#### Физический факультет

Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

На правах рукописи

Антипов Андрей Евгеньевич

# Особенности флуктуационного нарушения магнитного порядка в системах с сильными электронными корреляциями

01.04.09 – Физика низких температур

### ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

> Научный руководитель д. ф.-м. н. Рубцов А.Н.

# Содержание

Введен	ие		4
Глава 🗆	1. Teo	оретическое описание систем с сильными электрон-	10
<b>ны</b> м 1 1	Форманном континуальных ниторов нов. нид систом тож нострой		
1.1.	Форма	ылизм континуальных интегралов для систем тождествен-	11
	ных ф	иермионов	11
	1.1.1.	Континуальные интегралы	11
	1.1.2.	Континуальное интегрирование в задачах статистиче-	
		ской физики	14
	1.1.3.	Континуальный интеграл во вторично-квантованных мо-	
		делях многочастичных систем	15
	1.1.4.	Когерентные состояния бозонных полевых операторов .	17
	1.1.5.	Когерентные состояний фермионных полевых операто-	
		ров	19
	1.1.6.	Фермионный континуальный интеграл	22
	1.1.7.	Преобразование Хаббарда-Стратоновича	26
1.2.	Приме	есная модель Андерсона	29
	1.2.1.	Примесная модель Андерсона в виде континуального	
		интеграла	31
	1.2.2.	Методы решения примесной модели Андерсона	32
	1.2.3.	Стохастический подход к решению примесной задачи .	34
	1.2.4.	Алгоритм QMC с дискретным разбиением времени	36
	1.2.5.	Алгоритм QMC с непрерывным разбиением времени с	
		разложением по величине взаимодействия (CT-INT)	40
1.3.	Модел	њ Хаббарда	47
	1.3.1.	Магнитное упорядочение в модели Хаббарда	50

	1.3.2. Динамическая теория среднего поля	52		
	1.3.3. Метод дуальных фермионов	55		
Глав	а 2. Спиновая жидкость в модели Хаббарда на треуголь-			
но	ой решетке	65		
2.1	1. Введение	65		
2.2	Состояние спиновой жидкости и антиферромагнитного упоря-			
	дочения в модельных расчетах	67		
2.3	3. Спиновая поляризация в методе дуальных фермионов	68		
2.4	4. Результаты	73		
2.5	5. Обсуждение	76		
Глав	а 3. Роль вращательной симметрии в магнетизме много-			
30	онной модели Хаббарда	82		
3.2	1. Многоорбитальные эффекты в системах с сильными электрон-			
	ными корреляциями	82		
3.2	2. Динамическая теория среднего поля на многоорбитальной ре-			
	шетке Бете	84		
3.3	3. Результаты	86		
Заключение				
Приложение А. Гамильтониан многоорбитальной атомной за-				
дачи в представлении вторичного квантования				
Литература				

## Введение

Диссертационная работа посвящена теоретическому исследованию особенностей магнетизма систем с сильными электронными корреляциями в случае наличия сильных флуктуаций спина и орбитального момента. Под системами с сильными корреляциями подразумеваются ансамбль многих частиц, свойства которого не могут быть описаны в рамках парадигмы элементарных возбуждений. Отсутствие явного малого параметра требует использования численных теоретических методов, интерполирующих между режимами, доступными для аналитического исследования. В системах с сильными электронными корреляциями таким методом является динамическая теория среднего поля [1]. Нелокальные корреляции электронов системы и многоорбитальный характер их взаимодействия являются основной трудностью данной теории в настоящий момент. Эти два вопроса являются предметом исследования данной работы.

Коррелированные электронные системы обладают интересными свойствами элементарных возбуждений при низких температурах, связанных с конкуренцией квантовой делокализации электронов на решетке и их локальным кулоновским взаимодействием [2]. Следствием является структурное многообразие рассматриваемых веществ, сложность их фазовых диаграмм. В природе такие вещества являются соединениями переходных металлов с неспаренными валентными электронами в 3d и 4f оболочках (в отдельных случаях 5f, сюда также можно отнести некоторые случаи *p*-оболочек в органических материалах [3]).

Для рассматриваемых систем характерен ряд наблюдаемых эффектов. Наиболее известным из них является высокотемпературная сверхпроводимость в купратах [4]. Большая часть современных магнетиков обладают сильными электронными корреляциями, поскольку наличие в них нескомпенсиро-

4

ванного магнитного момента обусловлено неполным заполнением валентной оболочки в переходных металлах. В этой связи уместно упомянуть системы "тяжелых фермионов" [5], мультиферроики [6], а также эффект гигантского магнетосопротивления в множестве материалов, в том числе  $La_xSr_{1-x}O_3$ [7, 8].

Теоретическое описание магнитных свойств систем с сильными электронными корреляциями крайне затруднено. С одной стороны, использование традиционных среднеполевых подходов, как, например, критерий Стонера приводит к существенной переоценке вероятности образования ферромагнитного упорядочения [9]. Магнитные моменты в системах с сильными электронными корреляциями не являются локализованными, поэтому модель Гейзенберга для описания магнитного упорядочения на решетке часто оказывается неприменимой. С другой стороны, сложившаяся среднеполевая схема изучения систем с сильными электронными корреляциями применима тогда, когда нелокальные корреляции в системе пренебрежимо малы (собственно-энергетическая функция не зависит от квазиимпульса электрона), что существенно ограничивает описание решеточного магнитного упорядочения. Кроме того, необходимость использования численных методов вплоть до недавнего времени не давала возможности учитывать термовую структуру исследуемых систем, что в свою очередь приводило к невозможности описания таких эффектов, как орбитальное упорядочение в системе, а также служило источником ошибок при реалистических расчетах различных соединений. В данной работе применение метода дуальных фермионов [10], а также использование разработанной многопроцессорной версии алгоритма квантового метода Монте-Карло в непрерывном времени [11] позволило исследовать указанные проблемы.

Цель диссертационной работы состояла в теоретическом исследовании особенностей нарушения магнитного порядка в сильнокоррелированных

5

электронных системах в случае наличия сильных спиновых флуктуаций, вызванных фрустрацией решетки, и изменения характеристик моттовского фазового перехода из металлического в антиферромагнитное состояние при наличии дополнительных орбитальных степеней свободы.

Актуальность работы определяется сочетанием фундаментальности исследованных в работе физических проблем, применением новейших методов численного моделирования и использования теоретических моделей, ранее недоступных для исследования.

Научная новизна результатов диссертации состоит в реализации расчетной схемы метода дуальных фермионов для модели Хаббарда на треугольной решетке, реализации многопроцессорной версии алгоритма метода квантового Монте-Карло в непрерывном времени для решения примесной модели Андерсона (CT-QMC), изучения состояния спиновой жидкости в рамках семейства среднеполевых методов решения модели Хаббарда, расчета магнитной восприимчивости многоорбитальной модели Хаббарда, получения функции Грина и спектральной функции для гамильтониана с полной матрицей кулоновского взаимодействия.

Практическая значимость Результаты, изложенные в диссертации, обладают предсказательной силой и могут быть использованы для количественно точного моделирования экспериментально реализуемых систем - оксидов переходных металлов, оптических решеток, систем с тяжелыми фермионами, ВТСП-купратов итд.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

Модель Хаббарда при полузаполнении на треугольной решетке в конечном интервале параметра U/t обладает фазой без дальнего магнитного порядка - спиновой жидкостью. Данная фаза характеризуется наличи-

ем локализованного магнитного момента и обладает меньшей полной энергией, чем металлическое и антиферромагнитное состояния.

- В формировании состояния спиновой жидкости важную роль играют корреляции синглетного типа, которые могут быть описаны в рамках метода дуальных фермионов.
- Метод дуальных фермионов является чувствительным по отношению к динамическим корреляциям в системе, в то время как статическое упорядочение может быть эффективно описано в рамках динамической теории среднего поля.
- Учет полной матрицы кулоновского взаимодействия приводит к изменению характеристик фазового перехода металл-изолятор в многоорбитальной модели Хаббарда: понижению температуры перехода при заданной величине кулоновского взаимодействия на каждом узле решетки и увеличению критического U при фиксированной температуре. Различие в температурах перехода становится более существенным при допировании системы электронами или дырками.
- Различная степень вырождения основного состояния полного гамильтониана и гамильтониана с взаимодействием плотность-плотность приводит к различию в характере металлических фаз: в первом случае в плотности состояний одночастичных возбуждений в двухорбитальной модели Хаббарда при полузаполнении присутствует центральный «кондовский» пик, во втором такого пика нет.

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения, приложения и библиографии общим объемом 118 страниц, из них 10 рисунков и 1 таблица. Список цитированной литературы составляет 117 наименований, включая публикации автора по теме диссертации. Апробация работы происходила на следующих конференциях:

- SFB 668 International Workshop «Quantum transport in nanostructures», Гамбург, Германия, 8-10.10.2008 : А. Е. Antipov, А. N. Rubtsov. «Orbital spin liquid states on a triangular lattice».
- 2. VII Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», Троицк, 18.06.2009 : А.Е. Антипов, А.Н. Рубцов. «Orbital spin liquid states on a triangular lattice».
- 1st International Workshop «New generation in strongly correlated electron systems-2010», Лансароте, Испания, 20-25.06.2010 : А.Е. Antipov, A.N. Rubtsov. «Orbital spin liquid states and T-phase ordering on a triangular lattice».
- 4. Международная конференция «Realistic theories of correlated electrons in condensed matter», Россия, 01-08.08.2010 : A.E. Antipov. «Single-particle properties of quantum spin liquid in Hubbard model at triangular lattice».
- 5. Advanced school and workshop «Developments and prospects in quantum impurity physics», Дрезден, Германия, 30.05 10.06.2011 : A.E. Antipov. «Electron energy spectrum of the spin liquid state in a frustrated Hubbard model».

Материалы диссертации опубликованы в 2 печатных работах, из них 2 статьи в рецензируемых журналах [12, 13].

**Личный вклад автора** Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

## Общие определения

Работа посвящена изучению фермионных решеточных моделей, которые в общем виде можно записать следующим образом:

$$\hat{H} = -\sum_{ij\sigma\sigma'} t_{ij}c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma'} + \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''} U^{\sigma\sigma'\sigma''\sigma''}_{ijkl} c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma'}c^{\dagger}_{k\sigma''}c_{l\sigma'''}, \qquad (1)$$

где индексы *i*, *j*, *k*, *l* означают узлы решетки, а  $\sigma$  - спин. Основным объектом для изучения является одночастичная температурная функция Грина:

$$G_{12}(\tau) \equiv \langle \mathbb{T}c_1(\tau)c_2^{\dagger}(0) \rangle \tag{2}$$

$$G_{12}(i\omega_n) \equiv -\int_{0}^{\beta} \langle \mathbb{T}c_1(\tau)c_2^{\dagger}(0)\rangle e^{i\omega_n\tau}d\tau, \qquad (3)$$

где индексы 1, 2 =  $\{i, \sigma\}$  включают в себя решеточный и спиновой индексы,  $\tau$  - мнимое время,  $\omega_n$  - мацубаровская частота,  $\beta = 1/T$  - обратная температура. Полезны также следующие определения.

Двухчастичная функции Грина:

$$\chi_{1234} \equiv \langle \mathbb{T}c_1(\tau_1)c_2(\tau_2)c_3^{\dagger}(\tau_3)c_4^{\dagger}(\tau_4=0)\rangle$$
(4)

$$\chi_{1234}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}; \omega_{n_3}, \omega_{n_4} \equiv \omega_{n_1} + \omega_{n_2} - \omega_{n_3}) = \\ = -\int_0^\beta \langle \mathbb{T}c_1(\tau_1)c_2(\tau_2)c_3^{\dagger}(\tau_3)c_4^{\dagger}(0) \rangle \exp(i\omega_{n_1}\tau_1 + i\omega_{n_2}\tau_2 - i\omega_{n_3}\tau_3)d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3$$
(5)

$$\chi_{1234}^{0}(\omega_{1},\omega_{2};\omega_{3},\omega_{4}) = \beta \delta_{\omega_{1}\omega_{4}} \delta_{\omega_{2}\omega_{3}} G_{14}(\omega_{1}) G_{23}(\omega_{2}) - \beta \delta_{\omega_{1}\omega_{3}} \delta_{\omega_{2}\omega_{4}} G_{13}(\omega_{1}) G_{24}(\omega_{2})$$
(6)

Вершинная функция:

$$\gamma_{1234}^{(4)}(\omega_1,\omega_2;\omega_3,\omega_4) \equiv \sum_{1'2'3'4'} (G^{-1}(\omega_1))_{11'} (G^{-1}(\omega_2))_{22'}$$
$$\chi_{1234}(\omega_1,\omega_2;\omega_3,\omega_4) - \chi_{1234}^0(\omega_1,\omega_2;\omega_3,\omega_4) (G^{-1}(\omega_3))_{3'3} (G^{-1}(\omega_4))_{4'4}$$
(7)

## Глава 1

# Теоретическое описание систем с сильными электронными корреляциями

В данной главе содержится обзор теоретических оснований физики систем с сильными электронными корреляциями. Базовым для всего последующего изложения является лагранжев формализм квантовой механики и annaрат континуальных интегралов, которые удобно использовать для расчета статистических характеристик изучаемых систем (например, для определения статсуммы или функции Грина). Континуальное интегрирование вторично квантованных систем удобно производить в базисе когерентных состояний - собственных функций операторов рождения и уничтожения. Это позволяет перейти от функционального к численному интегрированию. Для бозонных систем данный аппарат хорошо развит в работах Глаубера [14] и Судоршана [15]. Для фермионных систем оператор уничтожения не обладает действительными или комплексными собственными значениями. Однако оказывается возможным ввести специальную антикоммутирующую алгебру чисел, в рамках которой определены собственные значения фермионного оператора уничтожения - грассмановы переменные. Материал этой главы имеет следующую структуру:

- Первый раздел посвящен континуальнуму интегрированию фермионных систем - вводятся грассмановы переменные, производится функциональное интегрирование и вводится величина действия. Также рассматриваются некоторые математические операции с грассмановыми переменными, такие как преобразование Хаббарда-Стратоновича.
- Второй раздел и третий разделы посвящены основным моделям сильно-

коррелированных электронных систем - примесной модели Андерсона и модели Хаббарда. Во втором разделе особое внимание уделено численному решению единичной примесной задачи при помощи квантового метода Монте-Карло.

 В третьем разделе вводятся основные методы решения решеточной задачи - модели Хаббарда. Рассмотрены простые пертурбативные случаи, а также введены среднеполевые методы решения - динамическая теория среднего поля и метод дуальных фермионов.

# 1.1. Формализм континуальных интегралов для систем тождественных фермионов

#### 1.1.1. Континуальные интегралы $^{1}$

Аппарат континуальных интегралов - это формализм квантовой механики, предложенный Дираком [18] и Фейнманом [19, 20] и являющийся продолжением механики Лагранжа. Его основная идея состоит в рассмотрении эволюции квантовомеханической системы как суперпозиции распространения вдоль различных траекторий в фазовом пространстве, каждой из которых соответствует амплитуда  $\exp(-i\frac{S}{\hbar})$ . При  $h \to 0$  все траектории, кроме экстремальных  $\delta S \to 0$ , являются быстроосциллирующими и их вклад оказывается равным 0, что соответствует принципу наименьшего действия в классической механике.

