

Московский Государственный Университет

Исследование многочастичного рассеяния методом дуальных фермионов в модели Хаббарда

Николай А. Мурзин
науч. рук.: Алексей Н. Рубцов

6 июня 2014

Оглавление

| | | |
|----------|--|----------|
| 1 | Обзор | 2 |
| 1.1 | Введение | 2 |
| 1.2 | Формализм дуальных фермионов | 2 |
| 1.3 | Дуальная теория возмущений | 4 |
| 1.4 | Дуальная вершина | 4 |
| 1.5 | Восприимчивость | 5 |
| 1.6 | Лестничное приближение | 5 |
| 1.7 | Условие самосогласования и связь с DMFT | 6 |
| 1.8 | Метод одно-частичного неприводимого функционала (1-particle irreducible approach, 1PI) | 6 |
| 1.9 | Диаграммы высшего порядка | 7 |
| 2 | Ход работы | 8 |
| 2.1 | Модель | 8 |
| 2.2 | Блоки и линии диаграммы | 8 |
| 2.3 | Расчет лестничной диаграммы | 9 |
| 2.4 | Расчет диаграмм третьего порядка | 10 |
| 2.5 | Заключение | 11 |

Глава 1

Обзор

1.1 Введение

Сильно коррелированные электронные системы содержат в себе наиболее интригующие эффекты физики конденсированного состояния, такие как высоко температурную сверхпроводимость, поведение тяжелых фермионов, аномальный Кондо эффект, различные виды электронных фазовых переходов и многое другое[1][2][19][7]. Существенно описание большого числа частиц с очень сильными для обычной теории возмущений корреляциями. В связи со сложностью задачи, физика сильно коррелированных систем представляет из себя теоретически очень привлекательную область. Одним из удачных путей описания является Теория Динамического Среднего Поля (DMFT)[6][11]. Обще принято что этому подходу удастся уловить большинство существенных корреляционных эффектов, например поведение переходов металл-изолятор Мотт-Хаббарда[14]. Метод был успешно внедрен в вычисления реальных электронных структур[3][12], которые уже являются стандартным средством в микроскопической теории сильно коррелированных систем. Тем не менее существует множество эффектов, для которых не локальные корреляции выходят на первый план и часто наиболее важными являются корреляции именно дальнего порядка. Например образование жидкости Латтинжера в мало размерных системах[2][13], поведение нефермиевской жидкости с сингулярностями Ван-Хова на плоскости[8][9], физика около критических точек или d-волны ВТСП[19].

DMFT берет в рассмотрение локальные динамические корреляции, но пренебрегает внутри-узловыми корреляциями, что отражено в независимости собственной энергии от \mathbf{k} : $\Sigma_{\mathbf{k}} \equiv \Sigma_{loc, \omega}$. Теории возмущений, такие как теория Т-матриц, обмен флуктуациями (fluctuation exchange, FLEX) и паркетные приближения[5] могут привести к \mathbf{k} -зависимой Σ , но наиболее важные локальные корреляции не воспроизводятся в режиме слабой связи, когда параметр U кулоновского взаимодействия сравним или больше ширины зоны. Для учета флуктуационных локальных корреляций необходима диаграммная техника, строящаяся поверх DMFT.

Одним из методов включения пространственных корреляций служит диаграммный Метод Дуальных Фермионов (DF)[17]. Он основан на введении новых переменных в представлении интеграла по траекториям. Этот подход приводит к удовлетворительным результатам уже в низших порядках возмущений по сравнению с DMFT, например уменьшению критической температуры антиферромагнитной неустойчивости в модели Хаббарда при полузаполнении[4]. Введение новых дуальных переменных позволяет включить локальный вклад к собственной энергии в дуальную функцию Грина и достичь быстрой сходимости в ряде возмущений.

Существуют и другие диаграммные техники, метод DGA [20][10] и относительно новый метод $1PI$ [16]. В этой работе делается сравнение DF и $1PI$ методов на примере двух диаграмм третьего порядка, приводятся численные результаты для двухмерной модели Хаббарда в режиме с полузаполнением.

Обычно для решения примесной задачи и расчета вершин используются квантовые методы Монте-Карло (QMC)[18], страдающие большими численными погрешностями. В атомном пределе возможно точное решение примесной задачи, что увеличит погрешность модели, но в связи с аналитическим подходом эту погрешность вероятно можно скомпенсировать. В этой работе будет использоваться последний подход. Условие атомного предела необходимо, т.к. гибридизация в гамильтоновой задаче по сути является запаздывающим членом, а Гамильтониан с запаздыванием приводит к физическим противоречиям, хотя формальное численное решение всё равно существует.

1.2 Формализм дуальных фермионов

Задача состоит в поиске приближенного решения для обобщенной задачи с действием

$$S[c^*, c] = - \sum_{\omega \mathbf{k} \sigma m m'} c_{\omega \mathbf{k} \sigma m}^* ((i\omega + \mu) \mathbf{1} - h_{\mathbf{k} \sigma})_{mm'} c_{\omega \mathbf{k} \sigma m'} + \sum_i H_{int}[c_i^*, c_i] \quad (1.1)$$

Здесь $h_{\mathbf{k} \sigma}$ - одноэлектронная часть Гамильтониана, $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta, n = 0, \pm 1, \dots$ - фермионные Мацубаровские частоты, β и μ - обратная температура и химический потенциал соответственно, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ - спиновые индексы, m, m'

- орбитальные индексы, i - индексирует узлы решетки, \mathbf{k} - вектор квазиимпульса, а c^*, c - Грассмановы переменные. H_{int} может быть любым типом взаимодействия. Единственное ограничение, что оно локально в пределах атома или кластера. Кулоновское взаимодействие например

$$H_{int}[c_i^*, mc_i] = \frac{1}{4} \int_0^\beta d\tau U_{1234} c_{i1}^* c_{i2}^* c_{i3} c_{i4} \quad (1.2)$$

Где U - сила кулоновского взаимодействия, а индексы (например $1 \equiv \omega_1 m_1 \sigma_1$) вмещают частотные, орбитальные и спиновые состояния, по которым производится суммирование.

