{\text{Обмен частицами}}$$



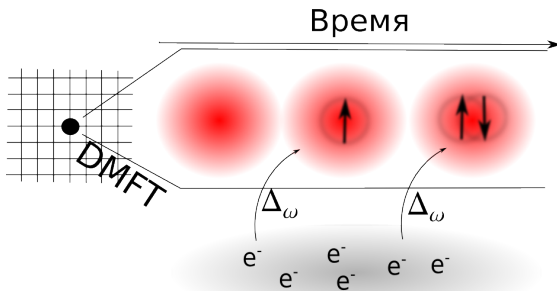
t - Интеграл перескока

μ - Химический потенциал

Dynamic Mean Field Theory

DMFT связывает задачу для всей решетки с локальной задачей для одного атома

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



Учёт нелокальных корреляций

Учёт нелокальных корреляций

Существует несколько подходов

Учёт нелокальных корреляций

Существует несколько подходов

- Взаимодействие электронов на нескольких орбиталях

Учёт нелокальных корреляций

Существует несколько подходов

- Взаимодействие электронов на нескольких орбиталях
- Локализация кластеров из близлежащих атомов

Учёт нелокальных корреляций

Существует несколько подходов

- Взаимодействие электронов на нескольких орбиталях
- Локализация кластеров из близлежащих атомов
- Диаграммная техника в дуальном пространстве

Учёт нелокальных корреляций

Существует несколько подходов

- Взаимодействие электронов на нескольких орбиталях
- Локализация кластеров из близлежащих атомов
- **Диаграммная техника в дуальном пространстве**

Учёт нелокальных корреляций

Существует несколько подходов

- Взаимодействие электронов на нескольких орбиталях
- Локализация кластеров из близлежащих атомов
- **Диаграммная техника в дуальном пространстве**

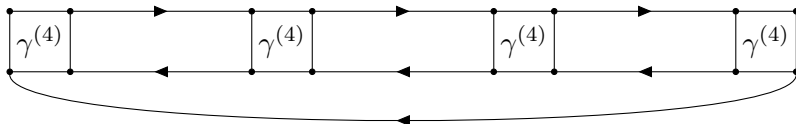
Разложение идёт по многочастичным вершинам локальной задачи.

Лестничные диаграммы

Известно, что лестничные диаграммы отвечают за поляризацию материала χ .

Лестничные диаграммы

Известно, что лестничные диаграммы отвечают за поляризацию материала χ .
Пока предыдущие научные работы учитывали только лестничные диаграммы с двух-частичными вершинами.



Трёх-частичные вершины

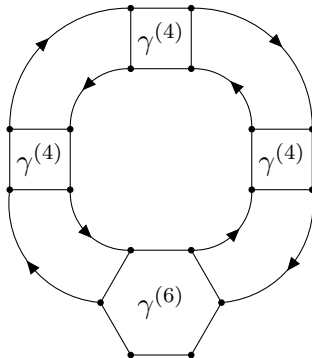
Т.к. не существует явного малого параметра разложения, необходимо проанализировать лестничные диаграммы с вершинами шестого порядка.¹

¹G. Rohringer et al. "One-particle irreducible functional approach - a new route to diagrammatic extensions of DMFT".

In: (2013). eprint: arXiv:1301.7546

Трёх-частичные вершины

Т.к. не существует явного малого параметра разложения, необходимо проанализировать лестничные диаграммы с вершинами шестого порядка.¹



¹G. Rohringer et al. "One-particle irreducible functional approach - a new route to diagrammatic extensions of DMFT".

In: (2013). eprint: arXiv:1301.7546

Постановка задачи

Постановка задачи

$$H = -\frac{U}{2} (n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + \frac{U}{2}$$

Постановка задачи

$$H = -\frac{U}{2} (n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + \frac{U}{2}$$

$$G(1 \dots n; 1' \dots n') = (-1)^n \langle c_1 \dots c_n c_{1'}^{\dagger} \dots c_{n'}^{\dagger} \rangle$$