Поясним определение континуального интеграла на примере простой системы. Рассмотрим в координатном представлении эволюцию частицы в квантовомеханической системе под действием гамильтониана  $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})$  между состоянием с координатой q в момент времени t = 0 и состоянием с координатой

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Изложение данного раздела основано на лекциях [16] и книге [17].

q' в момент времени t = t':

$$A = \langle q' | \exp(-i\hat{H}t'/\hbar) | q \rangle = K(q', t'; q, 0)$$
(1.1)

Разделим интервал (0, t) на две части при помощи промежуточного времени  $t_1$ :

$$A = \langle q' | \exp(-i\hat{H}(t'-t_1)/\hbar) \exp(-i\hat{H}t_1/\hbar) | q \rangle$$
(1.2)

Введем умножение на единичный оператор  $\hat{I} = \int dq_1 |q_1\rangle \langle q_1|$  внутрь правой части (1.2):

$$A = \langle q' | e^{-i\hat{H}(t'-t_1)/\hbar} \int dq_1 | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-i\hat{H}t_1/\hbar} | q \rangle = \int dq_1 K(q', t'; q_1, t_1) K(q_1, t_1; q, 0).$$
(1.3)

Повторяя операции разделения и умножения N раз, получим:

$$K(q',t';q,0) = \int_{q_1\dots q_N} dq_1\dots dq_n K(q';q_N) K(q_N;q_N-1)\dots K(q_2;q_1) K(q_1;q)$$
(1.4)

Нетрудно заметить, что эволюция частицы во времени представлена в виде распространения вдоль траекторий вида  $q \to q_1 \to \ldots \to q'$ , причем для получения точной амплитуды A необходимо учитывать все возможные траектории. Для определения вклада от каждой траектории рассмотрим в пределе  $N \to \infty$  отрезок времени  $t_n - t_{n-1} = \frac{\delta}{\hbar}$ . Так как  $\delta \to 0$ , то можно воспользоваться разложением  $K(q_n, t_n; q_{n-1}, t_{n-1})$  в ряд Тейлора :

$$K(q_n, t_n; q_{n-1}, t_{n-1}) = \langle q_n | 1 - i\hat{H}\delta | q_{n-1} \rangle + o(\delta^2)$$
(1.5)

Воспользуемся следующим равенством для гамильтониана вида  $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$ :

$$\langle q_n | \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) | q_{n-1} \rangle \approx \int dp_j \langle q_n | p_j \rangle \langle p_j | q_{n-1} \rangle H(p_j, q_n) = = \int \frac{dp_j}{2\pi} H(p_j, q_n) \exp[ip_j(q_n - q_{n-1})], \quad (1.6)$$

где использовано определение дельта-функции  $\delta(q) = \int \frac{dp}{2\pi} e^{ipq}$  и равенство  $\langle p | q \rangle = e^{ipq}$ . Тогда

$$A_{n} = K(q_{n}, t_{n}; q_{n-1}, t_{n-1}) = \int \frac{dp_{j}}{2\pi} \exp\left[\delta(p_{j}\frac{(q_{n} - q_{n-1})}{\delta} - H(p_{j}, q_{n})\right] (1 + o(\delta^{2}))$$
(1.7)

Выполнив предельный переход  $\frac{(q_n-q_{n-1})}{\delta} = \dot{q}(t_n)$  при  $\delta \to 0$ , получим:

$$A_n = K(q_n, t_n; q_{n-1}, t_{n-1}) = \int \frac{dp_j}{2\pi} \exp\left[\delta(p_j \dot{q}_n - H(p_j, q_n))\right] (1 + o(\delta^2)). \quad (1.8)$$

Из формулы (1.8) видно, что эволюция  $A_n$  на каждом временном интервале включает в себя интегрирование по импульсу  $p_j$ . Таким образом в формуле (1.4) наряду с N-кратным интегрированием по координатам появится дополнительное N-кратное интегрирование по импульсам  $\prod_{i=1}^{n} dp_i$ . Фактической траекторией частицы является последовательный набор пар значений импульса и координат, т.е. точек в фазовом пространстве системы. Обозначим интеграл по таким траекториям следующим образом:

$$\lim_{N \to \infty} \int \prod_{n=1}^{N} dq_n \int \prod_{j=0}^{N} \frac{dp_j}{2\pi} \equiv \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q$$
(1.9)

Такой интеграл является функциональным - он имеет смысл только при интегрировании функционала от импульса и координаты. Будем называть его *континуальным* интегралом. Так как при предельном переходе  $N \to \infty$  выполняется следующее равенство:

$$\sum_{n} \delta f(t_n) = \frac{1}{\hbar} \int_{0}^{t'} f(t), \qquad (1.10)$$

то итоговое выражение для амплитуды перехода А примет вид

$$A = K(q', t'; q, 0) = \int \mathcal{D}p(t)\mathcal{D}q(t) \exp i \int_{0}^{t'} \frac{dt}{\hbar} \left(p\dot{q} - H(p, q)\right).$$
(1.11)

Полученное выражение имеет прямую связь с классической механикой. Функция  $L(t) = p\dot{q} - H(p,q)$  есть, по определению, лагранжиан системы, а интеграл  $S = \int_{a}^{t} L(t)dt$  является действием.

Результат, описанный Фейнманом в обзоре [19], позволяет использовать весь аппарат лагранжевой механики для задач квантовой физики. Кроме того формула (1.11) имеет наглядный оптический смысл - это принцип Гюйгенса - Френеля; итоговая амплитуда есть интерференция волн от вторичных источников. Классическим примером использования аппарата континуального интегрирования является описания эффекта Аронова-Бома [21].

# 1.1.2. Континуальное интегрирование в задачах статистической физики

Континуальное интегрирование является удобным инструментом для определения статистических свойств систем. Покажем, каким образом можно представить статистическую сумму в виде интеграла по траекториям.

Рассмотрим эволюцию во мнимом времени той же частицы, что и в §1.1.1. Пусть система находится в термодинамическом равновесии с термостатом с обратной температурой  $\beta = 1/T$ . Запишем амплитуду перехода частицы из состояния  $|q\rangle$  в момент времени t = 0 в то же состояние через мнимое время  $t = -i\beta$ :

$$K(q, -i\beta; q, 0) = \langle q | e^{-i\hat{H}(-i\beta)} | q \rangle = \sum_{j} e^{-\beta E_{j}} \langle j | q \rangle \langle q | j \rangle, \qquad (1.12)$$

где введены  $|j\rangle$  и  $E_j$  - собственные функции и энергии системы. Проведем интегрирование по всем начальным состояниям  $|q\rangle$ , используя тождество  $\int dq \, |q\rangle \, \langle q| = 1$ :

$$\int dq K(q, -i\beta; q, 0) = \sum_{j} e^{-\beta E_{j}} \langle j | j \rangle = \operatorname{Tr} e^{-\beta H} = Z$$
(1.13)

Представим амплитуду перехода  $K(q, -i\beta; q, 0)$  в виде интеграла по траекториям при помощи (1.11). Получим:

$$Z = \sum_{\substack{\mathbb{C} \\ \beta \\ S_E}} e^{-S_E}$$

$$S_E = \int_{0}^{\beta} d\tau (p \frac{\partial}{\partial \tau} q - H(p, q)),$$
(1.14)

где введено мнимое время au, а символом  $\mathbb{C}$  обозначено множество всех замкнутых ( $q(0) = q(\beta)$ ) фазовых траекторий системы.

Особенностью континуального интегрирования во мнимом времени является действительный экспоненциальный вклад в амплитуду распространения от каждой траектории. В отношение таких интегралов, называемых *евклидовыми*, разумно говорить о статистическом весе каждой траектории в определении статсуммы системы. Уместна прямая аналогия с распределением Гиббса - при низких температурах только некоторые состояния с наибольшим весом  $\exp(-\beta E_j)$  дают наибольший вклад в статистическую сумму. Аналогично в определении (1.14) только некоторые траектории из всего множества  $\mathbb{C}$  обладают существенным статистическим весом. Статистическая сумма системы является евклидовым интегралом по всем замкнутым траекториям в фазовом пространстве.

# 1.1.3. Континуальный интеграл во вторично-квантованных моделях многочастичных систем

Перейдем к описанию континуального интегрирования вторично квантованных моделей. Методы квантовой теории поля имеют широкое применение в физике конденсированного состояния [22]. В формализме чисел заполнения многочастичные волновые функции, обладающие правильной симметрией в зависимости от спина частицы, конструируются при помощи действия на вакуумное состояние полевых операторов, подчиняющихся коммутирующим и

15

антикоммутирующим соотношениям для бозонов и фермионов соответственно. Подобный подход также позволяет рассматривать системы с изменяющимся числом частиц.

Как следует из §1.1.1 для построения интеграла по траекториям эволюция квантовомеханической системы разбивается на бесконечное число малых отрезков времени, каждому из которых сопоставляется матричный элемент оператора эволюции в данном временном отрезке  $K_n = \langle j_n | \exp(-i\hat{H}) | j_{n-1} \rangle$ . Непосредственное разбиение временного интервала происходит при помощи многократного введения тождества

$$\sum_{j} \left| j \right\rangle \left\langle j \right| = \hat{I} \tag{1.15}$$

внутрь оператора эволюции. Таким образом для того, чтобы построить интеграл по траекториями, базисные состояния  $|j\rangle$  должны удовлетворять следующим требованиям:

- Набор базисных состояний должен быть полным необходимо выполнение тождества (1.15).
- Выбранные базисные функции должны давать возможность в явном виде получить матричные элементы оператора эволюции.

В качестве такого набора базисных состояний можно выбрать собственные функции системы - этот случай рассмотрен в §1.1.2. Однако нахождение собственных функций многочастичного гамильтониана при наличии взаимодействия в общем случае является невыполнимой задачей, поэтому необходимо выбрать другие базисные состояния для которых выполнены указанные два требования. Для многочастичной системы удобным выбором оказываются собственные функции оператора уничтожения - когерентные состояния.

В следующих двух параграфах введем определение когерентных состояний бозонных и фермионных полевых операторов и рассмотрим основные алгебраические свойства этих волновых функций.

#### 1.1.4. Когерентные состояния бозонных полевых операторов

Для любого комплексного числа z когерентым состоянием  $|z\rangle$  бозонного оператора рождения  $b^{\dagger}$  называется волновая функция вида:

$$|z\rangle = e^{b^{\dagger}z} |0\rangle \tag{1.16}$$

Эта функция является собственным состоянием оператора уничтожения  $|b\rangle$ :

$$\hat{b}|z\rangle = z|z\rangle \tag{1.17}$$

Она связана с фоковскими состояниями (собственными функциями гармонического осциллятора)  $|n\rangle$  соотношением вида:

$$|z\rangle = \sum_{n} |n\rangle \frac{z^{n}}{\sqrt{n!}}$$
(1.18)

Скалярное произведение когерентных состояний равно:

$$\langle z_1 | z_2 \rangle = \sum_{n,m} \frac{z_1^{*n} z_2^m}{\sqrt{n!m!}} \underbrace{\langle n | m \rangle}_{=\delta_{nm}} = \sum_n \frac{(z_1 z_2)^n}{n!} = e^{z_1^* z_2}.$$
 (1.19)

Для базиса когерентных состояний выполнены следующие свойства:

1. Матричные элементы нормально упорядоченных операторов выражаются путем подстановки комплексных чисел вместо полевых операторов:

$$\langle z_1 | \hat{O} [: b, b^{\dagger} :] | z_2 \rangle = e^{z_1^* z_2} O(z_1^*, z_2)$$
 (1.20)

2. Базис когерентых состояний является полным, т.е.

$$\sum_{z} \left| z \right\rangle \left\langle z \right| = \hat{I},\tag{1.21}$$

где под суммированием по всем комплексным числам  $z, z^*$  подразумевается следующее:

$$\sum_{z,z^*} = \int \frac{dz dz^*}{2\pi i} e^{-z^* z}$$
(1.22)

Приведем доказательства этих двух утверждений. Для начала заметим, что

$$\langle z_1 | (b^{\dagger})^n b^m | z_2 \rangle = (z_1^*)^n z_2^m \langle z_1 | z_2 \rangle = (z_1^*)^n z_2^m e^{z_1^* z_2}$$

Тогда

$$\langle z_1 | : O[b, b^{\dagger}] : |z_2\rangle = \langle z_1 | \sum_{mn} O_{mn}(b^{\dagger})^n b^m | z_2\rangle = = e^{z_1^* z_2} \sum_{mn} O_{mn}(z_1^*)^n z_2^m = e^{z_1^* z_2} O(z_1^*, z_2)$$
(1.23)

Для доказательства полноты базиса когерентных состояний рассмотрим равенство  $\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$  для фоковских функций  $|n \rangle$ ,  $|m \rangle$ . Подставим оператор  $\sum_{z} |z \rangle \langle z |$  внутрь левой части:

$$I_{nm} = \int \frac{dz dz^*}{2\pi i} e^{-z^* z} \langle n | z \rangle \langle z | m \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \int \frac{dz dz^*}{2\pi i} e^{-z^* z} (z^*)^m z^n \qquad (1.24)$$

Сделаем замену переменных  $z = re^{i\phi}, z^* = re^{-i\phi}$ . Тогда  $dzdz^* = 2irdrd\phi$ . Выражение для  $I_{nm}$  примет вид:

$$I_{nm} = \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \int 2r dr r^{n+m} e^{-r^2} \int_{0}^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} e^{i\phi(n-m)} = \delta_{nm} \frac{1}{n!} \int 2r dr r^{2n} e^{-r^2} = \delta_{nm} \frac{1}{n!} \int dx x^n e^{-x} = \delta_{nm}. \quad (1.25)$$

Таким образом

$$\langle n | m \rangle = \langle n | \sum_{z} | z \rangle \langle z | m \rangle$$
 (1.26)

Отсюда, в силу произвольности  $|m\rangle$ ,  $|n\rangle$ 

$$\sum_{z} |z\rangle \langle z| = \int \frac{dzdz^*}{2\pi i} \frac{|z\rangle \langle z|}{\langle z|z\rangle} = \hat{I}$$
(1.27)

Из свойства полноты базиса напрямую следует формула для расчета следа любого нормально упорядоченного оператора  $\hat{A}[b^{\dagger},b]$ :

$$\operatorname{Tr}\hat{A}[b^{\dagger},b] = \sum_{n} \langle n | \hat{A} | n \rangle = \sum_{mn} \langle m | \hat{A} | n \rangle \,\delta_{nm} \tag{1.28}$$

Так как  $\delta_{nm} = \sum_{z} \langle n | z \rangle \langle z | m \rangle$ , то

$$\operatorname{Tr}\hat{A}[b^{\dagger}, b] = \sum_{mnz} \langle z \underbrace{|m\rangle \langle m|}_{=1} \hat{A} \underbrace{|n\rangle \langle n|}_{=1} z \rangle =$$
$$= \sum_{z} \langle z|A|z \rangle = \int \frac{dzdz^{*}}{2\pi i} e^{-z^{*}z} \langle z|A|z \rangle \quad (1.29)$$

Таким образом, в силу выполнения двух указанных свойств, базис когерентных состояний подходит для построения интеграла по траекториям, формулу (1.29) можно применить для разложения статистической суммы  $Z = \text{Tr}e^{-\beta \hat{H}}$  по этому базису. Перейдем к описанию когерентных состояний фермионных операторов.

#### 1.1.5. Когерентные состояний фермионных полевых операторов

Основная трудность построения когеретных состояний фермионных операторов состоит в том, что фермиевский оператор уничтожения  $\hat{c}$  не имеет собственных значений на множестве комплексных чисел. Однако, если ввести антикоммутирующие переменные (*грассмановы переменные*), то можно получить аналог бозонных когерентных состояний и в случае фермионов.

#### Грассманова алгебра

Пусть c и  $\bar{c}$  — объекты, удовлетворяющие следующему коммутационному соотношению:

$$c\bar{c} + \bar{c}c = 0 \tag{1.30}$$

Такие объекты (они ни в каком смысле не сопряженные!) являются образующими антикоммутативной алгебры Грассмана. Любой элемент алгебры (любая функция c и  $\bar{c}$ ) являтся линейным по каждой из переменных:

$$F(\bar{c},c) = f_0 + f_1 c + \tilde{f}_1 \bar{c} + f_{12} \bar{c} c \qquad (1.31)$$

Все высшие степени c и  $\hat{c}$  зануляются, т.к. согласно определению  $c^2 = \bar{c}^2 = 0$ . Также потребуем, чтобы грассмановы переменные антикоммутировали с обычными фермионными операторами рождения и уничтожения:

$$c\hat{c} + \hat{c}c = 0, \qquad c\hat{c}^{\dagger} + \hat{c}^{\dagger}c = 0$$
 (1.32)

Аналогично (1.16) введем фермионное когерентное состояние:

$$|c\rangle = e^{\hat{c}^{\dagger}c} |0\rangle \tag{1.33}$$

Оно является собственным состоянием оператора  $\hat{c}$  и имеет вид:  $|c\rangle = |0\rangle + \hat{c}^{\dagger}c |0\rangle = |0\rangle - c|1\rangle = |0\rangle + |1\rangle c$ . Действительно,

$$\hat{c}|c\rangle = \hat{c}(|0\rangle - c|1\rangle) = 0 + c\hat{c}|1\rangle = c|0\rangle = c(|0\rangle - c|1\rangle) = c|c\rangle$$
(1.34)

Аналогично  $\langle \bar{c} | \hat{c}^{\dagger} = \langle \bar{c} | \bar{c}, \text{ если } \langle \bar{c} | = \langle 0 | - \langle 1 | \bar{c} = \langle 0 | + \bar{c} \langle 1 |$ . Из определения также следует связь когерентных и фоковских волновых функций:

$$\langle n | c \rangle = c^n, \qquad n = 0, 1 \tag{1.35}$$

Скалярное произведение двух когерентных состояний имеет вид:

$$\langle \bar{c} | c \rangle = \sum_{n=0,1} \langle \bar{c} | n \rangle \langle n | c \rangle = 1 + \bar{c}c = e^{\bar{c}c}$$
(1.36)

Интеграл по грассмановым переменным вводится аксиоматически согласно следующим правилам<sup>2</sup>:

$$\int dc \ 1 = 0, \qquad \int dc \ c = 1$$
 (1.37)

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Интересный исторический факт состоит в том, что Херманн Грассманн изобрел алгебру антикоммутирующих переменных в середине XIX века [23]. Широкое применение грассмановы переменные получили только через сто лет вместе с введением Феликсом Березиным интегрирования по этим числам [24].

Дифференциал *dc* — грассманова переменная, поэтому порядок записи подынтегральной функции и дифференциала имеет значение.

Большое практическое значение имеют следующие интегралы:

$$\int e^{-\bar{c}_i M_{ij} c_j} \prod_i (d\bar{c}_i dc_i) = \det M$$
(1.38)

$$\int \bar{c}_k c_l e^{-\bar{c}_i M_{ij} c_j} \prod_i (d\bar{c}_i dc_i) = (M^{-1})_{lk} \det M$$
(1.39)

В экспоненте стоит квадратичная форма грассмановых переменных с матрицей M размером  $N \times N$ . В справедливости этих равенств легко убедиться для случаев N = 1 и N = 2, явно разложив экспоненту в ряд Тейлора.

Базис фермионных когерентых состояний обладает теми же свойствами, что и бозонный:

1. Матричный элемент любого нормально упорядоченного оператора получается при помощи замены фермионных операторов на грассмановы переменные:

$$\langle \bar{c} | : A[c^{\dagger}, c] : | c \rangle = e^{\bar{c}c} A[\bar{c}, c]$$
(1.40)

2. Базис фермионных когерентных состояний является полным, т.е.

$$\sum_{\bar{c},c} |c\rangle \,\langle \bar{c}| = \hat{I},\tag{1.41}$$

где под суммированием по всем грассмановым переменным понимается

$$\sum_{\bar{c},c} = \int d\bar{c}dc e^{-\bar{c}c}$$

Доказательство первого утверждения аналогично приведенному в предыдущем параграфе. Для начала:

$$\langle \bar{c} | \, \hat{c}^{\dagger} \hat{c} \, | c \rangle = \langle \bar{c} | \, \bar{c}c \, | c \rangle = \langle \bar{c} | \, c \rangle \bar{c}c = e^{\bar{c}c} \bar{c}c \tag{1.42}$$

Любой оператор, зависящий от фермионных операторов, имеет разложение в ряд вида (1.31) (матричный элемент оператора рождения и уничтожения в степени, большей единицы, равен 0). Отсюда следует правильность формулы (1.40).