Идея техники дуальных фермионов заключается в переформулировке решеточной задачи в терминах невзаимодействующих примесей, а взаимодействие перенесено на второстепенные частицы. Как и в теории динамического среднего поля (DMFT), вводится действие для локальной примеси в виде

$$S_{imp}[c^*, c] = - \sum_{\omega \sigma m m'} c_{\omega \sigma m}^* ((i\omega + \mu) \mathbf{1} - \Delta_{\omega \sigma})_{mm'} c_{\omega \sigma m'} + H_{int}[c^*, c] \quad (1.3)$$

Где Δ - пока неизвестная матрица гибридизации, описывающая взаимодействие между примесью и термостатом. Из-за локальности Δ возможно расщепление взаимодействующих узлов и действие 1.1 можно переписать как

$$S[c^*, c] = \sum_i S_{imp}[c_{i\omega\sigma m'}^*, c_{i\omega\sigma m}] - \sum_{\omega \mathbf{k} \sigma m m'} c_{\omega \mathbf{k} \sigma m}^* (\Delta_{\omega \sigma} - h_{\mathbf{k} \sigma})_{mm'} c_{\omega \mathbf{k} \sigma m'} \quad (1.4)$$

Дуальные фермионы вводятся при помощи преобразования Хаббарда-Стратоновича, выполняющееся для произвольных комплексных матриц \hat{A} и \hat{B}

$$\int \exp(-\mathbf{f}^* \hat{A} \mathbf{f} - \mathbf{f}^* \hat{B} \mathbf{c} - \mathbf{c}^* \hat{B} \mathbf{f}) \mathcal{D}[\mathbf{f}^*, \mathbf{f}] = \det(\hat{A}) \exp(\mathbf{c}^* \hat{B} \hat{A}^{-1} \hat{B} \mathbf{c}) \quad (1.5)$$

Выбирая

$$\begin{aligned} A &= g_{\omega\sigma}^{-1} (\Delta_{\omega\sigma} - h_{\mathbf{k}\sigma})^{-1} g_{\omega\sigma}^{-1} \\ B &= g_{\omega\sigma}^{-1} \end{aligned} \quad (1.6)$$

Где $g_{\omega\sigma}$ - локальная функция Грина примеси. В итоге получаем

$$S[\mathbf{c}^*, \mathbf{c}, \mathbf{f}^*, \mathbf{f}] = \sum_i S_{site,i} + \sum_{\omega \mathbf{k} \sigma} [\mathbf{f}_{\omega \mathbf{k} \sigma}^* g_{\omega\sigma}^{-1} (\Delta_{\omega\sigma} - h_{\mathbf{k}\sigma})^{-1} g_{\omega\sigma}^{-1} \mathbf{f}_{\omega \mathbf{k} \sigma}] \quad (1.7)$$

Таким образом взаимодействие между узлами заменилось на взаимодействие с дуальными фермионами

$$S_{site,i} = S_{imp}[\mathbf{c}^*, \mathbf{c}] + \mathbf{f}_{i\omega\sigma}^* g_{\omega\sigma}^{-1} \mathbf{c}_{i\omega\sigma} + \mathbf{c}_{i\omega\sigma}^* g_{\omega\sigma}^{-1} \mathbf{f}_{i\omega\sigma} \quad (1.8)$$

Где из-за локальности $g_{\omega\sigma}$, сумму по \mathbf{k} можно заменить на сумму по узлам.

Теперь возможно проинтегрировать первоначальные фермионы для каждого узла в отдельности

$$\int \exp(-S_{site}[\mathbf{c}_i^*, \mathbf{c}_i, \mathbf{f}_i^*, \mathbf{f}_i]) \mathcal{D}[\mathbf{c}_i^*, \mathbf{c}_i] = Z_{imp} e^{(-\sum_{\omega\sigma} \mathbf{f}_{i\omega\sigma}^* g_{\omega\sigma}^{-1} \mathbf{f}_{i\omega\sigma} + V_i[\mathbf{f}_i^*, \mathbf{f}_i])} \quad (1.9)$$

Раскладывая обе части этого уравнения и приравнивая соответствующие порядки малости, получаем

$$V[\mathbf{f}^*, \mathbf{f}] = -\frac{1}{4} \gamma_{1234}^{(4)} \mathbf{f}_1^* \mathbf{f}_2^* \mathbf{f}_3^* \mathbf{f}_4 + \frac{1}{36} \gamma_{123456}^{(6)} \mathbf{f}_1^* \mathbf{f}_2^* \mathbf{f}_3^* \mathbf{f}_4^* \mathbf{f}_5^* \mathbf{f}_6 + \dots \quad (1.10)$$

Где $\gamma^{(4)}$ - неприводимая двух-частичная вершина решеточных фермионов

$$\begin{aligned} \gamma_{1234}^{(4)} &= g_{11'}^{-1} g_{22'}^{-1} [\chi_{1'2'3'4'}^{imp} - \chi_{1'2'3'4}^{imp,0}] g_{33'}^{-1} g_{44'}^{-1} \\ \chi_{1234}^{imp,0} &= g_{14} g_{23} - g_{13} g_{24} \end{aligned} \quad (1.11)$$

, g - локальная функция Грина примесной задачи, χ - локальная двух-частичная функция Грина примесной задачи

$$\chi_{1234}^{imp} = \frac{1}{Z_{imp}} \int \mathbf{c}_1 \mathbf{c}_2 \mathbf{c}_3^* \mathbf{c}_4^* \exp(-S_{imp}[\mathbf{c}^*, \mathbf{c}]) \mathcal{D}[\mathbf{c}^*, \mathbf{c}] \quad (1.12)$$

