Московский Государственный Университет

Название

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

28 мая 2014 г.

Оглавление

0.1 Формализм дуальных фермионов

Ищется приближенное решение обобщенной задачи со следующим действием

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

Здесь $h_{\mathbf{k}\sigma}$ - одноэлектронная часть Гамильтониана, $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta, n = 0, \pm 1, \ldots$ - 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 квазимомента, а c^*,c - Грасмановы переменные. H_{int} может быть любым типом взаимодействия. Единственное ограничение, что оно локально в пределах атома или кластера. Кулоновское взаимодействие например

$$H_{\text{int}}[c^*_i, c_i] = \frac{1}{4}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau U_{1234} c^*_{i1} c^*_{i2} c_{i3} c_{i4} \tag{2}$$

Где U - сила кулоновского взаимодействия, а индексы (*напр.* $1 \equiv \omega_1 m_1 \sigma_1$) 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), введем действие для локальное примесив в виде

$$S_{\text{imp}}[c^*, c] = -\sum_{\omega\sigma mm'} c^*_{\omega\sigma m}((i\omega+\mu)\mathbf{1} - \Delta_{\omega\sigma})_{mm'}c_{\omega\sigma m'} + H_{int}[c^*, c] \tag{3}$$

Где Δ - пока неизвестная матрица гибридизации, описывающая взаимодействие между примесью и термостатом.

Из-за локальности Δ возможно расцепление взаимодействующих узлов и действие 1 можно переписать как

$$S[c^*, c] = \sum_i S_{\text{imp}}[c^*_{\omega i\sigma m'}, c_{\omega i\sigma m}] - \sum_{\omega\mathbf{k}\sigma mm'} c^*_{\omega\mathbf{k}\sigma m}(\Delta_{\omega\sigma} - h_{\mathbf{k}\sigma})_{mm'}c_{\omega\mathbf{k}\sigma m'} \tag{4}$$

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

$$\int \exp\left(-\mathbf{f}^*\hat{A}\mathbf{f} - \mathbf{f}^*\hat{B}\mathbf{c} - \mathbf{c}^*\hat{B}\mathbf{f}\right)\mathcal{D}[\mathbf{f}^*, \mathbf{f}] = \det(\hat{A})\exp\left(\mathbf{c}^*\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\mathbf{c}\right) \tag{5}$$

Выбирая

$$
\begin{aligned}
A &= g_{\omega\sigma}^{-1}(\Delta_{\omega\sigma} - h_{\mathbf{k}\sigma})^{-1} g_{\omega\sigma}^{-1} \\
B &= g_{\omega\sigma}^{-1}
\end{aligned}
\tag{6}
$$

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

$$
S[\mathbf{c}^*, \mathbf{c}, \mathbf{f}^*, \mathbf{f}] = \sum_i S_{\text{site},i} + \sum_{\omega\mathbf{k}\sigma} \left[\mathbf{f}^*_{\omega\mathbf{k}\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1}(\Delta_{\omega\sigma} - h_{\mathbf{k}\sigma})^{-1} g_{\omega\sigma}^{-1} \mathbf{f}_{\omega\mathbf{k}\sigma} \right] \tag{7}
$$

Таким образом взаимодействие между узлами заменилось на взаимодействие с дуальными фермионами

$$
S_{\text{site},i} = S_{\text{imp}}[\mathbf{c}^*, \mathbf{c}] + \mathbf{f}^*_{\omega i\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} \mathbf{c}_{\omega i\sigma} + \mathbf{c}^*_{\omega i\sigma} g_{\omega i\sigma}^{-1} \mathbf{f}_{\omega i\sigma} \tag{8}
$$

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

$$
\int \exp\left(-S_{\text{site}}[\mathbf{c}_i^*, \mathbf{c}_i, \mathbf{f}_i^*, \mathbf{f}_i]\right) \mathcal{D}[\mathbf{c}_i^*, \mathbf{c}_i] = Z_{\text{imp}} e^{\left(-\sum_{\omega\sigma} \mathbf{f}^*_{\omega i\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} \mathbf{f}_{\omega i\sigma} + V_i[\mathbf{f}_i^*, \mathbf{f}_i]\right)} \tag{9}
$$

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

$$
V[\mathbf{f}^*, \mathbf{f}] = \frac{1}{4} \sum_i \gamma^{(4)}_{1234} \mathbf{f}^*_{i1} \mathbf{f}^*_{i2} \mathbf{f}_{i3} \mathbf{f}_{i4} + \dots \tag{10}
$$

