Многочастичные функции Грина коррелированных электронов

в решеточных структурах

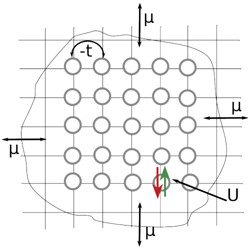
Николай Мурзин

Московский Государственный Университет им.Ломоносова

23 Мая 2013

Модель Хаббарда

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



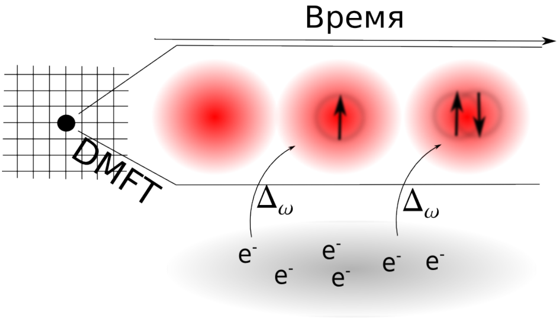
t - Перескоковый интеграл

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

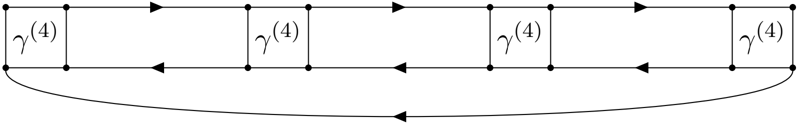
Членами разложения являются многочастичные вершины.

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.

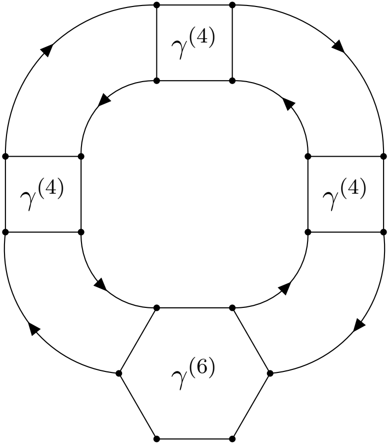


Трёх-частичные вершины

Но уже существуют предложения использовать диаграммы с трёх-частичными вершинами.

Трёх-частичные вершины

Но уже существуют предложения использовать диаграммы с трёх-частичными вершинами.



Формулы для расчётов

Формулы для расчётов

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

Формулы для расчётов

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

$$G(1\ldots n; 1'\ldots n') = (-1)^n \langle c_1 \ldots c_n c^\dagger_{1'} \ldots c^\dagger_{n'} \rangle$$

Формулы для расчётов

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

$$G(1 \ldots n; 1' \ldots n') = (-1)^n \langle c_1 \ldots c_n c^{\dagger}_{1'} \ldots c^{\dagger}_{n'} \rangle$$

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

Формулы для расчётов

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

$$G(1\ldots n; 1'\ldots n') = (-1)^n \langle c_1 \ldots c_n c^\dagger_{1'} \ldots c^\dagger_{n'}\rangle$$

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

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

Выведены формулы во временно́м представлении

Выведены формулы во временно́м представлении

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

Выведены формулы во временно́м представлении

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

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

Выведены формулы во временно́м представлении

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

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

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

Матсубаровское представление

Матсубаровское представление

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

Матсубаровское представление

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

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

Матсубаровское 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

Матсубаровское 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

Было показано, что вершина обращается в нуль, при параллельных спинах

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

Окончательные результаты для трёх-частичной вершины

Было показано, что вершина обращается в нуль, при параллельных спинах

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

Для случая с одним перевернутым спином был рассмотрен частный случай $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \tau_4 > \tau_5 > \tau_6$ с попарно равными частотами и разложением по степеням U

Окончательные результаты для трёх-частичной вершины

Было показано, что вершина обращается в нуль, при параллельных спинах

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

Для случая с одним перевернутым спином был рассмотрен частный случай $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \tau_4 > \tau_5 > \tau_6$ с попарно равными частотами и разложением по степеням U

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

Окончательные результаты для трёх-частичной вершины

Было показано, что вершина обращается в нуль, при параллельных спинах

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

Для случая с одним перевернутым спином был рассмотрен частный случай $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \tau_4 > \tau_5 > \tau_6$ с попарно равными частотами и разложением по степеням U

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

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