В результате дуальное действие после интегрирования по решеточным фермионами

$$\tilde{S}[\mathbf{f}^*, \mathbf{f}] = - \sum_{\omega \mathbf{k} \alpha \beta} \mathbf{f}_{\omega \mathbf{k} \alpha}^* [\tilde{G}_{\omega\sigma}^{(0)}(\mathbf{k})]_{\alpha\beta}^{-1} \mathbf{f}_{\omega \mathbf{k} \beta} + \sum_i V_i[\mathbf{f}_i^*, \mathbf{f}_i] \quad (1.13)$$

Где дуальная функция Грина

$$\tilde{G}_\omega^{(0)}(\mathbf{k}) = -g_\omega [g_\omega + (\Delta_\omega - h_{\mathbf{k}})^{-1}]^{-1} g_\omega \quad (1.14)$$

До этого момента уравнения (1.13) и (1.14) являются лишь переформулировкой первоначальной задачи. На практике же приближенные решения получаются из возмущения дуальной задачи. Несколько диаграмм дающие вклад в собственную энергию показаны на рисунке 1.3. Диаграммы сконструированы из примесных вершин и дуальных функция Грина в качестве линий.

После расчета приближенной собственной энергии, результат может быть переведен обратно в терминах решеточных фермионов используя точные соотношения. Абстрактная природа дуальных переменных может создать впечатление произвольности и неконтролируемости приближений в разложении в ряд дуального потенциала, но можно показать, что приближения могут быть сконструированы из физических соображений, как и в обычном случае.

1.3 Дуальная теория возмущений

Действие (1.13) ведет к созданию диаграммной техники по степеням дуального потенциала V . В конечном итоге можно прийти к правилам построения диаграмм для собственной энергии в импульсном пространстве

- Рисуется все топологически различные, соединенные диаграммы, включающие в себя любые n -частичные взаимодействия $\gamma^{(2n)}$, изображаемые в виде правильных многоугольников с $2n$ концами, n исходящими с исходящей направленной линией и соответственно n входящими
- все концы вершин соединяются направленными линиями, в соответствии с исходящим или входящим типом
- в соответствие каждой линии ставится дуальная функция Грина \tilde{G}
- Расставляются частоты, импульсы, орбитальные и спиновые индексы для каждого конца вершины, принимая в расчет законы сохранения энергии, импульса и спина
- Суммируются/интегрируются все внутренние переменные
- Для каждого набора n эквивалентных линий (одинаково направленных и соединяющих одни и те-же концы) ставится фактор $1/n!$
- Результат умножается на фактор $(T/N)^m S^{-1}$, где m - число независимых сумм по частотам/импульсам, а S - фактор симметрии[15]
- Для диаграмм, содержащих только двух-частичные взаимодействия, знак определяется заменой квадрата линией вертикального взаимодействия и считается число образовавшихся циклов n_l . Знак равен $(-1)^{n_l}$.

Закону сохранения энергии соответствуют δ -функции $\delta(\omega_1 + \omega_3 + \dots + \omega_{2n-1} - \omega_2 - \omega_4 - \dots - \omega_{2n})$ в каждой вершине. Число m независимых суммирований остается после интегрирования всех этих δ -функций. $T = \beta^{-1}$ - температура, N - число k -точек в первой зоне Брюллиэна.

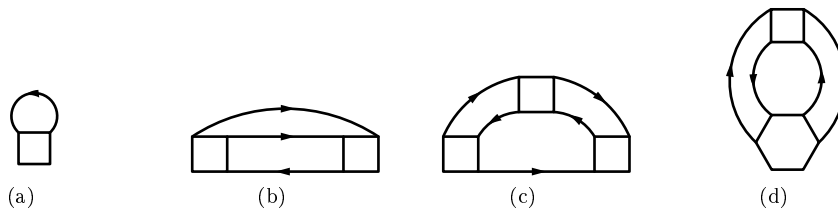


Рис. 1.1: Диаграммы

1.4 Дуальная вершина

$$\begin{array}{c} \text{---} \rightarrow \text{---} \\ \text{---} \rightarrow \text{---} \end{array} \left[\Gamma \right] = \begin{array}{c} \text{---} \rightarrow \text{---} \\ \text{---} \rightarrow \text{---} \end{array} \left[\gamma^{(4)} \right] + \begin{array}{c} \text{---} \rightarrow \text{---} \\ \text{---} \rightarrow \text{---} \end{array} \left[\gamma^{(4)} \right] \left[\gamma^{(4)} \right] + \dots$$

Рис. 1.2: Дуальная вершина

Дуальная вершина вычисляется из уравнения Бете-Солпитера

$$\Gamma_{\omega\omega'}^{\alpha} = \gamma_{\omega\omega'}^{\alpha} - \beta^{-1} \sum_{\omega''} \gamma_{\omega\omega''}^{\alpha} \overbrace{\left(\int_k \tilde{G}_{\Omega+\omega''} \tilde{G}_{\omega''} \right)}^{-\tilde{\chi}_{\Omega K}^{(0)}} \Gamma_{\omega''\omega'}^{\alpha} \quad (1.15)$$

Здесь $\alpha = d, m$ - электрон-дырочный канал плотности и магнитный канал

$$\begin{aligned} \Gamma_{\omega\omega''}^d &= \Gamma_{\omega\omega''}^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} + \Gamma_{\omega\omega''}^{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow} \\ \Gamma_{\omega\omega''}^m &= \Gamma_{\omega\omega''}^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} - \Gamma_{\omega\omega''}^{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow} \end{aligned} \quad (1.16)$$