Для доказательства полноты базиса воспользуемся следующей формулой:

$$\int d\bar{c}dc e^{-\bar{c}c}c^n\bar{c}^m = \delta_{nm}, \qquad (n,m=0,1)$$
(1.43)

Тогда

$$\delta_{nm} = \int d\bar{c}dc e^{-\bar{c}c} \langle n | c \rangle \langle \bar{c} | m \rangle = \langle n | \int d\bar{c}dc e^{-\bar{c}c} | c \rangle \langle \bar{c} | m \rangle$$
(1.44)

Откуда, в силу произвольности  $\left|n\right\rangle,\left|m\right\rangle$  выполнено:

$$\int d\bar{c}dc e^{-\bar{c}c} \left|c\right\rangle \left\langle\bar{c}\right| = \hat{I} \tag{1.45}$$

Базис фермионных когерентных состояний может также быть использован для вычисления следа любого нормально-упорядоченного оператора. Аналогично (1.29) получим:

$$\operatorname{Tr}\hat{A}[\hat{c}^{\dagger},\hat{c}] = \int d\bar{c}dc e^{-\bar{c}c} \left\langle -\bar{c} \right| \hat{A} \left| c \right\rangle \tag{1.46}$$

#### 1.1.6. Фермионный континуальный интеграл

Поскольку в данной работе рассматриваются только фермионные модели, построение континуального интеграла будет произведено только для них. Однако в силу того, что правила использования фермионных и бозонных когерентных состояний одинаковы, построение континуального интеграла в бозонном случае не отличается от процедуры, приведенной ниже.

Для начала построим интеграл, выражающий статистическую сумму системы с одночастичным гамильтонианом (нормально-упорядоченным оператором)  $\hat{H}'(\hat{c}^{\dagger},\hat{c})$ .

$$Z = \text{Tr}e^{-\beta\hat{H}'} = \int d\bar{c}_1 dc_1 e^{-\bar{c}_1 c_1} \langle -\bar{c}_1 | e^{-\beta\hat{H}'} | c_1 \rangle$$
(1.47)

Как следует из §1.1.2 построение интеграла должно быть проведено во мнимом времени. Сама процедура построения полностью аналогична приведенной в §1.1.1. Разобъем интервал  $[0; \beta]$  на N отрезков:

$$e^{-\beta \hat{H}'} = \lim_{N \to \infty} (e^{-(\beta/N)\hat{H}'})^N = \underbrace{(1 - \varepsilon \hat{H}') \cdots (1 - \varepsilon \hat{H}')}_{\text{N сомножителей}}, \quad \varepsilon = \beta/N \tag{1.48}$$

Между каждым из N сомножителей вставим разложение единицы (1.45):

$$Z = \int \prod_{i=1}^{N-1} d\bar{c}_i dc_i e^{-\bar{c}_{N-1}c_{N-1}} \langle -\bar{c}_1 | (1 - \varepsilon \hat{H}') | c_{N-1} \rangle \times \\ \times e^{-\bar{c}_{N-2}c_{N-2}} \langle \bar{c}_{N-1} | (1 - \varepsilon \hat{H}') | c_{N-2} \rangle \times \cdots \times e^{-\bar{c}_1c_1} \langle \bar{c}_2 | (1 - \varepsilon \hat{H}') | c_1 \rangle \quad (1.49)$$

Для нахождения каждого  $\langle \bar{c}_{i+1} | (1 - \varepsilon \hat{H}') | c_i \rangle$  заменим операторы  $\hat{c}^{\dagger}, \hat{c}$  на параметры когерентных состояний  $\bar{c}, c$ :

$$\langle \bar{c}_{i+1} | 1 - \varepsilon \hat{H}(\hat{c}^{\dagger}, \hat{c}) | c_i \rangle = \langle \bar{c}_{i+1} | 1 - \varepsilon H(\bar{c}_{i+1}, c_i) | c_i \rangle \approx e^{\bar{c}_{i+1}c_i} e^{-\varepsilon H(\bar{c}_{i+1}, c_i)} \quad (1.50)$$

Определим ещё одну пару грассмановых переменных, по которым не идет интегрирование:  $\bar{c}_N = -\bar{c}_1, c_N = -c_1$ . Осталось собрать все выражения вместе и окончательно получить:

$$Z = \int \prod_{i=1}^{N-1} d\bar{c}_i dc_i e^{\bar{c}_{i+1}c_i} e^{-\varepsilon H'(\bar{c}_{i+1},c_i)} = \int \prod_{i=1}^{N-1} [d\bar{c}_i dc_i] \exp\left[\left(\frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_i}{\varepsilon}c_i - H'(\bar{c}_{i+1},c_i)\right)\varepsilon\right]^{(1.51)}$$

$$Z \simeq \int \mathcal{D}\bar{c}(\tau)\mathcal{D}c(\tau) \exp\left(\int_0^\beta d\tau [\bar{c}(\tau)(-\partial/\partial\tau)c(\tau) - H'(\bar{c}(\tau),c(\tau))]\right), \quad (1.52)$$

где под символом  $\mathcal{D}\bar{c}\mathcal{D}c$  подразумевается интегрирование по всем траекториям - последовательным наборам грассмановых переменных.

Предельный переход к последней формуле аналогичен (1.8). Набор грассмановых переменных  $c_i, \bar{c}_i$  в пределе  $N \to \infty$  был заменен на переменные  $c, \bar{c}$ , непрерывно зависящие от параметра  $\tau$ . Производная по  $\tau$  получается следующим образом:

$$\sum_{i} \frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_{i}}{\varepsilon} c_{i} \to \int_{0}^{\beta} \frac{\partial \bar{c}(\tau)}{\partial \tau} c(\tau) \, d\tau = \bar{c}(\tau) c(\tau) |_{0}^{\beta} - \int_{0}^{\beta} \bar{c}(\tau) \frac{\partial c(\tau)}{\partial \tau} \, d\tau = -\int_{0}^{\beta} \bar{c}(\tau) \frac{\partial c(\tau)}{\partial \tau} \, d\tau$$
(1.53)

Переменные  $c(\tau), \bar{c}(\tau)$  можно разложить по фермионным мацубаровским частотам:

$$\bar{c}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_n \tau} \bar{c}(i\omega_n)$$

$$c(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} c(i\omega_n)$$

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$$
(1.54)

"Амплитуды" гармоник  $c(i\omega_n)$  и  $\bar{c}(i\omega_n)$  — тоже грассмановы переменные. В таком "частотном" представлении проясняется предельный переход к производной по  $\tau$  в выражении (1.53):

$$\sum_{i} \bar{c}_{i}(c_{i+1} - c_{i}) = \sum_{|n| \le N/2} \bar{c}(i\omega_{n}) \left[ \frac{e^{-i\omega_{n}\varepsilon} - 1}{\varepsilon} \right] c(i\omega_{n}) \rightarrow$$
$$\rightarrow \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{c}(i\omega_{n})(-i\omega_{n})c(i\omega_{n}), \qquad (N \to \infty) \quad (1.55)$$

Множитель  $-i\omega_n$  — это и есть фурье-образ производной  $\partial/\partial \tau$ .

Интеграл для Z принимает вид:

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{c}(i\omega_n)\mathcal{D}c(i\omega_n) \exp\left[\sum_n \bar{c}(i\omega_n)i\omega_n c(i\omega_n) - H'(\bar{c}(i\omega_n), c(i\omega_n))\right] \quad (1.56)$$

Не повторяя детальный вывод, можно доказать, что температурная функция Грина  $\mathcal{G}_{12} = \langle \mathbb{T}\hat{c}_1 \hat{c}_2^{\dagger} \rangle$  есть отношение двух фермионных интегралов:

$$\mathcal{G}(\zeta_n) = \frac{\int c(i\zeta_n)\bar{c}(i\zeta_n)\exp(-S)[\mathcal{D}\bar{c}(i\omega_n)\mathcal{D}c(i\omega_n)]}{\int \exp(-S)[\mathcal{D}\bar{c}(i\omega_n)\mathcal{D}c(i\omega_n)]}$$
(1.57)

$$S = \sum_{n} [\bar{c}(i\omega_{n})(-i\omega_{n})c(i\omega_{n}) + H'(\bar{c}(i\omega_{n}),c(i\omega_{n}))] =$$
$$= \int_{0}^{\beta} d\tau [\bar{c}(\tau)(\partial/\partial\tau)c(\tau) + H'(\bar{c}(\tau),c(\tau))] \quad (1.58)$$

В формуле (1.57) для функции Грина нет знака временного упорядочения  $\mathbb{T}$ . Это связано с тем, что при построении континуального интеграла временной интервал  $[0; \beta]$  разбивается на отрезки и упорядочение по времени когерентных параметров операторов  $c, c^{\dagger}$  происходит автоматически.

#### Пример интегрируемой системы

Приведенные формулы не зависят от конкретного вида гамильтониана H. В простом случае системы, состоящей из одного уровня  $H = \varepsilon \hat{c}^{\dagger} \hat{c}$  интегрирование можно произвести аналитически. Действие (1.58) в мацубаровском представлении принимает вид:

$$S = \sum_{n} \left[ \varepsilon - i\omega_n \right] \bar{c}(i\omega_n) c(i\omega_n)$$
(1.59)

Интеграл (1.56) становится гауссовым и можно применить формулу (1.38):

$$Z = \prod_{n} (\varepsilon - i\omega_n) \tag{1.60}$$

Воспользуемся равенством  $\int [d\bar{c}dc]c\bar{c}e^{-A\bar{c}c} = -1$ . Значение -1 получается изза однократной перестановки грассмановых переменных  $\bar{c}, c$ . Выражение для функции Грина примет вид:

$$\mathcal{G}(i\omega_j) = -\frac{\prod\limits_{n \neq j} (\varepsilon - i\omega_n)}{\prod\limits_n (\varepsilon - i\omega_n)} = \frac{1}{i\omega_j - \varepsilon}$$
(1.61)

#### Случай многочастичных систем

Для многомодового гамильтониана  $H[\bar{c}_{\alpha}, c_{\alpha}]$  континуальный интеграл строится абсолютно аналогично одночастичному случаю. При помощи пар-

ных перестановок дифференциалов грассмановых переменных различных мод можно определить новый дифференциал:

$$\mathcal{D}\bar{c}_{i\omega_n}\mathcal{D}c_{i\omega_n} \equiv \prod_{\lambda n} d\bar{c}_{\lambda\omega_n} dc_{\lambda\omega_n}$$
(1.62)

Действие принимает вид:

$$S = \sum_{n} \left( \sum_{\lambda} \bar{c}_{\lambda\omega_n} (-i\omega_n) c_{\lambda\omega_n} + H[\bar{c}_{\lambda\omega_n}, c_{\lambda\omega_n}] \right)$$
(1.63)

Если рассмотреть случай многочастичной системы, состоящей из одной заполненной энергетической зоны (модель сильной связи)  $\hat{H} = \sum_{k} \varepsilon_k \hat{c}_k^{\dagger} \hat{c}_k$ , то аналогично случаю одноуровневой системы получим для функции Грина:

$$G(i\omega_n, k) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k} \tag{1.64}$$

#### 1.1.7. Преобразование Хаббарда-Стратоновича

В данном разделе рассмотрим математическое преобразование когерентных параметров операторов рождения и уничтожения. Воспользуемся следующим гауссовым интегралом:

$$\sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{y^2}{2a} - ixy\right] dy = \exp\left\{-\frac{a}{2}x^2\right\},\tag{1.65}$$

где x, y являются комплексными переменными. В работах [25, 26] Стратонович и Хаббард показали, что этим равенством можно воспользоваться для когерентных параметров  $\bar{c}, c$  (вне зависимости от их статистики) для расчета статистических сумм нормально упорядоченных гамильтонианов вида:

$$\hat{H} = \sum_{k} A_k c_k^{\dagger} c_k + \sum_{ijkl} U_{ijkl} c_i^{\dagger} c_j c_k^{\dagger} c_l.$$
(1.66)

При условии  $U_{ijkl} = U_{klij}$  можно произвести линеаризацию квадратичной формы  $\hat{V} = \sum_{ijkl} U_{ijkl} c_i^{\dagger} c_j c_k^{\dagger} c_l = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \hat{n}_{\alpha}^2$  и привести гамильтониан к следующе-

му виду:

$$\hat{H} = \sum_{k} A_k \hat{n}_k + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \hat{n}_{\alpha}^2, \qquad (1.67)$$

где, по определению,  $\hat{n} = c^{\dagger}c$ . Действие (1.58) системы примет вид

$$S = \sum_{\omega k} B_{\omega k} n_{\omega k} + \sum_{\alpha \omega} \lambda_{\alpha} n_{\alpha \omega}^2, \qquad (1.68)$$

где для краткости обозначено  $B_{\omega k} = -i\omega + A_k$ . Применяя (1.65) к последнему члену в предыдущей формулы получим

$$\exp\{-\sum_{\alpha}\lambda_{\alpha}\hat{n}_{\alpha}^{2}\} = \int dx \exp\left\{-\sum_{\alpha\omega}(\pi x_{\alpha\omega}^{2} + 2\left(\frac{\pi}{\lambda_{\alpha}}\right)^{\frac{1}{2}}x_{\alpha\omega}n_{\alpha\omega})\right\}$$
(1.69)

Теперь действие системы не зависит от нелинейного члена  $n^2$ , и интегрирование по всем когерентным значениям  $c, \bar{c}$  может быть произведено аналитически. Для нахождения статсуммы требуется произвести дополнительное интегрирование по новой переменной x. За счет выбора параметров  $\lambda_{\alpha}$  интеграл по dx может быть взят приближенно при помощи, например, метода перевала. Таким образом преобразование Хаббарда-Стратоновича является по своей сути операцией замены переменных к более удобному базису.

# Преобразование Хаббарда-Стратоновича для грассмановых переменных

В дальнейшем изложении будет несколько раз использовано преобразование следующего вида:

$$\exp\{\bar{c}A^{2}c\} = B^{-2} \int d\bar{f}df \exp\{-\bar{c}ABf - \bar{f}ABc - \bar{f}B^{2}f\},\qquad(1.70)$$

где  $\bar{c}, c, \bar{f}, f$  являются грассмановыми переменными, а A, B - комплексными числами. Для того, чтобы его доказать, домножим обе части на  $\exp\{-\bar{c}A^2c\}$ 

и сделаем замену переменных

$$\bar{\nu} = \bar{c}A + \bar{f}B$$

$$\nu = Bf + Ac$$
(1.71)

Якобиан перехода равен  $J(\bar{\nu},\nu)=\frac{1}{B^2}$  Правая часть (1.70) примет вид

$$\int d\bar{\nu}d\nu \exp\left\{-\bar{\nu}\nu\right\} = 1 \tag{1.72}$$

в соответствии с формулой (1.38), что и доказыает исходное равенство.

Приведем несколько вариантов формулы (1.70). Если вместо (1.71) сделать замену вида  $\bar{\nu} = \bar{c}A + \bar{f}B^*$ ,  $\nu = Bf + Ac$ , то верным будет равенство:

$$\exp\{\bar{c}A^{2}c\} = |B|^{-2} \int d\bar{f}df \exp\{-\bar{c}ABf - \bar{f}AB^{*}c - \bar{f}|B|^{2}f\}$$
(1.73)

Если переобозначить  $B' = \sqrt{B}, A' = A\sqrt{B}$ , то (1.70) и (1.73) примут вид:

$$\exp\{\bar{c}AB^{-1}Ac\} = B^{-1}\int d\bar{f}df \exp\{-\bar{c}Af - \bar{f}Ac - \bar{f}Bf\}$$

$$\exp\{\bar{c}A^*B^{-1}Ac\} = B^{-1}\int d\bar{f}df \exp\{-\bar{c}A^*f - \bar{f}Ac - \bar{f}Bf\}$$
(1.74)

Последние равенства применимы для матриц комплексных чисел A, Bи векторов грассмановых переменных  $\mathbf{\bar{f}} = \{\bar{f}_1, \bar{f}_2 \cdots\}, \mathbf{f} = \{f_1, f_2 \cdots\}$ . В обобщенном виде формулы (1.74) записываются следующим образом:

$$\int \mathcal{D}[\bar{\mathbf{f}}, \mathbf{f}] \exp\left(-\bar{\mathbf{f}}B\mathbf{f} - \bar{\mathbf{f}}A\mathbf{c} - \bar{\mathbf{c}}A\mathbf{f}\right) = \det(B) \exp\left(\bar{\mathbf{c}}AB^{-1}A\mathbf{c}\right)$$
(1.75)

$$\int \mathcal{D}[\bar{\mathbf{f}},\mathbf{f}] \exp\left(-\bar{\mathbf{f}}B\mathbf{f} - \bar{\mathbf{f}}A^*\mathbf{c} - \bar{\mathbf{c}}A\mathbf{f}\right) = \det(B) \exp\left(\bar{\mathbf{c}}A^*B^{-1}A\mathbf{c}\right), \quad (1.76)$$

где символом  $\mathcal{D}[\bar{\mathbf{f}},\mathbf{f}]$  обозначено интегрирование по всем грассмановым переменным  $\prod_i d\bar{f}_i df_i$ .