Постановка задачи

$$H = -\frac{U}{2} (n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + \frac{U}{2}$$

$$G(1 \dots n; 1' \dots n') = (-1)^n \langle c_1 \dots c_n c_{1'}^{\dagger} \dots c_{n'}^{\dagger} \rangle$$

$$\Gamma^{(4)} = G(1, 2, 1', 2') + G(1, 1')G(2, 2') - G(1, 2')G(2, 1')$$

Постановка задачи

$$H = -\frac{U}{2} (n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + \frac{U}{2}$$

$$G(1 \dots n; 1' \dots n') = (-1)^n \langle c_1 \dots c_n c_{1'}^{\dagger} \dots c_{n'}^{\dagger} \rangle$$

$$\Gamma^{(4)} = G(1, 2, 1', 2') + G(1, 1')G(2, 2') - G(1, 2')G(2, 1')$$

$$\begin{aligned} \Gamma^{(6)} = & G(1, 2, 3, 1', 2', 3') \\ & - 2G(1, 1')G(2, 2')G(3, 3') + 2G(1, 1')G(2, 3')G(3, 2') - 2G(1, 2')G(2, 3')G(3, 1') \\ & + 2G(1, 2')G(2, 1')G(3, 3') - 2G(1, 3')G(2, 1')G(3, 2') + 2G(1, 3')G(2, 2')G(3, 1') \\ & - G(1, 1')G(2, 3, 2', 3') + G(1, 2')G(2, 3, 1', 3') - G(1, 3')G(2, 3, 1', 2') \\ & + G(2, 1')G(1, 3, 2', 3') - G(2, 2')G(1, 3, 1', 3') + G(2, 3')G(1, 3, 1', 2') \\ & - G(3, 1')G(1, 2, 2', 3') + G(3, 2')G(1, 2, 1', 3') - G(3, 3')G(1, 2, 1', 2') \end{aligned}$$

Выведены формулы во временном представлении

Выведены формулы во временном представлении

$$\Gamma_{\tau_1 > \tau_2 > \tau_3}^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = -\frac{1}{4 \cosh^2 \frac{U\beta}{4}} \sinh\left(\frac{U}{2}(\tau_1 - \tau_2)\right) \sinh\left(\frac{U}{2}\tau_3\right)$$

$$\Gamma_{\tau_1 > \tau_2 > \tau_3}^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = -\frac{1}{4 \cosh^2 \frac{U\beta}{4}} \sinh\left(\frac{U}{2}(\tau_1 - \tau_2)\right) \sinh\left(\frac{U}{2}\tau_3\right)$$

$$\Gamma_{\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \tau_4 > \tau_5}^{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow} = -\frac{1}{4 \cosh^3 \frac{U\beta}{4}} \cosh\left(\frac{U}{8}\left(\frac{\beta}{2} - (\tau_1 - \tau_4)\right)\right) \sinh\left(\frac{U}{2}(\tau_2 - \tau_3)\right) \sinh\left(\frac{U}{2}\tau_5\right)$$

Выведены формулы во временном представлении

$$\Gamma_{\tau_1 > \tau_2 > \tau_3}^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = -\frac{1}{4 \cosh^2 \frac{U\beta}{4}} \sinh\left(\frac{U}{2}(\tau_1 - \tau_2)\right) \sinh\left(\frac{U}{2}\tau_3\right)$$

$$\Gamma_{\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \tau_4 > \tau_5}^{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow} = -\frac{1}{4 \cosh^3 \frac{U\beta}{4}} \cosh\left(\frac{U}{8}\left(\frac{\beta}{2} - (\tau_1 - \tau_4)\right)\right) \sinh\left(\frac{U}{2}(\tau_2 - \tau_3)\right) \sinh\left(\frac{U}{2}\tau_5\right)$$

...и аналогичные им для других порядков следования операторов.

Мацубаровское представление

Мацубаровское представление

$$\Gamma_{\omega}^{(2n)} = \sum_{P_i} \int_0^{\beta} \int_0^{\tau_{i_1}} \dots \int_0^{\tau_{i_{2n-1}}} \Gamma^{(2n)}(\tau_{i_1}, \dots, \tau_{i_{2n}}) e^{i(\omega_{i_1} \tau_{i_1} + \dots + \omega_{i_{2n}} \tau_{i_{2n}})} d\tau_{i_{2n}} \dots d\tau_{i_1}$$

Мацубаровское представление

$$\Gamma_{\omega}^{(2n)} = \sum_{P_i} \int_0^{\beta} \int_0^{\tau_{i_1}} \dots \int_0^{\tau_{i_{2n-1}}} \Gamma^{(2n)}(\tau_{i_1}, \dots, \tau_{i_{2n}}) e^{i(\omega_{i_1} \tau_{i_1} + \dots + \omega_{i_{2n}} \tau_{i_{2n}})} d\tau_{i_{2n}} \dots d\tau_{i_1}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