Физическое содержание уравнения БС состоит в повторении рассеяния пар частица-дырка. В этих двух каналах пара частица-дырка имеет определенный полный спин S и проекцию спина S_z . Канал плотности соответствует $S = 0$, $S_z = 0$ синглетному каналу, а вершина Γ^m соответствует $S = 1$, $S_z = 0$ триплетному каналу. В магнитном канале коллективными возбуждениями являются магноны. Вершина $\Gamma^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}(\Gamma^{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow})$, соответствующая проекции спина $S_z = \pm 1$ ($S = 1$) должна равняться Γ^m в парамагнитном состоянии. (продольные и поперечные моды не различаются). Уравнение решается матричным обращением

$$[\Gamma_{\Omega K}^{\alpha}]^{-1} = [\gamma_{\Omega}^{\alpha}]^{-1} - \beta^{-1} \tilde{\chi}_{\Omega K}^{(0)} \cdot \mathbf{1} \quad (1.17)$$

1.5 Восприимчивость

Зная вершину, можно получить магнитную и зарядовую восприимчивости

$$\tilde{\chi}_{\Omega K}^{\alpha} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} \quad (1.18)$$

$$\tilde{\chi}_{\Omega K}^{\alpha} = -\beta^{-1} \sum_{\omega} \tilde{\chi}_{\Omega K}^{(0)} + \beta^{-2} \sum_{\omega\omega'} \tilde{\chi}_{\Omega K}^{(0)} \Gamma_{\omega\omega'}^{\alpha} \tilde{\chi}_{\omega'\Omega}^{(0)} \quad (1.19)$$

1.6 Лестничное приближение

$$\tilde{\Sigma}^{\text{LDFA}} = - \text{diagram 1} - \frac{1}{2} \text{diagram 2} \quad (1.20)$$

Для учета вклада парамагнонов, необходимо сконструировать лестничное приближение для дуальной собственной энергии. Собственная энергия может быть получена из уравнения Швингера-Дайсона (1.20) связывающее её с вершинной функцией решетки. Вершина аппроксимируется добавлением вкладов различных флуктуационных каналов. В близости магнитной неустойчивости, достаточно рассмотреть вклады горизонтального и вертикального электрон-дырочного канала. Вставляя приближение для вершины $\Gamma = \Gamma^h + \Gamma^v - \gamma$ в уравнение Швингера-Дайсона, получается лестничное приближение для собственной энергии

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}_{\sigma\omega k}^{\text{LDFA}} &= \\ &- \beta^{-1} \sum_{\omega' k' \sigma'} \gamma_{\omega' \omega \Omega=0}^{\sigma\sigma'\sigma'\sigma} \tilde{G}_{\omega' k'} \\ &+ \frac{1}{2} \beta^{-2} \sum_{\Omega K} \sum_{\omega' \sigma'} \gamma_{\omega' \omega \Omega}^{\sigma\sigma'\sigma'\sigma} \tilde{G}_{\omega+\Omega} \tilde{\chi}_{\omega' \Omega}^{(0)} \left[2\Gamma_{\omega\omega' \Omega}^{\sigma\sigma'\sigma'\sigma} - \gamma_{\omega\omega' \Omega}^{\sigma\sigma'\sigma'\sigma} \right] \\ &+ \frac{1}{2} \beta^{-2} \sum_{\Omega K} \sum_{\omega'} \gamma_{\omega' \omega \Omega}^{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \tilde{G}_{\omega+\Omega} \tilde{\chi}_{\omega' \Omega}^{(0)} \left[2\Gamma_{\omega\omega' \Omega}^{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}} - \gamma_{\omega\omega' \Omega}^{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \right] \end{aligned} \quad (1.21)$$

1.7 Условие самосогласования и связь с DMFT

Функция гибридизации Δ^1 позволяет оптимизировать начальную точку теории возмущений и должна быть выбрана оптимальным образом. Условие, что первая диаграмма 1.1(a) в разложении собственной энергии должна равняться нулю на всех частотах, фиксирует функцию гибридизации. Это исключает следующие порядки диаграммных поправок к собственной энергии и устанавливает связь с DMFT. Так-как $\gamma^{(4)}$ - локальна, это условие требует чтобы локальная часть дуальной функции Грина равнялась нулю

$$\sum_{\mathbf{k}} \tilde{G}_{\omega\mathbf{k}} = 0 \quad (1.22)$$

Из вида (1.14) для дуальной функции Грина получаем

$$G_{\omega\mathbf{k}}^{\text{DMFT}} - g_{\omega} = [g_{\omega}^{-1} + \Delta_{\omega} - h_{\mathbf{k}}]^{-1} - g_{\omega} = \tilde{G}_{\omega\mathbf{k}}^{(0)} \quad (1.23)$$

Откуда немедленно вытекает, что выражения (1.22) взятое с $\tilde{G}^{(0)}$ эквивалентно условию самосогласования для DMFT

$$\sum_{\mathbf{k}} \tilde{G}_{\omega\mathbf{k}}^{(0)} = 0 \iff \sum_{\mathbf{k}} G_{\omega\mathbf{k}}^{\text{DMFT}} = g_{\omega} \quad (1.24)$$

Следовательно DMFT является нулевым приближением дуального подхода и поправки включены пертурбативно. Когда включены диаграммные поправки и первая диаграмма вычислена со скелетной функцией Грина $\tilde{G}_{\omega k}^{-1} = \tilde{G}_{\omega k}^{-1} - \tilde{\Sigma}_{\omega k}$, то условие (1.22) в общем случае нарушается. Условие восстанавливается при изменении функции гибридизации на каждой итерации. На практике функция гибридизации обновляется по правилу

$$\Delta_{\omega}^{\text{new}} = \Delta_{\omega}^{\text{old}} + g_{\omega}^{-1} \frac{\tilde{G}_{\omega}^{\text{loc}}}{G_{\omega}^{\text{loc}}} \quad (1.25)$$

Это процедура проиллюстрирована внутренним циклом на рис.(1.3), эффективно заменяющая диаграмму (1.20) на соответствующую ей скелетную диаграмму. Теперь новая функция гибридизации становится отправной точкой для вычисления перенормированных вершин $\gamma^{(4)}, \gamma^{(6)}, \dots$ во внешней цикле, повторяющимся до выполнения условия самосогласования (1.22).