## 1.2. Примесная модель Андерсона

В 1961 году П.В. Андерсон предложил одну из первых моделей для описания динамики электронов в металле, содержащем разреженные магнитные примеси [27]. Магнитные примеси — это атомы переходных металлов (Fe, Mn, Ni, Co, V и др.), имеющие незаполненные внешние электронные d-оболочки. Спины электронов на внешней оболочке не компенсируют друг друга при сложении, что приводит к появлению локализованного кинетического, а с ним и магнитного момента атома.

Приведем краткий вывод гамильтониана Андерсона. Состояния s-электронов проводимости в металле обычно представляются в виде плоских волн:

$$\varphi_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{r},\sigma) = \frac{u_{\alpha}(\sigma)}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$
(1.77)

Формула (1.77) имеет несколько иной смысл, чем для свободных электронов. Отличие состоит в том, что в периодическом потенциале одночастичные ВФ не имеют определенного импульса, а лишь квазиимпульс, задаваемый с точностью до вектора обратной решетки. Поэтому суммирование по **k** следует осуществлять в пределах первой зоны Бриллюэна.

Сопоставим s-состояниям операторы  $\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}$ . Кроме этого будем считать, что у атома примеси имеется одна локализованная s-орбиталь  $\Phi_d(\mathbf{r})$ , на которой может находиться не более двух электронов с противоположными направлениями спинов. Физически этот случай не реализуется, однако он является наиболее простым для рассмотрения, а истинные d- и f- оболочки во многом близки к рассматриваемой модели <sup>3</sup>. Такому локализованному состоянию сопоставляются операторы  $\hat{d}_{\alpha}$ . Полевые  $\psi$ -операторы в гейзенберговском представлении имеют вид:

$$\hat{\Psi}_{\alpha}(t,\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varphi_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{r},\sigma) \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}(t) + \Phi_d(\mathbf{r}) \hat{d}_{\alpha}(t)$$
(1.78)

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Случай многоэлектронных орбиталей рассмотрен в приложении А

Воспользуемся определением оператора энергии системы свободных частиц через полевые  $\psi$ -операторы:

$$\hat{H}^{\prime(0)} = -\frac{1}{2m} \int \hat{\Psi}^{\dagger}_{\alpha}(t, \mathbf{r}) \Delta \hat{\Psi}_{\alpha}(t, \mathbf{r}) d\mathbf{r} - \mu \hat{N}$$
(1.79)

Для нахождения квадратичной по операторам  $\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}$  и  $\hat{d}_{\alpha}$  части гамильтониана Андерсона подставим операторы (1.78) в (1.79). Получим:

$$\hat{H}_{A0}' = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha} + \varepsilon_d (\hat{n}_{d\uparrow} + \hat{n}_{d\downarrow}) - \mu \sum_{\mathbf{k}\alpha} (\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha} + \hat{d}_{\alpha}^{\dagger} \hat{d}_{\alpha}) + \sum_{\mathbf{k}\alpha} (V(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger} \hat{d}_{\alpha} + V^*(\mathbf{k}) \hat{d}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}) \quad (1.80)$$

Обычно полагают  $\mu = 0$ , не забывая при этом, что все энергии должны отсчитываться от уровня Ферми. Закон дисперсии  $\varepsilon(\mathbf{k})$  был бы квадратичным  $(\mathbf{k}^2/2m)$  для свободных электронов. Для электронов проводимости в металле его можно считать приближенно квадратичным с некоторой эффективной массой  $m^*$ , определяемой видом решеточного потенциала. Последний член в  $\hat{H}'_{A0}$  имеет смысл обмена электронами между зоной проводимости и локализованной орбиталью. Функцию  $V(\mathbf{k})$  для простоты полагают константой (так называемая константа гибридизации).

Для нахождения членов более высокого порядка воспользуемся определением оператора парного взаимодействия:

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2} \iint \hat{\Psi}^{\dagger}_{\beta}(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}^{\dagger}_{\alpha}(t, \mathbf{r}') U^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\alpha}(t, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\beta}(t, \mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$$
(1.81)

После подстановки (1.78) в (1.81) с кулоновским потенциалом взаимодействия  $U^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = e^2/(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  получается большое число слагаемых, из которых удерживается только одно:

$$\hat{H}_{imp} = U\hat{n}_{d\uparrow}\hat{n}_{d\downarrow} = Ud^{\dagger}_{\uparrow}d_{\uparrow}d^{\dagger}_{\downarrow}d_{\downarrow}, \qquad U \equiv \int |\Phi_d(\mathbf{r})|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\Phi_d(\mathbf{r}')|^2 d\mathbf{r} \ d\mathbf{r}' \quad (1.82)$$

Только это слагаемое не содержит операторов зоны проводимости, что соответствует полному пренебрежению кулоновским взаимодействием валентных электронов металла друг с другом и с локализованными электронами примеси. Следует оговориться, что есть ещё слагаемое вида  $\frac{U}{2}(\hat{n}_{\downarrow}\hat{n}_{\downarrow}+\hat{n}_{\uparrow}\hat{n}_{\uparrow}) = \frac{u}{2}(\hat{n}_{\downarrow}+\hat{n}_{\uparrow})$ , которое дает вклад в  $\varepsilon_d$ , но не в квартичную часть гамильтониана. Обычно этим слагаемым пренебрегают.

Окончательный вид гамильтониана Андерсона:

$$\hat{H}'_{A} = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha} + \varepsilon_{d} (\hat{n}_{d\uparrow} + \hat{n}_{d\downarrow}) + \sum_{\mathbf{k}\alpha} (V \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha} \hat{d}_{\alpha} + V^{*} \hat{d}^{\dagger}_{\alpha} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}) + U \hat{n}_{d\downarrow} \hat{n}_{d\uparrow} \quad (1.83)$$

Согласно оценкам самого Андерсона, V имеет порядок 2-3 эВ, а кулоновское отталкивание U - 10 эВ. В реальных металлах последнее значение обычно меньше (около 5 эВ), т.к. существенна экранировка зарядов другими электронами атомной оболочки.  $\varepsilon(\mathbf{k})$  и  $\varepsilon_d < 0$  имеют порядок нескольких электрон-вольт. Из этих оценок видно, что достаточно малого параметра в задаче нет и ожидать хороших результатов от теории возмущений не приходится. Это ведет к необходимости использовать численные методы.

## 1.2.1. Примесная модель Андерсона в виде континуального интеграла

Найдем действие для модели Андерсона. Запишем гамильтониан (1.83) в следующем виде:

$$\hat{H}'_{A} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} (V \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{d}_{\sigma} + V^* \hat{d}^{\dagger}_{\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}) + H_{loc}[\hat{d}^{\dagger}, \hat{d}], \qquad (1.84)$$

где в  $H_{loc}[\hat{d}^{\dagger},\hat{d}]$  содержатся все члены, относящиеся только к коррелированной примесной орбитали. Тогда статистическая сумма и действие системы в соответствии с формулой (1.58) имеет вид:

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{c}, c] \mathcal{D}[\bar{d}, d] e^{-S[\bar{c}, c, \bar{d}, d]}$$
$$S[\bar{c}, c, \bar{d}, d] = \sum_{\omega \mathbf{k}\sigma} \left( \bar{c}_{\omega \mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - i\omega) c_{\omega \mathbf{k}\sigma} + \bar{c}_{\omega \mathbf{k}\sigma} V d_{\omega\sigma} + \bar{d}_{\omega\sigma} V^* c_{\omega \mathbf{k}\sigma} \right) + S_{loc}[\bar{d}, d],$$
(1.85)

где  $S_{loc}[\bar{d},d] = \int_{0}^{\beta} H_{loc}[\bar{d},d]d\tau$ . Воспользуемся преобразованием Хаббарда-Стратоновича (1.70):

$$\int \mathcal{D}[\bar{c},c] \exp\left\{-\bar{d}A^*c - \bar{c}Ad - \bar{c}Bc\right\} = B \exp\{\bar{d}A^*B^{-1}Ad\}$$

Примем  $B = \varepsilon_{\mathbf{k}} - i\omega, A = V$  и получим (множитель  $\prod_{\omega} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - i\omega)$ , который можно вынести из континуального интеграла, сокращается при взятии любого среднего и потому опущен)

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{d}, d] e^{-S_{imp}[d, d]}$$
  
$$S_{imp} = \sum_{\omega\sigma} \bar{d}_{\omega\sigma} \left( \Delta_{\omega\sigma} - i\omega \right) d_{\omega\sigma} + S_{loc}[\bar{d}, d],$$
  
(1.86)

где введена функция гибридизация примеси с окружающими *s*-электронами:

$$\Delta_{\omega\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V|^2}{i\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \tag{1.87}$$

Таким образом задача нахождения статистической суммы исходной многочастичной системы сводится к взятию континуального интеграла по одной паре грассмановых переменных, отвечающих за нелинейность в исходном гамильтониане. В этом состоит важное свойство лагранжевой механики - возможность получения замкнутой системы уравнений для подсистемы исходной задачи  $\hat{H}'$ , не включающие в себя остальных степеней свободы.

#### 1.2.2. Методы решения примесной модели Андерсона

Задача о нахождении функции Грина (1.57) для действия (1.86) в интересующей области параметров  $U \approx V$  не имеет точного аналитического решения, поэтому необходимо воспользоваться численными методами. Гамильтониан (1.83) обладает большим числом независимых переменных<sup>4</sup>, что делает его прямую диагонализацию невозможной. Возможное приближенное

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Например, даже если каждый электрон может находится всего в 2 различных состояниях, суммарная размерность фоковского пространства составит  $2^N$ , где  $N \approx 10^{23}$  - макроскопическое число частиц. Для системы - модели Изинга из  $10 \times 10$  спинов размер конфигурационного пространства равен  $2^{100} \approx 10^{30}$ .

решение есть ограничение числа электронов зоны проводимости достаточно небольшим числом (современным численным методам доступно рассмотрение около ≈ 15 электронов зоны проводимости [28]). Недостатком этого метода является экспоненциальное увеличение времени расчета при рассмотрении дополнительных степеней свободы, что затрудняет, например, получение термодинамических характеристик системы.

Другим возможным способом решения может быть использование скейлинговых теорий. Примесная модель Андерсона обладает квантовым фазовым переходом II рода из синглетного режима экранировки магнитного момента примеси (Кондо-режим) в режим локального момента при изменении значения U. Критическое поведение системы хорошо описывается методами ренормализационной группы, применительно к задаче (1.86) используют численную ренормгруппу (NRG) [29, 30]. В основе ренормгруппового анализа положена гипотеза самоподобия системы при изменении энергетического масштаба. На каждом шаге ренормгруппы при уменьшении масштаба энергии гамильтониан системы остается неизменным, а его параметры меняются (перенормируются) известным образом:

$$J_{n+1} = \beta(J_n). \tag{1.88}$$

Устойчивые точки уравнения (1.88) определяют значения параметров системы в критической точке, они соответствуют реализуемым макроскопическим конфигурациям системы. Исследуемые величины определяются взятием среднего именно при таких конфигурациях системы.

В методе численной ренормгруппы исследуется изменение функции Грина системы (1.84) при масштабном преобразовании энергии зоны проводимости *s*-электронов. Энергетическая зона логарифимически дискретизуется  $(E_n = E_0 \lambda^n \ (0 < \lambda < 1))$  и отображается на одномерную полубесконечную цепь:

$$H^{\text{NRG}} = H_{\text{int}}[c_0^{\dagger}, c_0] + \sum_{i>0} t_{i,i-1}(c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i-1\sigma} + h.c)$$
(1.89)

Логарифмическая дискретизация приводит к экспоненциальному уменьшению матричных элементов перескоков между дальними узлами цепи. Аналогично (1.88) это приводит к сходимости функции Грина при увеличении длины цепи. Сама функция Грина для каждой величины длины цепи N определяется при помощи точной диагонализации гамильтониана (1.89).

Достоинством обоих приведенных численных методов является возможность получения напрямую запаздывающей функции Грина. При диагонализации гамильтониана можно получить значение функции Грина как на мнимой, так и на действительной оси частот при помощи формулы вида:

$$G(\xi) = \sum_{i,j} \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}}{\xi + E_i - E_j + i0^+} \langle i | c | j \rangle \langle j | c^{\dagger} | i \rangle$$
(1.90)

Метод NRG позволяет получать значения средних величин при произвольно низких значениях температур. Однако сложность такого алгоритма экспоненциально нарастает при увеличении длины цепи (1.89). Это делает крайне труднодоступным изучение фазовой диаграммы системы при достаточно высоких температурах или при наличии многоорбитального характера взаимодействия.

#### 1.2.3. Стохастический подход к решению примесной задачи

Еще один возможный класс методов приближенного решения - это стохастические алгоритмы. Они основаны на том, что среднее значение величины f(X) в системе с вероятностью каждой конфигурации p(X) можно получить при помощи усреднения по конечному числу конфигураций системы, которые обладают наибольшей вероятностью реализации:

$$\int f(X)p(X)dX = \sum_{i=1\cdots N} f(X_i)p(X_i)$$
(1.91)

Полиномиальная сходимость такого интеграла при достаточно большом количестве таких конфигураций  $X_i$  гарантируется центральной предельной теоремой. Для лагранжевых задач типа (1.58) возможным выбором конфигурационного пространства X представляется множество всех траекторий параметров когерентных состояний, а вероятности p(X) - вес  $\exp(-S)$ . Это, однако, неверно для фермионных задач и связано с проблемой знака.

Особенность систем тождественных фермионов состоит в том, что перестановка любой пары частиц приводит к изменению знака многочастичной волновой функции. Множество траекторий в конфигурационном пространстве включает в себя как траектории с четным, так и нечетным числом перестановкой, которые имеют множитель  $\pm 1$  перед действием. Получение статистической суммы в таком случае есть суммирование знакопеременного ряда больших и медленно убывающих членов, что практически делает подобное суммирование нереализуемым [20].

Возможным решением проблемы могло бы быть взятие модуля статистического веса  $Z_i = |e^{-S_i}|$  в качестве плотности вероятности p(X). Это в свою очередь приводит к возрастанию дисперсии результата, которая обратно пропорциональна среднему значению знака  $\bar{s}_j = \frac{Z_j}{|Z_j|}$ . Величина  $\hat{s}$  уменьшается экспоненциально с размером системы или уменьшением температуры<sup>5</sup>. Экспоненциальное увеличение дисперсии при стохастическом моделировании квантовых систем и принято называть проблемой знака [31].

Таким образом, применение идей метода Монте-Карло для решения примесной задачи (1.86) требует выбора иного конфигурационного пространства, чем набор траекторий по грассмановым переменным. В настоящее время широко распространены два основных класса квантовых методов Монте-Карло: работающие в дискретном [32] и непрерывном времени [11, 33]. Первый из них

 $<sup>^5</sup>$ Например, средний знак независимых подсистем является мультипликативной величиной :  $\bar{s}=\overline{s_1s_2\cdots}$ 

при помощи дискретного преобразования Хаббарда-Стратоновича [34] вводит дополнительный континуум спиновых переменных, по конфигурациям которых и производится суммирование (1.91). Второй класс методов использует представление взаимодействия для того, чтобы разложить выражение (1.86) в ряд по величине взаимодействия или гибридизации. Конфигурационным пространством является набор членов полученного ряда теории возмущений.

Прежде чем переходить непосредственно к описанию этих алгоритмов, отметим следующий факт. Технически суммирование ряда комплексных переменных  $\pm \exp(-iS)$  существенно тяжелее, чем действительных  $\pm \exp(-S)$ . Поэтому расчеты квантовым методом Монте-Карло проводятся во мнимом времени. Полученная на мацубаровских частотах функция Грина обладает шумом, ее аналитическое продолжение на действительную ось является математически некорректной задачей. Такая операция, однако, является технически выполнимой. Наиболее употребительным в настоящее время является метод максимальной энтропии [35–37]. Отметим также метод, основанный на стохастической регуляризации [38].

#### 1.2.4. Алгоритм QMC с дискретным разбиением времени

В 1986 году Дж. Хирш и Р. Фай адаптировали алгоритм QMC [39] для вычисления функций Грина в системах с нелинейностью [32]. Им удалось вычислить функцию Грина локализованного электрона в модели Андерсона. Этот алгоритм по сей день является одним из наиболее распространенных QMC-алгоритмов для фермионов. Дадим его краткое описание.

Действие для модели Андерсона разделяется на две части:

$$S_A = S_A^{(0)} + S_A^{(1)} (1.92)$$

$$S_{A}^{(0)} = \int_{0}^{\beta} d\tau H^{(0)}[\bar{c}, c] d\tau = \sum_{\sigma} \int_{0}^{\beta} d\tau \ \bar{d}_{\sigma} (\Delta_{\tau\sigma} + \partial_{\tau} - \mu + U/2) d_{\sigma}$$
(1.93)
$$S_A^{(1)} = U \int_0^\beta d\tau \left[ \bar{d}_{\uparrow} d_{\uparrow} \bar{d}_{\downarrow} d_{\downarrow} - \frac{1}{2} (\bar{d}_{\uparrow} d_{\uparrow} + \bar{d}_{\downarrow} d_{\downarrow}) \right]$$
(1.94)

Мнимое время  $\tau$  дискретизуется на L-1 интервалов, каждый длиной  $\varepsilon = \beta/L$ . В результате этого интегралы по  $\tau$  переходят в суммы, а континуальные интегралы для Z и  $\mathcal{G}$  — в (L-1)-кратные интегралы.