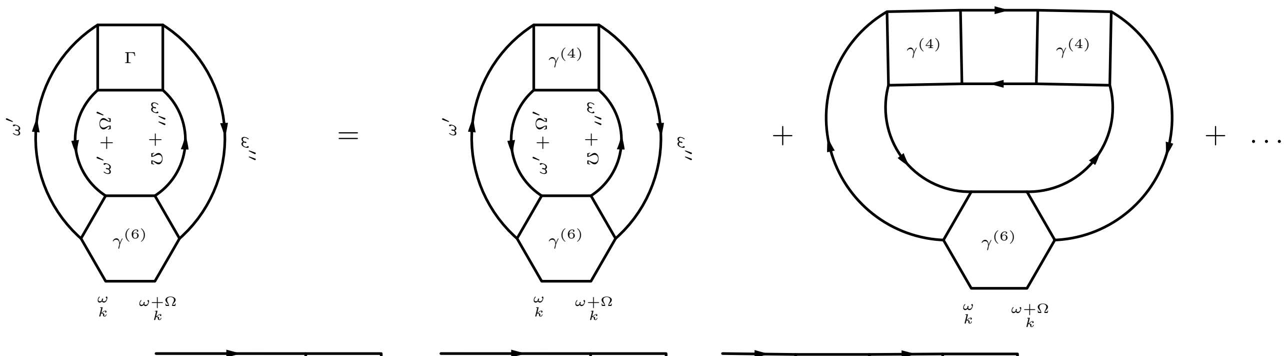
Где

$$
\begin{aligned}
\gamma^{(4)}_{1234} &= g_{11'}^{-1} g_{22'}^{-1} \left[\chi^{\text{imp}}_{1'2'3'4'} - \chi^{\text{imp},0}_{1'2'3'4} \right] g_{33'}^{-1} g_{4'4}^{-1} \\
\chi^{\text{imp},0}_{1234} &= g_{14} g_{23} - g_{13} g_{24}
\end{aligned}
\tag{11}
$$

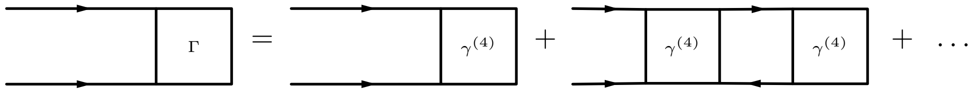
- четырех-частичная приводимая вершина для решеточных фермионов. Локальная двух-частичная функция Грина примесной задачи определена как

$$
\chi^{\text{imp}}_{1234} = \frac{1}{Z_{\text{imp}}} \int \mathbf{c}_1 \mathbf{c}_2 \mathbf{c}_3^* \mathbf{c}_4^* \exp\left(-S_{\text{imp}}[\mathbf{c}^*, \mathbf{c}]\right) \mathcal{D}[\mathbf{c}^*, \mathbf{c}] \tag{12}
$$

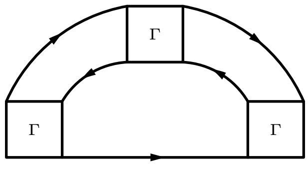
0.2 Диаграмма собственной энергии с трёх-частичной вершиной



(13)



(14)



(15)

$$\Sigma_1 = \sum_{\substack{\omega\omega' \\ \Omega\Omega'}} \Gamma_{\substack{\omega\omega' \\ \Omega'}} \chi^{(0)}_{\omega\Omega'} \Gamma_{\substack{\omega'\omega'' \\ \Omega}} \chi^{(0)}_{\omega''\Omega} \Gamma_{\substack{\omega''\omega \\ \Omega}} G_{\omega+\Omega} \tag{16}$$

$$\Sigma_2 = \sum_{\substack{\omega\omega' \\ \Omega\Omega'}} \gamma^{(6)}_{\substack{\omega\omega'\omega'' \\ \Omega\Omega'}} \chi^{(0)}_{\omega'\Omega'} \Gamma_{\substack{\omega'\omega'' \\ \Omega}} \chi^{(0)}_{\omega'\Omega} \tag{17}$$

0.3 Блок диаграммы. Вершинная функция.

Приводимая двухчастичная функция Грина

$$\chi^{\sigma_1\sigma_2}_{\sigma_3\sigma_4}(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) = \left\langle \mathrm{T}\hat{c}_1\hat{c}_2^\dagger\hat{c}_3\hat{c}_4^\dagger \right\rangle \tag{18}$$

Определим новые временные переменные, соответствующие порядку операторов на рисунке 1

$$\begin{aligned} \tau_4 &\to 0 \\ \tau_3 &\to \tau_1 \\ \tau_2 &\to T \\ \tau_1 &\to \tau_1 - T \end{aligned} \tag{19}$$

