Многочастичные функции Грина коррелированных электронов

в решеточных структурах

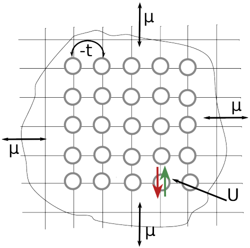
Николай Мурзин

Московский Государственный Университет им.Ломоносова

23 Мая 2013

Модель Хаббарда

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



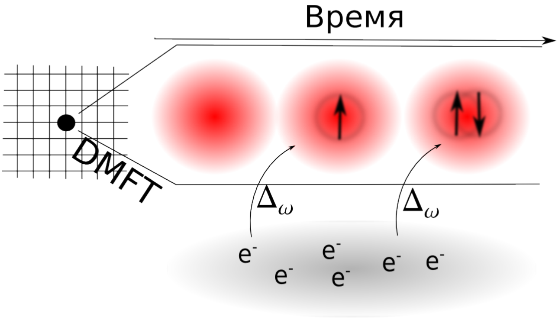
t - Интеграл перескока

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

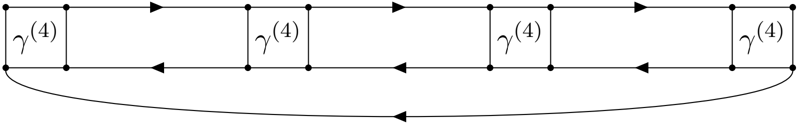
Разложение идёт по многочастичным вершинам локальной задачи.

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.



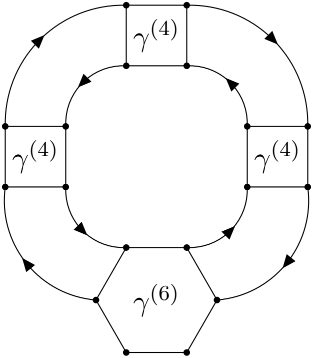
Трёх-частичные вершины

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

[1] G. 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]



[1] G. 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

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

Постановка задачи

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

$$G(1 \dots n; 1' \dots n') = (-1)^n \langle T c_1 \dots c_n c^\dagger_{1'} \dots c^\dagger_{n'} \rangle$$

Постановка задачи

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

$$G(1 \dots n; 1' \dots n') = (-1)^n \langle T c_1 \dots c_n c^\dagger_{1'} \dots c^\dagger_{n'} \rangle$$

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

Постановка задачи

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

$$G(1 \dots n; 1' \dots n') = (-1)^n \langle Tc_1 \dots c_n c^\dagger_{1'} \dots c^\dagger_{n'} \rangle$$

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

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

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 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

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

Окончательные результаты для трёх-частичной вершины

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 трёх-частичной 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 трёх-частичной вершины с параллельными спинами
- Выражения для трёх-частичной вершины с антипараллельными спинами