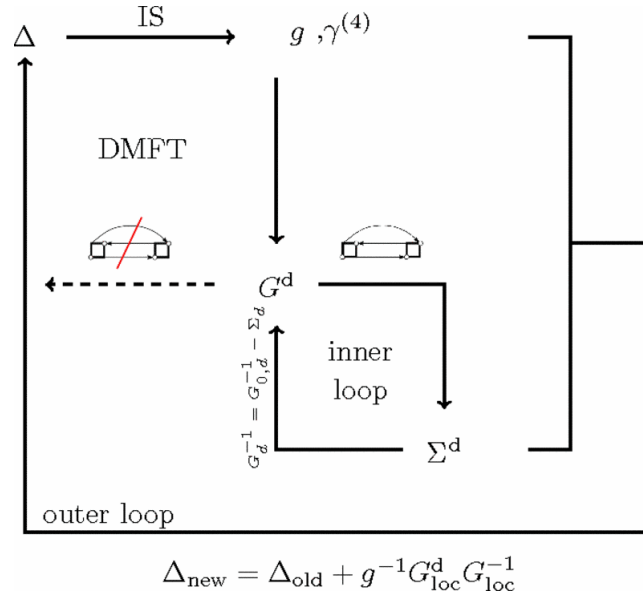


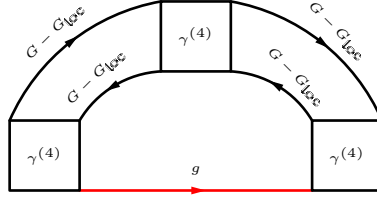
Рис. 1.3: Процедура вычислений методом дуальных фермионов

1.8 Метод одно-частичного неприводимого функционала (1-particle irreducible approach, 1PI)

В работе [16] была рассмотрена другая диаграммная техника, в основном схожая с методом дуальных фермионов, но использующая преобразование Лежандра для введения функционалов ϕ^+ и ϕ от фермионных полей η^+, η в соответствующую DMFT часть действия (1.13). Также было показано, что диаграммы (например рис. 1.8) в методе 1PI будут

¹ В этой работе функция гибридизации не учитывается ($\Delta = 0$), т.е. вычисления проводятся в атомном пределе.

содержать поправки к собственной энергии, не доступные дуальному методу при использовании лишь двух-частичных вершин, т.е. для их учета необходимы уже трех-частичные вершины.



1.9 Диаграммы высшего порядка

Будут рассчитываться две диаграммы. Следуя методу дуальных фермионов строится простейшая диаграмма, содержащая трёх-частичную вершину

$$\begin{array}{c} \text{Diagram 1} \end{array} = \sum_{\sigma} \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 2} \end{array} + \begin{array}{c} \text{Diagram 3} \end{array} + \begin{array}{c} \text{Diagram 4} \end{array} \right] \quad (1.26)$$

Следуя методу одно-частичных неприводимых функционалов, диаграмма содержит только двух-частичные вершины

$$\begin{array}{c} \text{Diagram 1} \end{array} = \begin{array}{c} \text{Diagram 2} \end{array} + \sum_{\sigma} \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 3} \end{array} + \begin{array}{c} \text{Diagram 4} \end{array} \right] \quad (1.27)$$

По правилам на стр.4 строятся соответствующие формулы для собственной энергии

$$\tilde{\Sigma}_{\omega}^c = (-1)^2 \frac{1}{2!} \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{K}} \beta^{-3} \sum_{\omega', \omega''} \chi_{\omega' \Omega}^{(0)} \left[\Gamma_{\omega \omega'}^{\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow} \Gamma_{\omega' \omega''}^{\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow} \Gamma_{\omega \omega''}^{\downarrow \downarrow \uparrow \uparrow} + \sum_{\sigma} \left(\Gamma_{\omega \omega'}^{\uparrow \sigma \sigma \uparrow} \Gamma_{\omega' \omega''}^{\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow} \Gamma_{\omega \omega''}^{\downarrow \sigma \sigma \downarrow} + \Gamma_{\omega \omega'}^{\uparrow \sigma \sigma \uparrow} \Gamma_{\omega' \omega''}^{\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow} \Gamma_{\omega \omega''}^{\uparrow \sigma \sigma \uparrow} \right) \right]_{\mathbf{K}} \chi_{\omega'' \Omega}^{(0)} G_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}^{\omega+\Omega} \quad (1.28)$$

$$\tilde{\Sigma}_{\omega}^d = (-1)^2 \frac{1}{2!} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{K}} \sum_{\sigma} \beta^{-3} \sum_{\omega', \omega''} \chi_{\omega' \Omega}^{(0)} \left[\gamma_{\omega \omega' \omega''}^{(6) \sigma \sigma \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow} \gamma_{\omega' \omega''}^{(4) \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow} + \gamma_{\omega \omega' \omega''}^{(6) \sigma \sigma \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow} \gamma_{\omega' \omega''}^{(4) \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow} + \gamma_{\omega \omega' \omega''}^{(6) \sigma \sigma \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow} \gamma_{\omega' \omega''}^{(4) \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow} \right]_{\mathbf{K}} \chi_{\omega'' \Omega}^{(0)} g_{\omega+\Omega} \quad (1.29)$$

Глава 2

Ход работы

2.1 Модель

Гамильтониан $d = 2$ примесной задачи без гибридизации

$$H^{\text{imp}} = -\mu(\mathbf{n}_{\uparrow} + \mathbf{n}_{\downarrow}) + U\mathbf{n}_{\uparrow}\mathbf{n}_{\downarrow} \quad (2.1)$$

В режиме полузаполнения $\mu = \frac{U}{2}$.