На каждом временном слое  $\tau_i$  к части  $S_A^{(1)}$  применяется дискретное преобразование Хаббарда-Стратоновича [34]:

$$\exp\left(-\varepsilon U(\bar{d}_{\uparrow}d_{\uparrow}\bar{d}_{\downarrow}d_{\downarrow} - \frac{1}{2}(\bar{d}_{\uparrow}d_{\uparrow} + \bar{d}_{\downarrow}d_{\downarrow}))\right)\Big|_{\tau_{i}} = \frac{1}{2}\sum_{s(\tau_{i})=\pm 1}\exp\left(f(\varepsilon, U)s(\tau_{i})(\bar{d}_{\uparrow}d_{\uparrow} - \bar{d}_{\downarrow}d_{\downarrow})\right) \quad (1.95)$$

Идея преобразования состоит в том, что вместо квартичной по  $\bar{d}, d$  части действия получается квадратичная часть, связанная, однако, с внешней переменной  $s(\tau_i)$ . Авторам удалось строго доказать, что *s* является дискретной величиной, принимающей всего два значения — ±1. Сумма в правой части (1.95) означает усреденение по этой переменной. Функция  $f(\varepsilon, U)$  — некоторая известная функция, конкретный вид которой сейчас неважен.

Теперь полное действие S<sub>A</sub> представляет собой квадратичную форму грассмановых переменных.

$$S_A = \sum_{\lambda',\lambda'} \bar{c}_{\lambda} \hat{O}_{\lambda,\lambda'}(\varepsilon, U, s(\tau)) c_{\lambda'}$$
(1.96)

Через  $\lambda$  обозначена совокупность спинового индекса  $\sigma$  и момента времени  $\tau_i$ . После преобразования Хаббарда-Стратоновича нужно не только брать интеграл по фермионным переменным, но и вычислять (L-1)-мерную сумму по всем  $s(\tau_i)$ .

Любую температурную функцию Грина от временных аргументов можно

записать в виде:

$$\mathcal{G}_{\lambda,\lambda'} = \frac{\sum_{\{s(\tau_i)\}} \int \bar{c}_{\lambda} c_{\lambda'} \exp(-\sum_{\lambda',\lambda'} \bar{c}_{\lambda} \hat{O}_{\lambda,\lambda'}(s(\tau_i)) c_{\lambda'}) \prod[\bar{c}_{\lambda} c_{\lambda'}]}{\sum_{\{s(\tau_i)\}} \int \exp(-\sum_{\lambda',\lambda'} \bar{c}_{\lambda} \hat{O}_{\lambda,\lambda'}(s(\tau)) c_{\lambda'}) \prod[\bar{c}_{\lambda} c_{\lambda'}]}$$
(1.97)

Интегрирование по грассмановым переменным можно выполнить точно с помощью формул (1.38) и (1.39):

$$\mathcal{G}_{\lambda,\lambda'} = \frac{\sum_{\{s(\tau_i)\}} (\hat{O}^{-1})_{\lambda',\lambda}(\{s\}) \det \hat{O}(\{s\})}{\sum_{\{s(\tau_i)\}} \det \hat{O}(\{s\})} \equiv \sum_{\{s(\tau_i)\}} (\hat{O}^{-1})_{\lambda',\lambda} P(\{s\})$$
(1.98)

Эту формулу можно понимать, как усредение величины  $(\hat{O}^{-1})_{\lambda',\lambda}$  по распределению вероятности  $P(\{s\})$ , зависящему от L параметров  $s(\tau_i)$ . Прямое вычисление такой суммы оказывается весьма ресурсоемким, т.к. неоходимо просуммировать  $2^L$  слагаемых, что уже при L порядка сотни требует немалых машинных ресурсов. Поэтому вместо прямого суммирования применяют алгоритм случайных блужданий (Монте-Карло).

Перед началом работы всем переменным  $s(\tau_i)$  случайным образом присваиваются значения  $\pm 1$ . На каждом шаге алгоритма одна из переменных (случайно выбранная) "переворачивается" — происходит переход от старой конфигурации  $\{s\}$  к новой  $\{s'\}$ . Относительное изменение веса P при этом равно

$$R = \frac{P(\{s'\})}{P(\{s\})} = \frac{\det \hat{O}(\{s'\})}{\det \hat{O}(\{s\})}$$
(1.99)

Если R > 1, то новая конфигурация принимается, если R < 1, то конфигурация принимается в случае, если R больше случайно сгенерированного числа от 0 до 1. Такой критерий называется *критерием Mempononuca* [40] и позволяет организовать марковские случайные блуждания по  $\{s\}$ -пространству. Критерий Метрополиса обеспечивает перебор алгоритмом конфигураций, которые дают существенный вклад в сумму, при этом оставаясь в той области, где P заметно отличается от нуля. Кроме этого, критерий Метрополиса удовлетованиям:

- Условие эргодичности. Необходимо, чтобы из любой точки фазового пространства {s} можно было попасть в любую другую точку с ненулевой вероятностью.
- 2. Принцип детального равновесия. Если возможен переход из  $\{s\}$  в  $\{s'\}$ , то возможен и обратный переход, причем их вероятности связаны соотношением:

$$\frac{W(\{s\} \to \{s'\})}{W(\{s'\} \to \{s\})} = \frac{P(\{s'\})}{P(\{s\})}$$
(1.100)

Первое из этих условий гарантирует наличие равновесной функции распределения, которой соответствуют все выбранные конфигурации марковской цепи  $\{s\}$ . Второе условие гарантирует, что это распределение есть заданная функция  $P(\{s\})$ .

В работе [41] авторам алгоритма удалось доказать, что вероятность *Р* является неотрицательной для модели Андерсона в случае *полузаполнения* — одинакового заполнения системы электронами и дырками. Обратимся еще раз к дискретному преобразованию Хаббарда-Стратоновича (1.95). Представим его в следующем виде:

$$\sum_{s(\tau_i)=\pm 1} \exp\left(f(\varepsilon, U)s(\tau_i)(\bar{d}_{\uparrow}d_{\uparrow} - \bar{d}_{\downarrow}d_{\downarrow})\right) = \prod_{\sigma} \sum_{s(\tau_i)=\pm 1} \exp\left(f(\varepsilon, U)\sigma s(\tau_i)\bar{d}_{\sigma}d_{\sigma}\right)$$
(1.101)

Модель Андерсона является симметричной по перевороту спина, при полузаполнении гауссова часть действия принимает вид:  $S_A^{(0)} = \sum_{\sigma} \int_0^\beta d\tau \ \bar{d}_{\sigma} (\Delta_{\tau\sigma} + \partial_{\tau}) d_{\sigma}$ . Тогда

$$\hat{O}\{(s)\} = \prod_{\sigma} \sum_{s(\tau_i)=\pm 1} \frac{1}{2} \exp\left(-d\tau (\Delta_{\tau\sigma} + \partial_{\tau})\right) \exp\left(f(\varepsilon, U)\sigma s(\tau_i)\bar{d}_{\sigma}d_{\sigma}\right) = \hat{O}_{\uparrow}\hat{O}_{\downarrow}$$
(1.102)

Сделаем следующую замену :  $\bar{d}_{\sigma}d_{\sigma} = 1 - D_{\sigma}D_{\sigma}$ . Она соответствует одновременному замещению всех электронов дырками и наоборот. Тогда выполнено:

$$\exp\left(f(\varepsilon, U)\sigma s(\tau_i)\bar{d}_{\sigma}d_{\sigma}\right) = \exp\left(-f(\varepsilon, U)\sigma s(\tau_i)\bar{D}_{\sigma}D_{\sigma}\right)\exp\left(f(\varepsilon, U)s(\tau_i)\right)$$
(1.103)

Следовательно

$$\det \hat{O}_{\uparrow} = \det \hat{O}_{\downarrow} \exp\left(f(\varepsilon, U)s(\tau_i)\right) \tag{1.104}$$

Вероятность  $P(\{s\}) = \det O_{\uparrow}O_{\downarrow}$  является положительно определенной. Таким образом при наличии полузаполнения проблемы знака в указанном методе удается избежать. Авторам статьи [42] удалось доказать, что если действие примесной задачи является локальным, то для произвольного заполнения каждый из множителей det  $O_{\uparrow}$  и det  $O_{\downarrow}$  является положительным и проблема знака не возникает. Это подтвердило существовавшие эмпирические выводы [2].

## 1.2.5. Алгоритм QMC с непрерывным разбиением времени с разложением по величине взаимодействия (CT-INT)<sup>6</sup>

Алгоритм Хирша-Фая, рассмотренный в предыдущем параграфе, не лишен существенных недостатков. Основная трудность заключается в наличии ошибок дискретизации при выборе конечного числа временных отрезков. Для улучшения результатов необходимо значительно увеличить время счета. К тому же, алгоритм, использующий метод Монте-Карло в поле конфигураций дискретного преобразования Хаббарда-Стратоновича, работает значительно медленнее при расчете нелокальных характеристик примеси. Фактически, данный метод придуман только для расчета локальных корреляций. В 2005г. А. Рубцовым, В. Савкиным и А. Лихтеншейном в работе [11] был предложен

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Подрбная классификация алгоритмов квантового метода Монте-Карло дана в обзоре [43]. Она же будет использована и в этом тексте.

альтернативный подход расчета фермионных функций Грина, не использующий преобразование Хаббарда-Стратоновича, как следствие, не обладающий указанными для предыдущего метода недостатками. Расчет ведется в частотном домене, алгоритм не требует дополнительных Фурье-преобразований. Дадим его краткое описание.

Начнем с наиболее общего вида системы фермионов с парным взаимодействием. Запишем статистическую сумму:

$$Z = Sp[\mathbb{T}e^{-S}]$$

$$S = \int \int t_r^{r'} \bar{c}_{r'} c^r dr dr' + \int \int \int \int w_{r_1 r_2}^{r'_1 r'_2} \bar{c}_{r'_1} c^{r_1} \bar{c}_{r'_2} c^{r_2} dr_1 dr'_1 dr_2 dr'_2$$
(1.105)

В данном обозначении  $\mathbb{T}$  является супероператором хронологического произведения. Под индексом  $r = \{\tau, \sigma, i\}$  будем понимать совокупность трех величин: мнимого времени  $\tau$ , спинового индекса  $\sigma$  и номера узла i. Процедура интегрирования с дифференциалом dr подразумевает интегрирование по  $d\tau$  и суммированию по всем спиновым индексам и номерам узлов:  $\int dr \equiv \sum_i \sum_s \int_0^\beta d\tau$ .

Перейдем в представление взаимодействия. Разделим действие S на действие гауссовой (содержащей по одной паре операторов рождения и уничтожения) системы  $S_0$  и взаимодействие W. В методе технически также вводится набор произвольных функций  $\alpha_{r'}^r$ , помогающих в решении проблемы знака впоследствии. В выводе основных уравнений СТ-INT они не играют существенной роли. Выражение для действия исходной системы примут вид:

$$S = S_0 + W$$

$$S_0 = \int \int \left( t_r^{r'} + \int \int \alpha_{r'_2}^{r_2} (w_{rr_2}^{r'r'_2} + w_{r_2r'}^{r'_2r'}) dr_2 dr'_2 \right) \bar{c}_{r'} c^r dr dr'$$

$$W = \int \int \int \int w_{r_1r_2}^{r'_1r'_2} (\bar{c}_{r'_1} c^{r_1} - \alpha_{r'_1}^{r_1}) (\bar{c}_{r'_2} c^{r_2} - \alpha_{r'_2}^{r_2}) dr_1 dr'_1 dr_2 dr'_2$$
(1.106)

Разложим статистическую сумму системы в ряд по возмущению:

$$Z = \sum_{k=0}^{\infty} Z_k = \sum_{k=0}^{\infty} \int dr_1 \int dr'_1 \dots \int dr_{2k} \int dr'_{2k} \Omega_k(r_1, r'_1, \dots, r_{2k}, r'_{2k}), \quad (1.107)$$
$$\Omega_k = Z_0 \frac{(-1)^k}{k!} w_{r_1 r_2}^{r'_1 r'_2} \cdot \dots \cdot w_{r_{2k-1} r'_{2k}}^{r'_{2k-1} r'_{2k}} D_{r'_1 r'_2 \dots r'_{2k}}^{r_1 r_2 \dots r_{2k}},$$

где

$$D_{r'_1\dots r'_{2k}}^{r_1\dots r_{2k}} = < T(\bar{c}_{r'_1}c^{r_1} - \alpha_{r'_1}^{r_1}) \cdot \dots \cdot (\bar{c}_{r'_{2k}}c^{r_{2k}} - \alpha_{r'_{2k}}^{r_{2k}}) > .$$
(1.108)

 $Z_0 = \text{Tr}Te^{-S_0}$  является статистической суммой для действия невозмущенной системы  $S_0$ . Будем понимать обозначение <> как операцию усреднения с действием невозмущенной системы, т.е.  $A: < A >= Z_0^{-1} \text{Tr}TAe^{-S_0}$ .

Заметим, что в (1.108) можно воспользоваться теоремой Вика и сопоставить ряд диаграмм порядка k.  $D_{r'_1...r'_{2k}}^{r_1...r_{2k}}$ , таким образом, по формуле (1.39) является определителем матрицы размером  $2k \times 2k$ :

$$D_{r'_1r'_2...r'_{2k}}^{r_1r_2...r_{2k}} = \det ||g_{0r'_j}^{r_i} - \alpha_{r'_j}^{r_i}\delta_{ij}||; i, j = 1, ..., 2k,$$
(1.109)

Сделаем разложение функции Грина системы (1.105), используя аналогичное разложение как в (1.107).

$$.G_{r'}^r \equiv Z^{-1} < T\bar{c}_{r'}c^r e^{-W} > = \sum_k \int dr_1 \int dr'_1 \dots \int dr_{2k}g_{r'}^r(r_1, r'_1, \dots, r'_{2k})\Omega_k(r_1, r'_1, \dots, r'_{2k})$$
(1.110)

где

$$g_{r'}^{r}(r_{1}, r_{1}', ..., r_{2k}') = (D_{r_{1}'...r_{2k}}^{r_{1}...r_{2k}})^{-1} \times$$

$$\times < T\bar{c}_{r'}c^{r}(\bar{c}_{r_{1}'}c^{r_{1}} - \alpha_{r_{1}'}^{r_{1}}) \cdot ... \cdot (\bar{c}_{r_{2k}'}c^{r_{2k}} - \alpha_{r_{2k}'}^{r_{2k}}) > .$$

$$(1.111)$$

Основное свойство полученных преобразований — инвариантность относительно всех перестановок  $r_i, r_{i'}, r_{i+1}, r_{i'+1} \leftrightarrow r_j, r_{j'}, r_{j+1}, r_{j'+1}$  для любых i, j. В таком случае, возможно ввести переменную K, которая описывает состояние системы и является комбинацией порядка разложения k и неупорядоченного набора k четверок координат. Обозначим  $\Omega_K = k! \Omega_k$ , где множитель k! отражает инвариантность относительно перестановок. В выражении для функции Грина, вместе с тем  $g_K = g_k$ , поскольку k! входит как в числитель, так и в знаменатель.

В новых обозначениях получим

$$Z = \int \Omega_K D[K], \qquad (1.112)$$
$$G_{r'}^r = Z^{-1} \int g_K \Omega_K D[K],$$

где  $\int D[K]$  обозначает суммирование по всем k и интегрирование по каждому набору четверок коодинат, соответствующих k. Таким образом, в формализме CT-INT от интегрирования по бесконечному набору грассмановых переменных мы перешли к интегрированию по диаграммному рядам  $\Omega_K$ , они будут являться конфигурационным пространством для получения средних вида (1.91). Решение (1.112) проводится методом Монте-Карло с блужданием по индексу K и применением критерия Метрополиса. Поскольку операция усреднения производится в гауссовой системе, то для получения любого члена ряда (1.112) можно воспользоваться теоремой Вика. Принципиальная сходимость такого интеграла для систем с конечной размерностью гильбертова пространства доказана в работе [11].