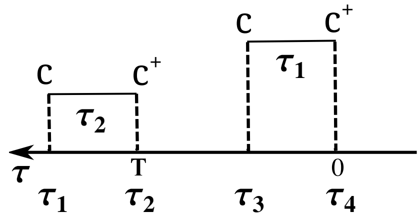


Рис. 1

Линия, в нулевом приближении, равна

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{(0)}_{\omega k} &= -g^2_\omega(g_\omega - \epsilon_k^{-1})^{-1}, \text{ где} \\ g_\omega &= \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \left(-\left\langle c_\uparrow^\dagger(\tau)c_\uparrow(0) \right\rangle \right) e^{i\omega\tau} = \frac{-i\omega}{\omega^2+\mu^2} \\ \epsilon_k &= -2t(\cos k_x + \cos k_y). \end{aligned} \tag{20}$$

Лестница в целом характеризуется волновым вектором K и частотой Ω. “Внутренние” индексы будем использовать во временно́м представлении.

Таким образом, нам понадобятся величины

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}^{(0)}_{\Omega K\omega} &= -\int_k \tilde{G}_{\omega k}\tilde{G}_{\substack{\Omega+\omega \\ K+k}} \\ \tilde{\chi}^{(0)}_{\Omega K\tau} &= \beta^{-1}\sum_\omega \tilde{\chi}^{(0)}_{\Omega K\omega} e^{-i\omega\tau}, \end{aligned} \tag{21}$$