Мацубаровское представление

$$\Gamma_{\omega}^{(2n)} = \sum_{P_i} \int_0^{\beta} \int_0^{\tau_{i_1}} \dots \int_0^{\tau_{i_{2n-1}}} \Gamma^{(2n)}(\tau_{i_1}, \dots, \tau_{i_{2n}}) e^{i(\omega_{i_1} \tau_{i_1} + \dots + \omega_{i_{2n}} \tau_{i_{2n}})} d\tau_{i_{2n}} \dots d\tau_{i_1}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

P_i — Все перестановки временных переменных

Мацубаровское представление

$$\Gamma_{\omega}^{(2n)} = \sum_{P_i} \int_0^{\beta} \int_0^{\tau_{i_1}} \dots \int_0^{\tau_{i_{2n-1}}} \Gamma^{(2n)}(\tau_{i_1}, \dots, \tau_{i_{2n}}) e^{i(\omega_{i_1} \tau_{i_1} + \dots + \omega_{i_{2n}} \tau_{i_{2n}})} d\tau_{i_{2n}} \dots d\tau_{i_1}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

P_i — Все перестановки временных переменных

Для параллельных спинов например, двухчастичная вершина имеет очень простой вид

$$\gamma^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = \beta \frac{U^2}{4} \frac{\delta_{\omega_1, -\omega_3} - \delta_{\omega_2, -\omega_3}}{\omega_1^2 \omega_2^2} (\omega_1^2 + \frac{U^2}{4}) (\omega_2^2 + \frac{U^2}{4})$$

Окончательные результаты для трёх-частичной вершины

Окончательные результаты для трёх-частичной вершины

Был получен не очевидный сходу результат - вершина обращается в нуль, в случае параллельных спинов

$$\Gamma^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = \Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} = 0$$

Окончательные результаты для трёх-частичной вершины

Был получен не очевидный сходу результат - вершина обращается в нуль, в случае параллельных спинов

$$\Gamma^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = \Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} = 0$$

Приведем разложение по степеням U вершины с одним перевернутым спином, при $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \tau_4 > \tau_5 > \tau_6$ и с попарно равными частотами для двух случаев

Окончательные результаты для трёх-частичной вершины

Был получен не очевидный сходу результат - вершина обращается в нуль, в случае параллельных спинов

$$\Gamma^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = \Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} = 0$$

Приведем разложение по степеням U вершины с одним перевернутым спином, при $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \tau_4 > \tau_5 > \tau_6$ и с попарно равными частотами для двух случаев

$$\gamma^{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow}(\omega_1 = -\omega_2, \omega_3 = -\omega_4, \omega_5 = -\omega_6) = O(U^2)$$

Окончательные результаты для трёх-частичной вершины

Был получен не очевидный сходу результат - вершина обращается в нуль, в случае параллельных спинов

$$\Gamma^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = \Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} = 0$$

Приведем разложение по степеням U вершины с одним перевернутым спином, при $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \tau_4 > \tau_5 > \tau_6$ и с попарно равными частотами для двух случаев

$$\gamma^{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow}(\omega_1 = -\omega_2, \omega_3 = -\omega_4, \omega_5 = -\omega_6) = O(U^2)$$

$$\gamma^{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow}(\omega_1 = -\omega_4, \omega_2 = -\omega_3, \omega_5 = -\omega_6) = \frac{U^2 \left(\frac{U^2}{4} + \omega_3^2 \right)^2 \left(\frac{U^2}{4} + \omega_4^2 \right)^2 \left(\frac{U^2}{4} + \omega_5^2 \right)^2}{128\omega_3^6 (\omega_3 - \omega_4)^2 \omega_4^6 \omega_5^5 (\omega_4 + \omega_5)^2 (-\omega_3 + \omega_4 + \omega_5)^3} (\beta^2 \omega_5 (\beta \omega_5 + 2i) \omega_4^5 \dots) + O(U^4)$$

Результаты вкратце

Результаты вкратце

Была написана программа для аналитического вывода выражений для функций Грина и многочастичных вершин, с помощью которой были получены

- Точные формулы для двухчастичной вершины во временном и частотном представлении

Результаты вкратце

Была написана программа для аналитического вывода выражений для функций Грина и многочастичных вершин, с помощью которой были получены

- Точные формулы для двухчастичной вершины во временном и частотном представлении
- Обращение в нуль трёхчастичной вершины с параллельными спинами

Результаты вкратце

Была написана программа для аналитического вывода выражений для функций Грина и многочастичных вершин, с помощью которой были получены

- Точные формулы для двухчастичной вершины во временном и частотном представлении
- Обращение в нуль трёхчастичной вершины с параллельными спинами
- Выражения для трёхчастичной вершины с антипараллельными спинами