В отличие от алгоритма Хирша-Фая, где каждый шаг Монте-Карло состоит в изменении конфигурации дискретного поля  $\{s\}$ , в указанном методе возможно несколько типов шагов. Наиболее очевидные из них соответствуют увеличению и уменьшению порядка разложения K на единицу. При этом в действие добавляются или убираются четыре оператора в четырех разных точках r. Напрямую выражением вида  $\frac{P(K+1)}{P(K)}$  для критерия Метрополиса воспользоваться нельзя, так как P(K) и P(K + 1) обладают разными размерностями. Обойти эту трудность можно, если модифицировать принцип детального равновесия (1.100). Пусть конфигурация K' = K + 1 получается из конфигурации K путем добавления четырех точек  $r_{2k+1}, r'_{2k+1}, r_{2k+2}, r'_{2k+2}$ , относящихся к малой области фазового пространства  $d^4r$ . Детальное равновесие будет соблюдаться, если при добавлении или уменьшении порядка разложения будут появляться именно эти 4 точки:

$$\frac{W(K \to K')}{W(K' \to K)} = d^4 r \frac{P(K')}{P(K)}$$
(1.113)

При шаге - увеличении порядка разложения K на единицу <u>условная</u> вероятность принять новую конфигурацию с 4 заданными новыми точками при абсолютной вероятности такого шага  $p(K \to K')$  есть

$$W(K \to K') = p(K \to K')p(r_{2k+1}, r'_{2k+1}, r_{2k+2}, r'_{2k+2})d^4r, \qquad (1.114)$$

где  $p(r_{2k+1}, r'_{2k+1}, r_{2k+2}, r'_{2k+2})$  есть плотность вероятности выбора четырех заданных точек. При обратном шаге - уменьшении порядка разложения K на единицу <u>условная</u> вероятность принять новую конфигурацию без 4 заданных точек есть

$$W(K' \to K) = p(K' \to K)/(k+1)$$
 (1.115)

 $p(K \to K')$ есть абсолютная вероятность сделать шаг с уменьшением K на 1. Плотность вероятности выбора 4 точек может быть выбрана произвольным образом, примем

$$p(r_{2k+1}, r'_{2k+1}, r_{2k+2}, r'_{2k+2}) = \frac{1}{||w||} w_{r_{2k+1}r_{2k+2}}^{r'_{2k+1}r'_{2k+2}}$$

$$||w|| = \int dr dr' dR dR'' w_{rR'}^{r'R'} \approx \beta U$$
(1.116)

В итоге критерий Метрополиса принимает следующий вид:

1. Для шагов  $K \to K+1$ 

$$R_{K \to K+1} = \frac{||w||}{k+1} \cdot \left| \frac{D_{r_1 \dots r_{2k+2}}^{r_1 \dots r_{2k+2}}}{D_{r_1' \dots r_{2k}}^{r_1 \dots r_{2k}}} \right|$$
(1.117)

2. Для шагов  $K + 1 \rightarrow K$ 

$$R_{K+1\to K} = \frac{1}{R_{K\to K+1}} = \frac{k+1}{||w||} \left| \frac{D_{r_1\dots r_{2k}}^{r_1\dots r_{2k}}}{D_{r_1'\dots r_{2k+2}}^{r_1\dots r_{2k+2}}} \right|$$
(1.118)

Для задачи - примесной модели Андерсона выполнено

$$w_{rR}^{r'R'} = U\delta_{\sigma_r, 1-\sigma_{r'}}\delta_{\sigma_R, 1-\sigma_R'}\delta_{\sigma_r, \sigma_R}\delta_{\tau_r, \tau_r', \tau_R, \tau_R'}$$
(1.119)

$$||w|| = \int_{0}^{\beta} d\tau_r d\tau_{r'} d\tau_R d\tau_{R'} U \delta_{\sigma_r, 1 - \sigma_{r'}} \delta_{\sigma_R, 1 - \sigma_R'} \delta_{\sigma_r, \sigma_R} \delta_{\tau_r, \tau_r', \tau_R, \tau_R'} = \beta U \qquad (1.120)$$

Наибольшие усилия компьютера в излагаемом методе происходят при расчете определителей  $D_{r'_1...r'_{2k}}^{r_1...r_{2k}}$ . Авторы метода используют специальные формулы для их быстрого обновления после каждого шага Монте-Карло. Им удается достичь сложности выполнения этой задачи как  $N^2$  по размерности матриц в отличии от обычных в таких случаях  $N^3$  [11]. Отметим, что технически в памяти оперативного компьютера хранятся не сами матрицы  $(\hat{g} - \alpha \hat{I})$ , а их обратные величины. Полученный выигрыш в скорости расчета определителей D позволяет проводить хождение по K намного быстрее, и в конечном счете, обеспечивает быструю сходимость для  $G_{r'}^r$ .

#### Методы устранения проблемы знака в CT-INT

Уменьшение дисперсии результата в CT-INT используется при помощи оптимального выбора параметров  $\alpha_{r'}^r$ . Поясним это для случая примесной задачи (1.86). Так же как и алгоритм Хирша и Фая, алгоритм CT-INT в этом случае не обладает проблемой знака. Приведем краткое доказательство.

Поскольку оператор взаимодействия W является локальным во времени и пространстве, постулируем такими же параметры  $\alpha$ :

$$\alpha_r^{r'} = \alpha_\sigma \delta(\tau - \tau') \delta_{\sigma\sigma'} \tag{1.121}$$

Взаимодействие W в (1.106) примет вид

$$W_H = U \int_0^\beta d\tau (n_\uparrow(\tau) - \alpha_\uparrow) (n_\downarrow(\tau) - \alpha_\downarrow)$$
(1.122)

Так же, как и в алгоритме Хирша-Фая, поскольку гамильтониан системы сохраняет средний спин, детерминант (1.109) факторизуется по спиновым индексам:

$$D_{r'_1\dots r'_{2k}}^{r_1\dots r_{2k}} = \prod_{\sigma} \det ||g_{0\sigma} - \alpha_{\sigma} \hat{I}|| \equiv D_{\uparrow} D_{\downarrow}$$
(1.123)

Для случая U < 0 при  $\alpha_{\uparrow} = \alpha_{\downarrow}$  взаимодействие w является инвариантным относительно переворота спина и тогда  $g_{0\uparrow} = g_{0\downarrow}$ , из чего следует  $D_{\uparrow} = D_{\downarrow}$ и положительность  $\Omega_k$ . Это можно заметить из определения  $\Omega_k$  в формуле (1.107):

$$\Omega_k = Z_0 \frac{(-1)^k}{k!} (-U)^k D_{\uparrow} D_{\downarrow} > 0 \qquad (1.124)$$

Для физически интересного случая U > 0 можно заметить, что замена переменных  $\bar{c}_{\sigma} \rightarrow c_{\sigma}$  позволяет перейти к модели с притяжением ( $\tilde{U} < 0$ ). В исходных переменных это приводит к следующему равенству:

$$\alpha_{\uparrow} = 1 - \alpha_{\downarrow} = \alpha, \tag{1.125}$$

где α является произвольным действительным числом. В работе [31] обсуждается стратегия выбора α для ряда возможных случаев: показано, что выбор отрицательного малого по модулю  $|\alpha| \ll 1, \alpha < 0$  позволяет избежать проблемы знака в примесной модели Андерсона вдали от полузаполнения.

#### 1.3. Модель Хаббарда

Сильными корреляциями обладают электронные системы, содержащие незаполненные 3d и 4f оболочки переходных металлов. Особенность этих атомных оболочек состоит в отсутствии нулей в радиальной части волновой функции, что приводит к бо́льшей электронной плотности рядом с атомным ядром. Электроны в таких оболочках оказываются близкими друг к другу, матричный элемент кулоновского взаимодействия между ними сопоставим с матричным элементом обменного взаимодействия. Это делает необходимым использование как атомарного, так и зонного описания электронов в таких соединениях.

В 1953 году Дж. Хаббард изложил эти аргументы в работе [44] и предложил наиболее простую решеточную модель, объединяющую оба этих подхода. В отличие от примесной модели Андерсона, в модели Хаббарда нет разделения на примесные и зонные электроны, каждому атому соответствует *s*-оболочка локализованных на нем электронов. Для описания таких состояний хорошо подходят функции Ванье [45]:

$$\phi_{i\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\mathbf{i}}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\mathbf{i}}} u_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}), \qquad (1.126)$$

где  $u_{\mathbf{k}\sigma}$  есть блоховские волновые функции, а  $\mathbf{R}_i$  - радиус-вектор узла решетки. Волновая функция  $\phi_{i\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  является локализованной около атома с номером *i*. Аналогично (1.78) полевой  $\Psi$ -оператор принимает вид:

$$\hat{\Psi}_{\sigma}(t,\mathbf{r}) = \sum_{i} \phi_{i\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i})\hat{c}_{i\sigma}(t) \qquad (1.127)$$

Подставив это определение в (1.79) и (1.81) получим следующее выражение общего вида:

$$\hat{H} = -\sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'} U_{ijkl}^{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} c_{k\sigma'}^{\dagger} c_{l\sigma'}$$
(1.128)

Первый член в гамильтониане (1.128) при  $i \neq j$  описывает перескоки между различными узлами решетки, которые происходят благодаря обменному взаимодействию, возникающему из-за перекрытия оболочек локализованных состояний на разных узлах. Наиболее вероятным является перескок между соседними узлами решетки, поэтому в наиболее простой модели можно оставить только такой тип перескоков. При i = j этот член описывает вклад от химического потенциала системы.

Второй член в (1.128) есть матричный элемент кулоновского взаимодействия между различными электронами. Поскольку мы рассматриваем только кулоновское взаимодействие между валентными электронами, принадлежащими одному атому, в формуле (1.128) можно оставить только локальную часть взаимодействия на каждом атоме. Для случая *s*-оболочек взаимодействие упрощается до

$$H^{\text{int}} = \sum_{i} U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \tag{1.129}$$

В итоге получается гамильтониан следующего вида, который и называется моделью Хаббарда:

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \sum_{i\sigma} \mu n_{i\sigma} + \sum_{i} U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$
(1.130)

Символ < ij > означает суммирование по всем узлам решетки и их ближайшим соседям. Если произвести фурье-преобразование по пространственным координатам

$$\hat{c}_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{\mathbf{j}}},$$

то модель Хаббарда примет вид:

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{i\sigma} \mu n_{i\sigma} + \sum_{i} U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \qquad (1.131)$$

где  ${\bf k}$ есть квазиимпульс, заданный в первой зоне Бриллюэна, <br/>а $\varepsilon_{{\bf k}}$ является

решеточным законом дисперсии. Запишем также действие для модели Хаббарда, воспользовавшись (1.58):

$$S[\bar{c},c] = \sum_{\omega \mathbf{k}\sigma} \bar{c}_{\omega \mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_k - \mu - i\omega) c_{\omega \mathbf{k}\sigma} + \int_0^\beta \sum_i d\tau U \bar{c}_{i\uparrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) \bar{c}_{i\downarrow}(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) \quad (1.132)$$

Данный результат получен для случая валентной *s*-оболочки. При обобщении на многоорбитальный случай оператор кулоновскго взаимодействия принимает иной вид, см. приложение А.

Характерным безразмерным параметром модели является отношение U/tили  $U/W = Z^{-1}U/t$ , где W = 2Zt - ширина валентной зоны, Z - координационное число решетки.

Модель Хаббарда обладает богатой фазовой диаграммой в зависимости от параметров (U/t,  $\mu/t$ ). Выделенной является ситуация полузаполнения n = 1, которая происходит при  $\mu = U/2$ . При нулевой температуре при достаточно большом кулоновском взаимодействии U > W энергетически выгодным оказывается состояние, при котором все электроны распределены ровно по одному на каждый узел решетки. Перемещение любого из них на соседний узел приводит к потере  $\Delta E = U - W$ . Таким образом, в системе нет проводимости и в энергетическом спектре появляется щель. Система оказывается моттовским изолятором - диэлектрическим состоянием, возникающим из-за электрон-электронного взаимодействия. При U = 0 модель реализует состояние ферми-жидкости. Таким образом при конечном U в системе есть фазовый переход - *переход Мотта-Хаббарда*. При конечных температурах моттовский переход является переходом I рода [2], при T = 0 переход состоит из двух последовательных переходов I и II рода [46, 47].

Еще одной особенностью модели Хаббарда является наличие сверхпроводящей фазы вдали от полузаполнения. Понимание механизмов образования этой фазы важно для описания высокотемпературной сверхпроводимости в купратах, где атомы меди в слоях  $CuO_2$  образовывают квадратную решетку, хорошо описываемую данной моделью [48, 49].

#### 1.3.1. Магнитное упорядочение в модели Хаббарда

Вопрос о магнитном упорядочении в модели Хаббарда представляется крайне интересным. Кулоновское взаимодействие между электронами системы не зависит от спина, поэтому механизм решеточного спинового упорядочения не связан с прямым дипольным взаимодействием магнитных моментов, и можно предположить, что существует одинаковая вероятность реализации как антиферромагнитного, так и ферромагнитного упорядочения. Это, однако, оказывается не совсем так - все моттовские изоляторы при большом значении  $U \gg W$  являются антиферромагнетиками, а для появления ферромагнетизма нужно оказаться в особой области параметров модели [50]. Вопрос о наличии ферромагнетизма представляет особый интерес в связи с явлением итинерантного ферромагнетизма металлов [51].

При *U* ≫ *W* модель Хаббарда при полузаполнении ( $\mu = U/2$ ) переходит в модель Гейзенберга с константой антиферромагнитного обмена равной  $t^2/U$ [52]. Поясним это утверждение. Запишем гамильтониан (1.130) в следующем виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_{0} + \hat{H}_{1}$$

$$\hat{H}_{0} = U \sum_{i} (\hat{n}_{i\uparrow} - 0.5) (\hat{n}_{i\downarrow} - 0.5)$$

$$\hat{H}_{1} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma}$$
(1.133)

При полузаполнении в основном состоянии модели Хаббарда каждому узлу решетки соответствует один электрон. Система является  $2^N$  раз вырожденной, где N - число узлов решетки. Первой ненулевой поправкой, нарушающей вырождение основного состояния, является второй порядок теории возмуще-

ний по *H*<sub>1</sub>. Эффективный гамильтониан принимает вид:

$$\hat{H}_{eff} = \hat{H}_1 \frac{1}{\hat{H}_0 - E_0} \hat{H}_1 = \frac{t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle, \sigma \neq \bar{\sigma}} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} c^{\dagger}_{j\bar{\sigma}} c_{i\bar{\sigma}}$$
(1.134)

Введем по определению спиновые операторы:

$$\hat{S}_{i}^{z} = \frac{1}{2} (\hat{c}_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} - \hat{c}_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow})$$

$$\hat{S}_{i}^{+} = \hat{c}_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}$$

$$\hat{S}_{i}^{-} = \hat{c}_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\uparrow}$$

$$(1.135)$$

Тогда эффективный гамильтониан примет вид

$$\hat{H}_{eff} = \text{const} + 2\frac{t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_{\mathbf{i}} \mathbf{S}_{\mathbf{j}}$$
(1.136)

Антиферромагнитное упорядочение спинов решетки является наиболее предпочтительным. Существуют, однако, исключения. При  $U \gg W$  ферромагнитный порядок реализуется в том случае, если полное число электронов системы отличается от количества дырок ровно на единицу, а решетка является бипартитной [53]. Еще один механизм образования ферромагнетизма состоит в допировании системы, состоящей из двух антиферромагнитных подрешеток, направления упорядочения которых направлены под углом к друг другу [50]. Ферромагнитное упорядочение можно получить при допировании многоорбитальных моделей Хаббарда, выделим случай заполнения n = 1 в двухорбитальной [54] и n = 2 в трехорбитальной [55] модели Хаббарда. При конечном  $U \sim W$  дальний магнитный порядок может оказаться разрушенным и можно ожидать появления состояний RVB-типа [56]. К настоящему моменту точный вид магнитной фазовой диаграммы модели Хаббарда до сих пор остается неизвестным.

Перейдем к описанию способов решения (получения функций Грина) модели Хаббарда.

#### 1.3.2. Динамическая теория среднего поля

В физически интересном режиме  $U/W \sim 1$  в модели Хаббарда (1.130) нет явного малого параметра, что делает невозможным точное аналитическое решение проблемы. Действие (1.132) при помощи кулоновского взаимодействия нелинейно связывает бесконечное количество частотных и пространственных мод. Это обстоятельство существенно затрудняет прямой численный анализ проблемы - все известные алгоритмы обладают экспоненциальной сложностью: это верно как для метода точной диагонализации, так и для стохастических методов из-за проблемы знака [31, 57]. Эффективным методом приближенного решения задачи является среднеполевой подход, в котором реальная решеточная задача заменяется упрощенной задачей взаимодействия одного узла решетки с эффективной средой, свойства которой определяются самосогласованно. В 1989 году В. Метцнер и Д. Фолльхардт [58] показали, что в пределе бесконечной размерности  $d \to \infty$  такое решение является точным. В отличие от стандартного среднеполевого подхода, например, для модели Изинга [59] эффективное поле, действующее на каждом узле решетки, зависит от энергии, то есть по своему построению включает в себя многочастичный характер взаимодействия. Именно поэтому такая теория называется динамической теорией среднего поля. Общепринятым является использование сокращения DMFT, подробное изложение теории можно найти в обзорах [1, 2].