2.2 Блоки и линии диаграммы

Приводимая двух-частичная и трех-частичная функции Грина примесной задачи

$$\begin{aligned} \chi_{1234} &= \left\langle T \hat{c}_1 \hat{c}_2^{\dagger} \hat{c}_3 \hat{c}_4^{\dagger} \right\rangle_{\text{imp}} \\ \chi_{123456} &= - \left\langle T \hat{c}_1 \hat{c}_2^{\dagger} \hat{c}_3 \hat{c}_4^{\dagger} \hat{c}_5 \hat{c}_6^{\dagger} \right\rangle_{\text{imp}} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Соответствующие неприводимые функции

$$\begin{aligned} \gamma^{(4)} &= g_{11'}^{-1} g_{22'}^{-1} (\chi_{11'22'} + \chi_{12} \chi_{1'2'} - \chi_{12'} \chi_{1'2}) g_{33'}^{-1} g_{44'}^{-1} \\ \gamma^{(6)} &= g_{11'}^{-1} g_{22'}^{-1} g_{33'}^{-1} g_{44'}^{-1} g_{55'}^{-1} g_{66'}^{-1} (\chi_{11'22'3'3'} \\ &\quad - 2\chi_{11'} \chi_{22'} \chi_{33'} + 2\chi_{11'} \chi_{23'} \chi_{32'} - 2\chi_{12'} \chi_{23'} \chi_{31'} \\ &\quad + 2\chi_{12'} \chi_{21'} \chi_{33'} - 2\chi_{13'} \chi_{21'} \chi_{32'} + 2\chi_{13'} \chi_{22'} \chi_{31'} \\ &\quad + \chi_{11'} \chi_{22'33'} - \chi_{12'} \chi_{21'33'} + \chi_{13'} \chi_{21'32'} \\ &\quad - \chi_{21'} \chi_{12'33'} + \chi_{22'} \chi_{11'33'} - \chi_{23'} \chi_{11'32'} \\ &\quad + \chi_{31'} \chi_{12'23'} - \chi_{32'} \chi_{11'23'} + \chi_{33'} \chi_{11'22'}) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Удобно вместо последовательных временных аргументов использовать интервалы, соответствующие порядку операторов на рисунке 2.1. Переход к новым переменным осуществляется следующей заменой

$$\begin{aligned} \tau_4 &\rightarrow 0 \\ \tau_3 &\rightarrow \tau_1 \\ \tau_2 &\rightarrow \tau_1 - T \\ \tau_1 &\rightarrow \tau_1 - T + \tau_2 \end{aligned} \quad (2.4)$$

Что соответствует следующей замене в частотном представлении

$$\begin{aligned} \omega_1 &\rightarrow \omega \\ \omega_2 &\rightarrow \omega + \Omega \\ \omega_3 &\rightarrow \omega' + \Omega \\ \omega_4 &\rightarrow \omega' \end{aligned} \quad (2.5)$$

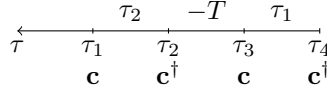


Рис. 2.1:

Линия, в нулевом приближении, равна

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{\omega k}^{(0)} &= -g_\omega^2 (g_\omega - \epsilon_k^{-1})^{-1}, \text{ где} \\ g_\omega &= \int_0^\beta d\tau \left(-\langle \mathbf{c}_\uparrow(\tau) \mathbf{c}_\uparrow^\dagger(0) \rangle \right) e^{i\omega\tau} = \frac{-i\omega}{\omega^2 + \mu^2} \\ \epsilon_k &= -2t(\cos k_x + \cos k_y).\end{aligned}\tag{2.6}$$

Лестничная диаграмма в целом характеризуется волновым вектором K и частотой Ω .

Для удобства две промежуточные линии на диаграммах можно обозначить новой величиной

$$\tilde{\chi}_{\Omega K}^{(0)} = - \int_k \tilde{G}_{\omega k} \tilde{G}_{\omega+\Omega, k+K} \tag{2.7}$$

где суммирование \sum_ω проводится по мадубаровским частотам $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$, $n \in \mathbb{Z}$ и $\int_k \equiv \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^\pi d^2k$.

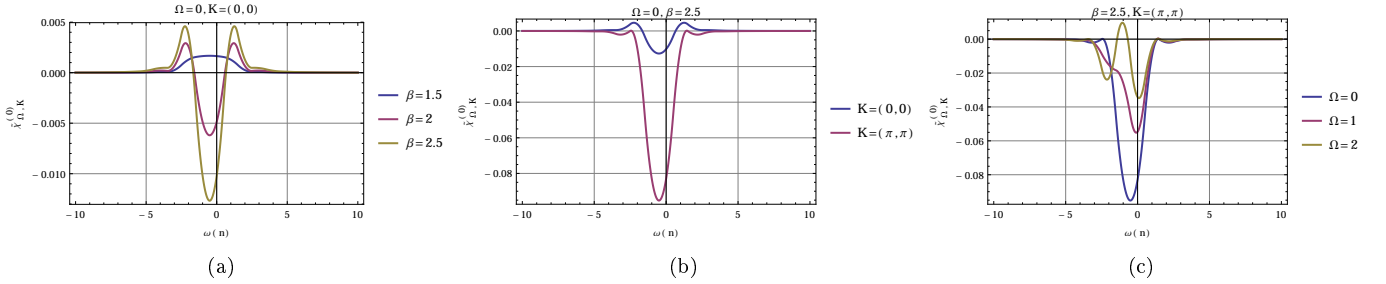


Рис. 2.2: Зависимости $\tilde{\chi}^{(0)}$ от частоты при различных параметрах

Как можно легко заметить $\tilde{\chi}^{(0)}$ быстро затухает с частотой, поэтому в численных расчетах можно ограничиться определенным диапазоном частот $\{-\frac{2N+1}{\beta}\pi, \frac{2N+1}{\beta}\pi\}$, и вне которого $\tilde{\chi}^{(0)} = 0$.