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

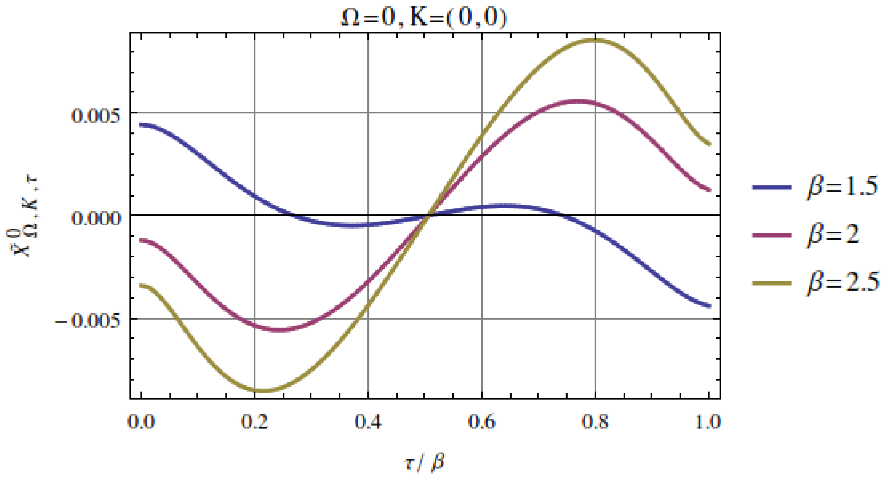


Рис. 2

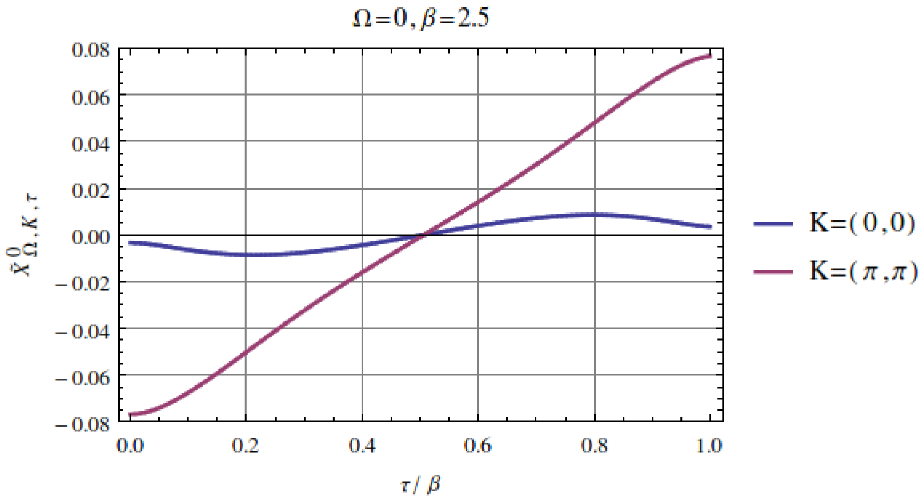


Рис. 3

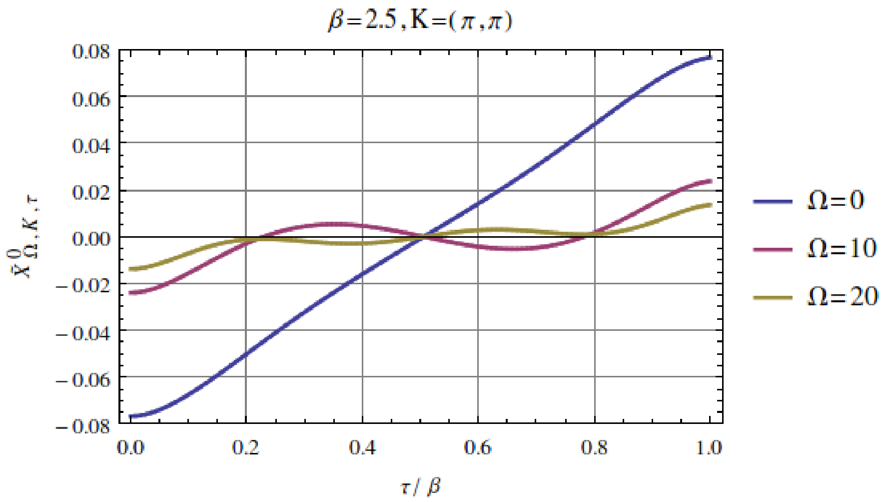


Рис. 4

0.4 Расчет диаграммы

$$\Gamma^{\alpha}_{\substack{\Omega K\\ \omega\omega'}} = \gamma_{\substack{\Omega\\ \omega\omega'}} - \beta^{-1}\sum_{\omega''}\gamma^{\alpha}_{\substack{\Omega\\ \omega\omega''}}\overbrace{\left(\int_k \tilde{G}_{\substack{\Omega+\omega''\\ K+k}}\tilde{G}_{\substack{\omega''\\ k}}\right)}^{-\tilde{\chi}^{(0)}_{\substack{\Omega K\\ \omega''}}}\Gamma^{\alpha}_{\substack{\Omega K\\ \omega''\omega'}} \tag{22}$$

$$\begin{aligned}\Gamma^{d}_{\substack{\Omega\\ \omega\omega''}} &= \Gamma^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}_{\substack{\Omega\\ \omega\omega''}} + \Gamma^{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}_{\substack{\Omega\\ \omega\omega''}}\\ \Gamma^{m}_{\substack{\Omega\\ \omega\omega''}} &= \Gamma^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}_{\substack{\Omega\\ \omega\omega''}} - \Gamma^{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}_{\substack{\Omega\\ \omega\omega''}}\end{aligned} \tag{23}$$

0.5 Расчет восприимчивости

$$\tilde{\chi}^{\alpha}_{\Omega K} = -\beta^{-1}\sum_{\omega}\tilde{\chi}^{(0)}_{\substack{\Omega K\\ \omega}} + \beta^{-2}\sum_{\omega\omega'}\tilde{\chi}^{(0)}_{\substack{\Omega K\\ \omega}}\Gamma^{\alpha}_{\substack{\Omega\\ \omega\omega'}}\tilde{\chi}^{(0)}_{\substack{\Omega K\\ \omega'}} \tag{24}$$

0.6 Лестничная диаграмма для $\tilde{\Sigma}$

$$\begin{aligned}&\tilde{\Sigma}^{\mathrm{LDFA}}_{\sigma\omega k} =\\ &-\beta^{-1}\sum_{\omega' k'\sigma'}\gamma^{\sigma\sigma\sigma'\sigma'}_{\omega'\omega\Omega=0}\tilde{G}_{\omega' k'}\\ &+\frac{1}{2}\beta^{-1}\sum_{\Omega K}\sum_{\omega'\sigma'}\gamma^{\sigma\sigma'\sigma'\sigma}_{\omega'\omega\Omega}\tilde{G}_{\substack{\omega+\Omega\\ k+K}}\tilde{\chi}^{(0)}_{\substack{\omega'\Omega\\ K}}\left[2\Gamma^{\sigma\sigma\sigma'\sigma'}_{\substack{\omega\omega'\Omega\\ K}} - \gamma^{\sigma\sigma\sigma'\sigma'}_{\omega\omega'\Omega}\right]\\ &+\frac{1}{2}\beta^{-1}\sum_{\Omega K}\sum_{\omega'}\gamma^{\sigma\sigma\overline{\sigma}\overline{\sigma}}_{\omega'\omega\Omega}\tilde{G}_{\substack{\omega+\Omega\\ k+K}}\tilde{\chi}^{(0)}_{\substack{\omega'\Omega\\ K}}\left[2\Gamma^{\sigma\overline{\sigma}\overline{\sigma}\sigma}_{\substack{\omega\omega'\Omega\\ K}} - \gamma^{\sigma\overline{\sigma}\overline{\sigma}\sigma}_{\omega\omega'\Omega}\right]\end{aligned} \tag{25}$$

Дальше скелетная функция Грина вычисляется по следующей формуле

$$\tilde{\mathbb{G}}^{-1}_{\omega k} = \tilde{G}^{-1}_{\omega k} - \tilde{\Sigma}_{\omega k} \tag{26}$$