Запишем действие (1.132) для модели Хаббарда на решетке с законом дисперсии  $\varepsilon_k$ :

$$S[\bar{c},c] = \sum_{\omega\sigma\mathbf{k}} \bar{c}_{\omega\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - i\omega - \mu) c_{\omega\mathbf{k}\sigma} + \sum_{i} S^{\text{int}}[\bar{c}_{i},c_{i}], \qquad (1.137)$$

где в качестве S<sup>int</sup> обозначено действие, соответствующее локальному кулоновскому взаимодействию на узле решетки с номером *i*. Добавим и вычтем произвольное поле  $\Delta_{\omega\sigma}$ , одинаковое на каждом узле решетки. Исходное действие можно переписать как

$$S[c,\bar{c}] = \sum_{i} S^{imp}[c_i,c_i^*] - \sum_{\omega \mathbf{k}\sigma} \bar{c}_{\omega \mathbf{k}\sigma} (\Delta_{\omega\sigma} - \epsilon_k) c_{\omega \mathbf{k}\sigma}$$
(1.138)

$$S^{\rm imp}[c,\bar{c}] = \sum_{\omega\sigma} \bar{c}_{\omega\sigma} (\Delta_{\omega\sigma} - i\omega - \mu) c_{\omega\sigma} + S^{\rm int}[c,\bar{c}]$$
(1.139)

Действие  $S^{\text{imp}}$  есть примесная модель Андерсона (1.86). Предположим, что в результате численного решения известна функция Грина  $g_{\omega\sigma}$  примесной задачи. Исходное действие больше не содержит квартичных по грассмановым числам  $\bar{c}, c$  и его можно переписать следующим образом:

$$S[c,\bar{c}] = \sum_{\omega i\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} \bar{c}_{\omega i\sigma} c_{\omega i\sigma} - \sum_{\omega k\sigma} (\Delta_{\omega\sigma} - \epsilon_k) \bar{c}_{\omega k\sigma} c_{\omega k\sigma}$$
(1.140)

Функция Грина системы может быть получена аналитически при помощи формулы (1.39). Она имеет вид:

$$G_{\omega \mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{g_{\omega\sigma}^{-1} + \Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_k} \tag{1.141}$$

Выражение (1.141) однозначно определяет одночастичную температурную функцию Грина модели Хаббарда как функцию гибридизации  $\Delta_{\omega\sigma}$ . Все формулы вплоть до настоящего момента являются точными, однако полученное решение является недоопределенным - неизвестная решеточная функция Грина  $G_{\omega k\sigma}$  зависит от произвольной функции гибридизации  $\Delta_{\omega\sigma}$ . Для того, чтобы получить замкнутую систему уравнений, необходимо ввести дополнительное условие, однозначно определяющее функцию гибридизации атома с окружением. В рамках DMFT постулируется, что функция Грина примесной модели есть локальная часть решеточной функции Грина. Условие самосогласование есть

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}G_{\omega\mathbf{k}\sigma} = G_{\omega\sigma}(\mathbf{r}=0) = g_{\omega\sigma}$$
(1.142)

Функция гибридизации  $\Delta_{\omega\sigma}$  в таком случае зависит только от функции Грина примесной задачи. Рассмотрим более внимательно собственно-энергетическую электронную функцию

$$\Sigma_{\omega \mathbf{k}\sigma} = \left(\frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}\right)^{-1} - G_{\omega \mathbf{k}\sigma}^{-1} = i\omega + \mu - \Delta_{\omega\sigma} - g_{\omega\sigma}^{-1} = \Sigma^{\mathrm{imp}} \quad (1.143)$$

Из выражения (1.143) видно, что динамическая теория среднего поля пренебрегает нелокальными корреляциями в системе — полученная собственноэнергетическая функция является локальной и определяется однозначно решением примесной модели Андерсона. Это приводит к известному артефакту теории - выполнению правила сумм Фриделя в металлической части фазовой диаграммы [5]. Также, как и любая среднеполевая теория, динамическая теория среднего поля является неконтролируемым приближением.

По своему построению DMFT является интерполирующей теорией между двумя точными решениями в пределах  $U \gg t$  и  $U \ll t$  - в первом случае решение примесной задачи и есть решеточная функция Грина, во втором при U = 0 функция Грина примеси имеет вид  $g_{\omega}^{-1} = \Delta_{\omega\sigma} - i\omega - \mu$  и тогда  $G_{\omega k\sigma}^{-1} = \varepsilon_k - i\omega - \mu$  — точное решение из теории ферми-жидкости. Приближение локальности электронных корреляций часто является оправданным. Все это позволило динамической теории среднего поля, а вернее методу LDA-DMFT, в котором решеточный закон дисперсии определяется при помощи метода функционала плотности, воспроизводить количественные результаты электронных спектров систем с сильными-электронными корреляциями [1]. В качестве примеров выделим моттовский переход в  $V_2O_3$  при допировании атомами Cr, переход металл-изолятор в  $La_{1-x}Sr_xTiO_{3-\delta}$  [60, 61]. DMFT позволяет рассчитывать термодинамические характеристики системы, выделим в этой связи работу [62], в которой при помощи схемы LDA-DMFT из первых принципов определены температуры Кюри железа и никеля.

Существует обширный класс систем, в которых нелокальными корреля-

циями пренебречь нельзя - к ним можно отнести латтинджеровскую жидкость в низкоразмерных системах [63], изоляторную фазу  $V_2O_3$  [64], системы с сильными квантовыми флуктуациями вследствие решеточной фрустрации [65] или наличия сингулярностей Ван Хова [66], и ВТСП-купраты [67]. Для теоретического описания таких систем необходима теория, позволяющая учитывать дисперсию собственно-энергетической функции. Одним из возможных вариантов является кластерное обобщение метода [68], позволившее описать d-волновое спаривание в купратных сверхпроводниках [48]. Недостаток такого подхода состоит в зависимости результатов от выбора конкретного кластера. Поскольку теория является неконтролируемым приближением, оказывается невозможным предоставить основание для выбора конкретного кластера. Улучшение в этой области связано с использованием Dynamical cluster approach - обобщения DMFT, в котором размер кластера определяется динамически. Отметим недавние результаты с фазовыми диаграммами модели Хаббарда на квадратной и кубической решетках [49, 69]. Другой проблемой кластерных методов часто является неправильное магнитное упорядочение выбранный кластер не всегда оказывается элементарной ячейкой магнитной подрешетки. Практически это означает, что кластерные методы подходят для описания простого дальнего порядка, например, антиферромагнетизма.

#### 1.3.3. Метод дуальных фермионов

Основная сложность получения численного решения модели Хаббарда состоит в наличии бесконечного числе как решеточных, так и частотных мод в гамильтониане. В динамической теории среднего поля за счет пренебрежения нелокальными корреляциями удается разделить задачу на две независимых части: примесная задача содержит в себе всю частотную зависимость функции Грина, решеточное решение получается при выполнении условия са-

мосогласования (1.142). Указанная трудность не была бы существенной при наличии в системе малого параметра - в этом случае можно просто использовать теорию возмущения по этому параметру. В модели (1.132) такого параметра нет. Оригинальная идея авторов работы [10] состояла в применении преобразования Хаббарда-Стратоновича (1.70) и переходом к новым - *дуальным* переменным при помощи контролируемого параметра  $\Delta_{\omega\sigma}$ , выбранного таким образом, чтобы в новом действии оказалось возможным строить теорию возмущения (диаграммную технику). В методе дуальных фермионов нулевой порядок теории возмущений воспроизводит результат динамической теории среднего поля, последующие поправки есть пертурбативный учет нелокальных корреляций в системе.

Запишем основные уравнения данного метода. Начнем снова с действия (1.137) для модели Хаббарда, добавим и вычтем из него произвольную функцию гибридизации  $\Delta_{\omega\sigma}$ , чтобы получить выражение (1.138):

$$S[\bar{c}, c] = \sum_{i} S^{imp}[\bar{c}_{i}, c_{i}] - \sum_{\omega \mathbf{k}\sigma} \bar{c}_{\omega \mathbf{k}\sigma} (\Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) c_{\omega \mathbf{k}\sigma}$$
$$S^{imp}[c, \bar{c}] = \sum_{\omega\sigma} \bar{c}_{\omega\sigma} (\Delta_{\omega\sigma} - i\omega - \mu) c_{\omega\sigma} + S^{int}[\bar{c}, c],$$

где  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  есть решеточный закон дисперсии,  $S^{\text{imp}}$  - действие примесной задачи (1.86). Будем считать, что в результате численной процедуры (например, метода Монте-Карло) известны функция Грина и старшие корреляторы примесной задачи. Воспользуемся преобразованием Хаббарда-Стратоновича (1.74):

$$\exp\{\bar{c}AB^{-1}Ac\} = B^{-1} \int d\bar{f}df \exp\{-\bar{c}Af - \bar{f}Ac - \bar{f}Bf\}$$

Примем  $A = g_{\omega\sigma}^{-1}, B = g_{\omega\sigma}^{-1} (\Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}})^{-1} g_{\omega\sigma}^{-1}$ . После разложения  $\exp\{-\bar{c}_{\omega\mathbf{k}\sigma}(\Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}})c_{\omega\mathbf{k}\sigma}\}$  при помощи (1.74) действие системы зависит от двойного набора

грассмановых переменных и имеет следующий вид:

$$S[\bar{c}, c, \bar{f}, f] = \sum_{i} S^{imp}[\bar{c}_{i}, c_{i}] + \sum_{\omega \mathbf{k}\sigma} (\bar{f}_{\omega \mathbf{k}\sigma} g_{\omega}^{-1} c_{\omega \mathbf{k}\sigma} + \bar{c}_{\omega \mathbf{k}\sigma} g_{\omega}^{-1} f_{\omega \mathbf{k}\sigma}) + \sum_{\omega \mathbf{k}\sigma} \bar{f}_{\omega \mathbf{k}\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} (\Delta_{\omega\sigma} - \epsilon_{k})^{-1} g_{\omega\sigma}^{-1} f_{\omega \mathbf{k}\sigma} \quad (1.144)$$

Теперь для получения средних величин нужно произвести интегрирование по четырем наборам грассмановых переменным:

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{c}\mathcal{D}c \exp\{-S[\bar{c},c] = \int \mathcal{D}\bar{c}\mathcal{D}c\mathcal{D}\bar{f}\mathcal{D}f \exp\{-S[\bar{c},c,\bar{f},f]\}.$$

В выражении (1.144) опущен член –  $\ln(g_{\omega\sigma}(\Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_k)g_{\omega\sigma})$ , который не зависит от грассмановых переменных и сокращается при делении на статсумму. Поскольку интегральное преобразование (1.74) является точным и обратимым, оказывается возможным установить точное соответствие между решеточной функцией Грина исходной задачи  $G_{\omega k\sigma} = \int \mathcal{D}\bar{c}\mathcal{D}cc_{\omega k\sigma}\bar{c}_{\omega k\sigma}\exp(-S[\bar{c},c,\bar{f},f])$ и дуальной функцией Грина  $G^{d}_{\omega k\sigma} = \int \mathcal{D}\bar{f}\mathcal{D}ff_{\omega k\sigma}\bar{f}_{\omega k\sigma}\exp(-S[\bar{c},c,\bar{f},f])$  при помощи варьирования действия (1.144) по  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  (не забывая при этом про указанный логарифмический член). Получим следующее соотношение:

$$G_{\omega \mathbf{k}\sigma} = (\Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_k)^{-1} + (\Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_k)^{-1} g_{\omega\sigma}^{-1} G_{\omega \mathbf{k}\sigma}^{\mathrm{d}} g_{\omega\sigma}^{-1} (\Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_k)^{-1}$$
(1.145)

Особенность формулы (1.144) состоит в возможности аналитически проинтегрировать по набору начальных переменных  $\bar{c}, c$ , воспользовавшись равенством

$$\sum_{\mathbf{k}} (\bar{f}_{\omega\mathbf{k}\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} c_{\omega\mathbf{k}\sigma} + \bar{c}_{\omega\mathbf{k}\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} f_{\omega\mathbf{k}\sigma}) = \sum_{i} (\bar{f}_{\omega i\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} c_{\omega i\sigma} + \bar{c}_{\omega i\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} f_{\omega i\sigma}), \quad (1.146)$$

где индекс *i* есть номер узла решетки. Теперь действие (1.144) содержит только локальные переменные  $\bar{c}_i, c_i$ . Перепишем его в следующем виде:

$$S = \sum_{i} S^{\text{site}}[\bar{c}_{i}, c_{i}] + \sum_{\omega \mathbf{k}\sigma} \bar{f}_{\omega \mathbf{k}\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} (\Delta_{\omega\sigma} - \epsilon_{k})^{-1} g_{\omega\sigma}^{-1} f_{\omega \mathbf{k}\sigma}$$

$$S^{\text{site}}[\bar{c}, c] = S^{\text{imp}}[\bar{c}, c] + \sum_{\omega} (\bar{f}_{\omega\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} c_{\omega\sigma} + \bar{c}_{\omega\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} f_{\omega\sigma})$$

$$(1.147)$$

Произведем интегрирование  $\exp(-S^{\text{site}})$  по  $\bar{c}_i, c_i$ , тем самым завершая замену переменных. Раскладывая экспоненту в ряд получим

$$\int \mathcal{D}\bar{c}\mathcal{D}c \exp(-S^{\text{site}}[\bar{c},c]) = Z_{\text{tmp}} \exp\left(-\sum_{\omega} \bar{f}_{\omega\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} f_{\omega\sigma} - V[\bar{f},f]\right)$$
(1.148)

Убедимся в правильности соотношения (1.148) и найдем вид  $V[\bar{f}, f]$  при помощи разложения правой и левой части в ряд. В первом ненулевом порядке получим

$$-\int \mathcal{D}\bar{c}\mathcal{D}c\sum_{w} \bar{f}_{\omega\sigma}g_{\omega\sigma}^{-1}c_{\omega\sigma}\sum_{\omega'} \bar{c}_{\omega'\sigma}g_{\omega'\sigma}^{-1}f_{\omega'\sigma}\exp(-S^{\rm imp}[\bar{c},c]) =$$
$$=-Z_{\rm imp}\sum_{\omega} \bar{f}_{\omega\sigma}g_{\omega\sigma}^{-1}\langle c_{\omega\sigma}\bar{c}_{\omega\sigma}\rangle g_{\omega\sigma}^{-1}f_{\omega\sigma}\delta_{\omega\omega'} = -Z_{\rm imp}\sum_{\omega} \bar{f}_{\omega\sigma}g_{\omega\sigma}^{-1}f_{\omega\sigma} \quad (1.149)$$

Нетрудно заметить, что в следующем порядке разложения левой части (1.148) будут фигурировать по 4 набора грассмановых переменных *с* и *f*. Получим в этом порядке следующее равенство:

$$\frac{1}{2^2} \sum_{1234} g_1^{-1} g_2^{-1} \langle c_1 c_2 \bar{c}_3 \bar{c}_4 \rangle g_3^{-1} g_4^{-1} = -V^{(4)} + \frac{1}{2^2} \sum_{12} g_1^{-1} g_2^{-1}, \qquad (1.150)$$

откуда

$$V^{(4)}[\bar{f},f] = -\frac{1}{4}\gamma^{(4)}_{1234}\bar{f}_1\bar{f}_2f_3f_4, \qquad (1.151)$$

где численным индексом обозначены сочетание номера мацубары и спина:  $1 = \{\omega_1, \sigma_1\}$ .  $\gamma_{1234}^{(4)}$  есть вершинная функция системы согласно определению (4). Члены более высокого порядка для  $V[\bar{f}, f]$  имеют аналогичный вид, что и (1.151):

$$V^{(n)}[\bar{f},f] = \frac{(-1)^{n-1}}{(n!)^2} \gamma^{(2n)}_{12\dots 2n} \bar{f}_1 \cdots \bar{f}_n f_{n+1} \cdots f_{2n}$$
(1.152)

Таким образом в методе дуальных переменных, разложение нелинейного потенциала дуального действия производится по вершинным функциям примесной задачи. Запишем итоговое действие системы в новых переменных:

$$S[\bar{f}, f] = \sum_{\omega \mathbf{k}\sigma} \bar{f}_{\omega \mathbf{k}\sigma} g_{\omega\sigma}^{-1} \left( (\Delta_{\omega\sigma} - \epsilon_k)^{-1} + g_{\omega\sigma} \right) g_{\omega\sigma}^{-1} f_{\omega \mathbf{k}\sigma} + \sum_i V_i[\bar{f}, f], \quad (1.153)$$

Действие (1.153), обладая нелокальным взаимодействием  $V_i[\bar{f}, f]$ , является даже более сложной проблемой для численного решения, чем исходная задача (1.137). Однако в этом действии есть свободный параметр  $\Delta_{\omega\sigma}$ , который мы зафиксируем следующим образом:

$$\sum_{\mathbf{k}} G^{\mathrm{d}}_{\omega \mathbf{k}\sigma} = 0 \tag{1.154}$$

При V = 0 дуальная функция Грина есть:

$$G_{\omega \mathbf{k}\sigma}^{\mathrm{d0}} = \left[g_{\omega\sigma}^{-1} \left( (\Delta_{\omega\sigma} - \epsilon_k)^{-1} + g_{\omega\sigma} \right) g_{\omega\sigma}^{-1} \right]^{-1}$$
(1.155)

Условие самосогласования (1.154) примет вид:

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\frac{1}{\Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}} + g_{\omega\sigma}} = 0 \Leftrightarrow \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{g_{\omega\sigma}^{-1} + \Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}} = 0 \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow g_{\omega\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{g_{\omega\sigma}^{-1} + \Delta_{\omega\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (1.156)$$

что в точности есть условие самосогласования (1.142) в динамической теории среднего поля. Таким образом нулевой порядок теории возмущений по V в действии (1.153) дает хорошее приближение функции Грина исходной решеточной задачи. Это делает оправданным использование диаграммной техники для решения задачи (1.153). Более строгое доказательство можно привести для предельных режимов  $U \ll t$  и  $U \gg t$ . В первом случае вершинные функции оказываются малыми, так как  $\gamma^{(4)} \sim U, \gamma^{(6)} \sim U^2, \cdots$ . Во втором случае малой оказывается дуальная функция Грина:  $G^{d0}_{\omega \mathbf{k}\sigma} \approx g_{\omega\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} g_{\omega\sigma}$ .

Тот факт, что локальная часть дуальной функции Грина равна 0, говорит о том, что дуальная теория возмущения описывает нелокальные поправки к среднеполевому решению. Для наглядности, перепишем (1.145) в следующем виде:

$$\Sigma'_{\omega \mathbf{k}\sigma} = \Sigma_{\omega \mathbf{k}\sigma} - \Sigma^{\rm imp}_{\omega\sigma} = \frac{\Sigma^{\rm d}_{\omega \mathbf{k}\sigma}}{1 + \Sigma^{\rm d}_{\omega \mathbf{k}\sigma} g_{\omega\sigma}},\tag{1.157}$$

где  $\Sigma_{\omega k\sigma}$ ,  $\Sigma_{\omega \sigma}^{imp}$ ,  $\Sigma_{\omega k\sigma}^{d}$  - собственно-энергетические функции исходной задачи (1.137), примесной задачи (1.86) и дуальной задачи (1.153) соответственно. Величина  $\Sigma'_{\omega k\sigma}$  описывает k—зависящую поправку в собственно-энергетическую функцию по сравнению со среднеполевым значением. Из формулы (1.157) видно, что в отсутствии дуальных поправок собственно-энергетическая функция системы определяется локальной примесной задачей, в то время как наличие малой дуальной поправки производит k-зависящий вклад.