2.3 Расчет лестничной диаграммы

Приведем численный расчет собственной энергии в лестничном приближении. В атомном пределе, в отсутствии гибридизации $\Delta \equiv 0$ гамильтониан задачи (2.1) разрешает аналитическое решение для функций Грина и вершин $\gamma^{(4)}, \gamma^{(6)}$. Зная выражения для вершин, импульсное и частотное пространство разбиваются на сетки и производится суммирование по соответствующим формулам. Процедура суммирования производится несколько раз, на каждом этапе цикла “ожирняя” функцию Грина, что соответствует внутреннему циклу (1.3) процедуры расчетов в методе дуальных фермионов.

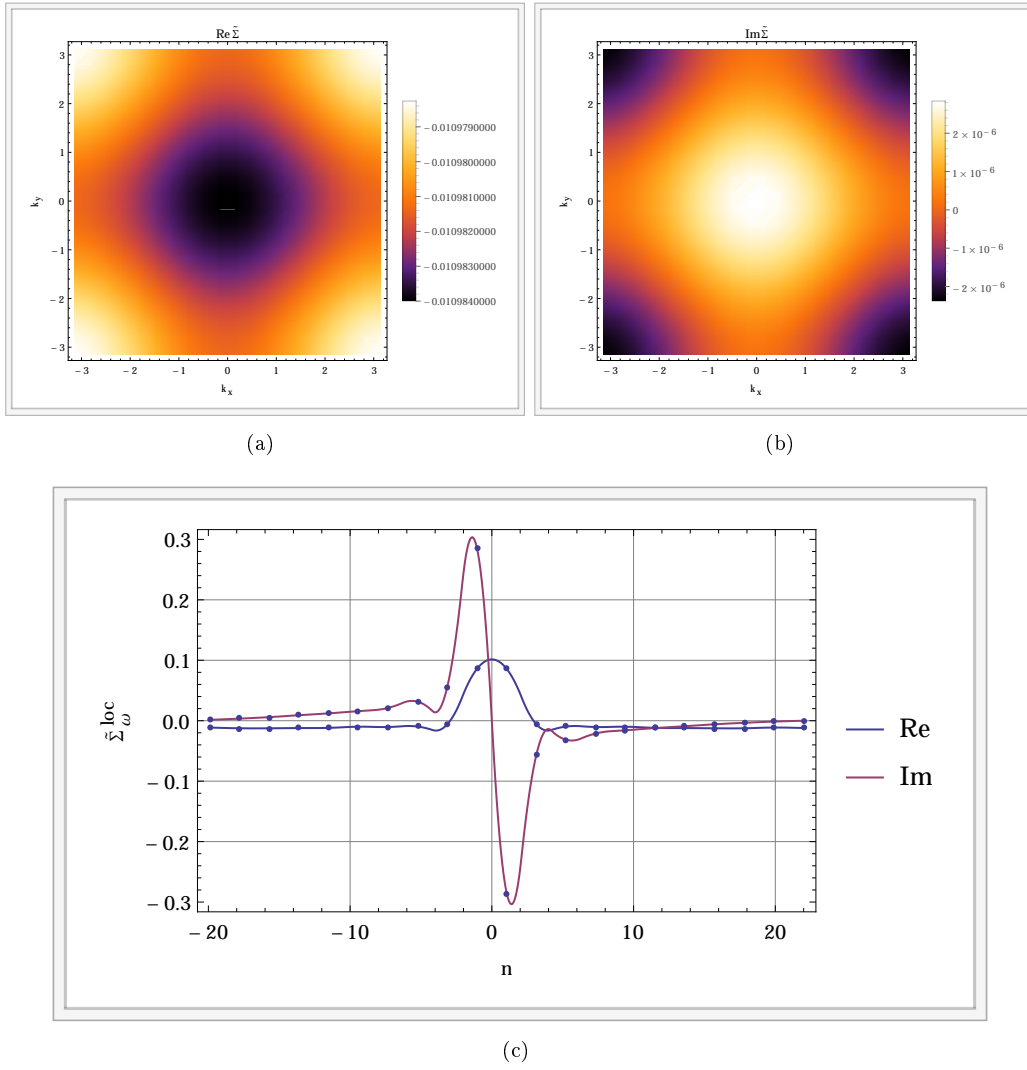


Рис. 2.3: Зависимости действительной и мнимой части собственной энергии в лестничном приближении от импульса (a,b) и от частоты (c) после 30-и итераций цикла. $\beta = 3$, $U = 1$, $t = 0.25$

2.4 Расчет диаграмм третьего порядка

Вместе с лестничным приближением, аналогично считаются локальные диаграммы рассмотренные в разделе (1.9).

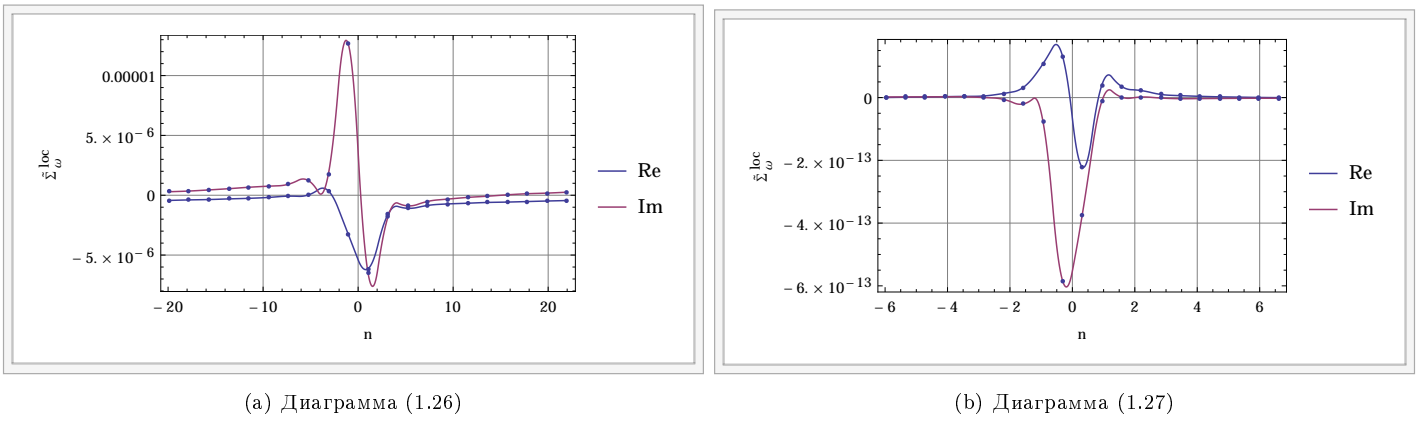


Рис. 2.4: Зависимости действительной и мнимой части собственной энергии для двух диаграмм третьего порядка после 30-и итераций цикла. $\beta = 3$, $U = 1$, $t = 0.25$

2.5 Заключение

При выполнении работы была написана программа в системе Mathematica, состоящая из следующих частей

- Аналитическое решение примесной задачи (2.1) и получение выражений для вершин во временном пространстве
- Численное быстрое преобразование Фурье в пространство Мацубары
- Расчет дуальной вершины методом матричного обращения
- Расчет лестничной диаграммы для дуальной собственной энергии (1.20)
- Расчет диаграмм (1.26) и (1.27)

Таким образом можно сделать вывод о принципиальной возможности суммирования диаграмм вокруг атомного предела используя точные аналитические выражения для вершин примесной задачи.

Литература

- [1] Philip W Anderson and Philip W Anderson. *Basic notions of condensed matter physics*, volume 55. Benjamin/Cummings Publishing Company, Advanced Book Program, 1984.
- [2] PW Anderson. The theory of superconductivity in the high-t cuprates. *Princeton Series in Physics*, 1997.
- [3] VI Anisimov, AI Poteryaev, MA Korotin, AO Anokhin, and G Kotliar. First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: dynamical mean-field theory. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 9(35):7359, 1997.
- [4] S. Brener, H. Hafermann, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein. Dual fermion approach to susceptibility of correlated lattice fermions. *Phys. Rev. B*, 77:195105, May 2008.
- [5] J. P. Remeika W. F. Brinkman D. B. McWhan, A. Menth and T. M. Rice. Theoretical methods for strongly correlated electrons, chap 6. 1973.
- [6] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, and Marcelo J Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Reviews of Modern Physics*, 68(1):13, 1996.
- [7] Alexander Cyril Hewson. *The Kondo problem to heavy fermions*. Number 2. Cambridge university press, 1997.
- [8] V Yu Irkhin, AA Katanin, and MI Katsnelson. Effects of van hove singularities on magnetism and superconductivity in the t-t' hubbard model: A parquet approach. *Physical Review B*, 64(16):165107, 2001.
- [9] V Yu Irkhin, AA Katanin, and MI Katsnelson. Robustness of the van hove scenario for high-t c superconductors. *Physical review letters*, 89(7):076401, 2002.
- [10] AA Katanin, A Toschi, and K Held. Comparing pertinent effects of antiferromagnetic fluctuations in the two-and three-dimensional hubbard model. *Physical Review B*, 80(7):075104, 2009.
- [11] Gabriel Kotliar and Dieter Vollhardt. Strongly correlated materials: Insights from dynamical mean-field theory. *Physics Today*, 57(3):53–60, 2004.
- [12] AI Lichtenstein and MI Katsnelson. Ab initio calculations of quasiparticle band structure in correlated systems: Lda++ approach. *Physical Review B*, 57(12):6884, 1998.
- [13] Gerald D Mahan. *Many particle physics*. Springer, 2000.
- [14] Nevill Francis Mott and L Friedman. Metal-insulator transitions in vo2, ti2o3 and ti2-x v x o3. *Philosophical Magazine*, 30(2):389–402, 1974.
- [15] JW Negele and H Orland. Quantum many-particle systems (boulder, co, 1998.
- [16] G. Rohringer, A. Toschi, H. Hafermann, K. Held, V. I. Anisimov, and A. A. Katanin. One-particle irreducible functional approach - a new route to diagrammatic extensions of dmft. 2013.
- [17] A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein. Dual fermion approach to nonlocal correlations in the hubbard model. *Phys. Rev. B*, 77:033101, Jan 2008.
- [18] Alexey N Rubtsov, Vladimir V Savkin, and Alexander I Lichtenstein. Continuous-time quantum monte carlo method for fermions. *Physical Review B*, 72(3):035122, 2005.
- [19] Douglas J Scalapino. The case for $d_{x^2-y^2}$ pairing in the cuprate superconductors. *Physics Reports*, 250(6):329–365, 1995.
- [20] Alessandro Toschi, AA Katanin, and Karsten Held. Dynamical vertex approximation: A step beyond dynamical mean-field theory. *Physical Review B*, 75(4):045118, 2007.