#### Организация вычислений

Приведем схему численных вычислений, при помощи которой реализуются уравнения метода дуальных фермионов. Численное вычисление функций Грина высокого порядка при помощи квантового метода Монте-Карло является трудной задачей, поэтому обычно используется только первый ненулевой член дуального потенциала (1.151), требующий только вершинной функции  $\gamma^{(4)}$ . Последовательность действий выглядит следующим образом:

- На начальном этапе для затравочной функции гибридизации Δ<sub>ωσ</sub> при помощи квантового метода Монте-Карло определяется функция Грина g<sub>ωσ</sub> и вершинная функция γ<sup>(4)</sup>.
- При помощи выражения (1.155) конструируется дуальная функция Грина нулевого порядка G<sup>d0</sup><sub>\u03c6k\u03c6</sub>.
- По теории возмущения вычисляется дуальная собственно-энергетическая функция Σ<sup>d</sup><sub>ωkσ</sub>. Первая нетривиальная диаграмма имеет вид:

$$\Sigma_{11'}^{d}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\beta^{2}} \sum_{\substack{234\\2'3'4'}} \delta_{\omega_{1}+\omega_{3}}^{\omega_{2}+\omega_{4}} \gamma_{1234}^{(4)} G_{4'4}^{d}(\mathbf{r}) G_{2'2}^{d}(-\mathbf{r}) G_{3'3}^{d}(\mathbf{r}) \gamma_{4'3'2'1'}^{(4)} \quad (1.158)$$

 При помощи уравнения Дайсона вычисляется дуальная функция Грина:

$$(G^{\mathrm{d}}_{\omega\mathbf{k}\sigma})^{-1} = (G^{\mathrm{d}0}_{\omega\mathbf{k}\sigma})^{-1} - \Sigma^{\mathrm{d}}_{\omega\mathbf{k}\sigma}$$
(1.159)

Для расчета скелетных диаграмм можно произвести итерацию 3 и 4 шагов до получения сходимость дуальной функции Грина.

5. Вычисляется новая функция гибридизации при помощи соотношения следующего вида:

$$\Delta_{\omega\sigma}^{\text{new}} = \Delta_{\omega\sigma}^{\text{old}} + \xi g_{\omega\sigma}^{-1} G_{\omega\sigma}^{\text{d}}(\mathbf{r}=0) G_{\omega\sigma}^{-1}(\mathbf{r}=0), \qquad 0 < \xi < 1 \qquad (1.160)$$

Выбор конкретной формулы для итераций функции гибридизации в достаточной степени произволен, достаточно, чтобы при достижении сходимости обеспечивалось условие самосогласования (1.154), что происходит в указанном случае. Оптимальный выбор увеличивает скорость схождения итераций. Подробное обоснование применимости такого вида формулы есть в книге [70].

 Производится поочередное повторение схемы вплоть до достижения сходимости Δ<sub>ωσ</sub>, g<sub>ωσ</sub>. После этого по формуле (1.145) вычисляется решеточная функция Грина исходной задачи.

Графическая схема вычислений из работы [71] приведена на рис. 1.1. Наиболее ресурсоемким является вычисление вершинной функции  $\gamma^{(4)}$ . В данной работе использовался квантовый метод Монте-Карло в непрерывном времени с разложением по величине взаимодействия (СТ-INT). Аналогичные вычисления с алгоритмом с разложением по величине гибридизации приводят к существенному стохастическому шуму в результатах [43].

#### Модификации метода

В отличие от среднеполевых подходов метод дуальных фермионов чувствителен к длинноволновым корреляциям в системе. Расчеты с применением диаграммы (1.158) позволили создателям метода учесть флуктуации спина в плотности состояний полузаполненной модели Хаббарда при полузаполнении [72]. Метод дуальных фермионов лишен недостатка DMFT - выполнения правила сумм Фриделя. В той же работе [72] авторам удалось объяснить сценарий анизотропного разрушения поверхности Ферми для систем с допированием. Расчеты с применением диаграммы (1.158) не всегда позволяют получить количественно точные результаты. Существенным улучшением является суммирование рядов диаграмм для дуальной собственно-энергетической функции, в частности лестничного ряда [73].

С помощью преобразования (1.74) аналогично формуле (1.145) можно получить соотношение между функциями Грина более высоких порядков, в частности, для двухчастичных пропагаторов. Суммирование диаграммного ряда в этом случае происходит с использованием уравнения Бете-Солпитера. Такая схема позволяет получить нелокальные поправки к восприимчивости по сравнению со среднеполевым решением [74].

Формулы, приведенные в данном разделе, могут быть применены для кластерных расчетов [71]. Для этого вместо пары грассмановых переменных  $\bar{c}_{\omega \mathbf{k}\sigma}, c_{\omega \mathbf{k}\sigma}$  нужно перейти к векторам

$$\bar{\mathbf{c}}_{\omega\mathbf{k}\sigma} = (\bar{c}_{1\omega\mathbf{k}\sigma}, \bar{c}_{2\omega\mathbf{k}\sigma} \cdots \bar{c}_{j\omega\mathbf{k}\sigma}); \ \mathbf{c}_{\omega\mathbf{k}\sigma} = (c_{1\omega\mathbf{k}\sigma}, c_{2\omega\mathbf{k}\sigma} \cdots c_{j\omega\mathbf{k}\sigma}),$$

где *j* означает номер узла в выбранной сверхячейке. Закон дисперсии, функция Грина и гибридизации становятся матрицами в пространстве номеров узлов в кластере. Все арифметические операции данного параграфа нужно проводить в матричном виде.

Представляет интерес модификация метода, в которой в качестве примесной задачи рассматривается гамильтонова проблема, для которой при помощи метода точной диагонализации можно достаточно быстро рассчитать функцию Грина и вершинные части [75]. Среднеполевое решение решеточной проблемы с выбранной таким образом примесной задачей является неточным, однако использование дуальных поправок существенно улучшает аккуратность схемы. Такой подход позволяет приближенно решить примесную модель Андерсона без применения стохастических методов. Отсутствие шума Монте-Карло позволяет использовать для аналитического продолжения полученной функции Грина метод Паде-аппроксимантов [76], являющийся существенно более точным, чем метод максимальной энтропии. Более того, все операции можно произвести напрямую с запаздывающими функциями Грина, не прибегая к некорректной процедуре аналитического продолжения, что было сделано как для нулевой [77], так и для конечной [78] температуры. В применении к решеточным моделям такая схема позволяет учитывать тонкие особенности спектра, например наличие псевдощели в полузаполеннной модели Хаббарда [79].



 $\Delta_{
m new} = \Delta_{
m old} + g^{-1} G^{
m d}_{
m loc} G^{-1}_{
m loc}$ 

Рис. 1.1. Блок-схема вычислений в методе дуальных фермионов. Внутренний цикл служит для итеративного решения уравнения Дайсона, внешний - для нахождения функции гибридизации при помощи квантового метода Монте-Карло

#### Глава 2

## Спиновая жидкость в модели Хаббарда на треугольной решетке

#### 2.1. Введение

В данной главе рассматривается роль спиновых флуктуаций в определении фазовой диаграммы фрустрированных систем. Особый интерес представляет случай, когда флуктуации спина настолько сильны, что они разрушают магнитное упорядочение [80]. Показано, что на треугольной решетке синглетные корреляции электронов решетки приводят к образованию фазы без дальнего магнитного порядка - спиновой жидкости в конечной области параметров U/t. Исследована плотность состояний этой фазы, обсуждены значения полученных критических параметров.

Впервые подобный сценарий нарушения антиферромагнитного порядка предложил Ф. Андерсон [56, 81], рассмотрев случай модели Изинга на треугольной решетке с антиферромагнитным взаимодействием, действующим между соседними узлами решетки. Основное состояние в такой модели является макроскопически вырожденным, добавление в гамильтониан слагаемых гейзенберговского типа, ответственных за переворот спинов, приводит к формированию состояния жидкости спиновых синглетов, известного как состояние с резонансными валентными связями (RVB) [56, 81].

Дальнейшие работы в этой области, впрочем, не подтверждали гипотезу Андерсона [82, 83]. Основным состоянием классической модели Гейзенберга на треугольной решетке является неколлинеарная магнитная структура с углом между соседними спинами, равным 120 градусов [84]. Квантовая модель Гейзенберга обладает аналогичным решением, теоретические и расчетные ре-

зультаты QMC и DMRG предсказывают также 120-ти градусное упорядочение [85–88]. Впрочем, в последнем случае введение беспорядка в модель может привести к разрушению порядка и к образованию спиновой жидкости [89].

Ситуация изменилась с открытием органических  $\kappa$ -ET<sub>2</sub>X солей, которые построены при помощи BEDT-TTF (ET) молекул, а X является одновалентным анионом [90]. Такие соединения обладают треугольной решеткой, образованной димерами ET молекул с эффективной величиной обменного интеграла  $t \approx 50 meV$ . Существуют экспериментальные доказательства, что RVB спиновая жидкость — это основное состояние *моттовского* диэлектрика: органической соли  $\kappa$ - (ET)<sub>2</sub>Cu<sub>2</sub> (CN)<sub>3</sub> [65, 91, 92]. По оценкам авторов оригинальной работы [65] система обладает одинаковым заполнением электронов и дырок, а величина матричного элемента кулоновского взаимодействия на узле составляет  $U \approx 8.2t$ . В последнее время еще одним перспективным направлением являются иридаты [93]. Спиновая жидкость является основным состоянием оксида шпинели Na<sub>4</sub>Ir<sub>3</sub>O<sub>8</sub> на гиперкагоме решетке [94, 95], который также является моттовским диэлектриком.

Для описания моттовских диэлектриков традиционно используют модель Хаббарда. Решеточная фрустрация является существенно нелокальной особенностью решетки, которую необходимо учесть при решении проблемы. В данной работе для рассмотрения корреляций синглетного типа (образующих ближний магнитный порядок) используется метод дуальных фермионов, рассмотренный в §1.3.3. Перейдем к непосредственной постановке задачи.

### 2.2. Состояние спиновой жидкости и антиферромагнитного упорядочения в модельных расчетах

Для теоретического описания фрустрированных моттовских диэлектриков, обладающих RVB состоянием, необходимо максимально точно выбрать модель. Модель Хаббарда на треугольной решетке с взаимодействием между соседними узлами при полузаполнении является наиболее очевидным выбором. Однако существуют несколько трудностей. Во-первых, *ab-initio* расчеты [96, 97] показывают, что семейство  $\kappa$ -ET<sub>2</sub>X органических солей обладают треугольной решеткой с анизотропией t, матричных элементов перескока электронов на соседний узел, около 20% для различных направлений вдоль поверхности. Во-вторых, основное состояние рассматриваемой модели является очень чувствительным по отношению к выбору параметров. RVB спиновая жидкость и антиферромагнитное 120-градусное неелевское состояние обладают очень близкими энергиями [98, 99]. Любая из этих фаз может быть стабилизирована в эксперименте изменением величин взаимодействия между ближайшими соседями, электрон-фононных взаимодействий, анизотропии итд. Это затрудняет прямое сравнение расчетов основного состояния, полученных для модели Хаббарда на изотропной треугольной решетке, с экспериментальными. Однако спиновые флуктуации в случае изотропного обмена являются наиболее сильными, система является наиболее "фрустрированной". Это совпадает с изначальной постановкой Ф. Андерсона [56]. Поэтому именно такой случай рассматривается в данной работе.

В пределе сильного отталкивания на узле U модель Хаббарда эквивалентна модели Гейзенберга с антиферромагнитным обменным взаимодействием между ближайшими соседями  $J = 2t^2/U$  (см. §1.3.1). Основным состояни-

ем системы в таком случае является неелевское упорядочение.

При уменьшении величины U, ситуация становится более запутанной. Результаты, полученные с помощью ренормализационной группы интегралов по траекториям (PIRG) [98, 100] и медодом варьирования кластеров (VCA) [101] предсказывают, что существует конечный интервал параметра U/t, в котором изоляторное состояние, не обладающее дальним порядком, будет превалирующим при нулевой температуре. Расчеты методом динамической теории среднего поля оказываются количественно несостоятельными - величина критического U перехода Мотта-Хаббарда оказывается около  $U_c \approx 12 - 16$ [82, 102], что существенно больше, чем предложенное в работе [65] значение  $U_c \approx 8.2$ . Характер этой ошибки связан с применением среднеполевого метода только для описания локальных корреляций, тогда как состояние RVB типа предполагает нелокальность как минимум на уровне парных корреляций [56, 63, 81]. Установление магнитной фазовой диаграммы в рамках DMFT не является возможным - различные кластерные обобщения данного метода [103–105] позволяют описать только состояния с дальним магнитным упорядочением (более подробно в §1.3.1). Отметим, однако, что в кластерных схемах наблюдается понижение значения  $U_c$  до 9.5 - 10.5t. Метод дуальных фермионов уже применялся по отношению к данной задаче [105], однако вопрос о разрушении дальнего магнитного порядка в работе [105] не обсуждался.

# 2.3. Спиновая поляризация в методе дуальных фермионов

В данном разделе приведены формулы обобщения метода дуальных фермионов для описания статического антиферромагнитного спинового упорядочения в модели Хаббарда при полузаполнении на треугольной решетке.

В среднеполевых теориях дальнее магнитное упорядочение системы мо-

жет быть эффективно описано при помощи введения спиновой поляризации в решетку. Основные уравнения теории принимают вид кластерных, а функции Грина различных узлов сверхрешетки получаются при помощи операции поворота в спиновом пространстве. Примесная задачи при этом остается одноузельной - эффективная гибридизация  $\Delta_{\omega\sigma}$  получается при помощи выбора единичного матричного элемента кластерной матрицы функции гибридизации :  $\Delta_{\omega\sigma} = \Delta_{\omega\sigma 00}$ . Антиферромагнитное обобщение метода дуальных фермионов было использовано в работе [72] для описания влияния спиновых флуктуаций на плотность состояний в модели Хаббарда на квадратной решетке.

Неелевское упорядочение спинов изображено на рис. 2.1, на нем также изображены базисные векторы треугольной решетки и базисные векторы *сверхрешетки*, состоящей из трех атомов с разным направлением спина. Кластер такого типа является элементарной ячейкой магнитной подрешетки в антиферромагнитном случае. При увеличении площади элементарной ячейки в три раза по сравнению с исходной решеткой первая зона Бриллюэна сверхрешетки соответственно уменьшается в три раза. Исходную зону Бриллюэна обычной решетки можно получить при помощи операции переноса на фиксированные векторы трансляции обратной решетки магнитной подсистемы. Этот факт проиллюстрирован на нижней части рис. 2.1.

Определим связь между одноузельной примесной моделью и кластерной решеточной задачей. В соответствие с рис. 2.1 разделим решетку на сверхячейки, которые состоят из трех атомов. Произведем *два* Фурье-преобразования по радиус-векторам сверхячеек и пространственным индексам внутри сверхячеек. Это соответствует схеме, аналогичный методу DCA [68]. Получим



Рис. 2.1. Векторы трансляции и зона Бриллюэна треугольной решетки.  $\mathbf{r_x}, \mathbf{r_y}$  - базисные вектора треугольной решетки,  $\mathbf{R_1}, \mathbf{R_2}$  - базисные вектора сверхрешетки кластеров из трех атомов,  $\mathbf{k_x}, \mathbf{k_y}$  - векторы трансляции обратной треугольной решетки,  $\mathbf{k_1}, \mathbf{k_2}$  - векторы трансляции обратной треугольных кластеров.

следующее соотношение для решеточной функции Грина:

$$G(\mathbf{r} = \mathbf{R}_{M} + \mathbf{r}_{\mathbf{i}}, \mathbf{r}' = \mathbf{R}_{M'} + \mathbf{r}_{\mathbf{j}}) = \sum_{\mathbf{K}} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\mathbf{K})e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_{m} - \mathbf{R}_{M'})}e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}_{i} - \mathbf{k}'\mathbf{r}_{\mathbf{j}})}, \quad (2.1)$$

где  $\mathbf{R}_{M}$  — радиус-вектор сверхрешетки,  $\mathbf{r}_{i}$  — один из трех радиус-векторов узла внутри сверхячейки. **К** - вектор в обратном пространстве, определенный непрерывно внутри зоны Бриллюэна сверхрешетки,  $\mathbf{k}$  — базисный вектор обратной решетки магнитной подсистемы. В этих обозначениях гамильтониан модели Хаббарда (1.130) может быть записан в следующем виде:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{K}\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\mathbf{K}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\mathbf{K}) - \mu) c_{\mathbf{k}'\mathbf{K}\sigma} + \sum_{i} U \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \qquad (2.2)$$

где индекс *i* есть номер узла треугольной решетки. Закон дисперсии является диагональным в обоих *k*-пространствах и имеет вид:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\mathbf{K}) = \varepsilon(\mathbf{K} + \mathbf{k})\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \tag{2.3}$$

$$\varepsilon(\mathbf{K} = \alpha \mathbf{k_1} + \beta \mathbf{k_2}) = -2t \left[ \cos(\frac{2\pi}{3}(-\alpha + \beta)) + \cos(\frac{2\pi}{3}(\alpha + 2\beta)) + \cos(\frac{2\pi}{3}(-2\alpha - \beta)) \right], \quad (2.4)$$

где  $\mathbf{k_1}, \mathbf{k_2}$  - неколлинеарные базисные вектора сверхячейки в обратном пространстве:  $\mathbf{k_1} = \frac{1}{3}(\mathbf{k_x} + \mathbf{k_y}), \mathbf{k_2} = \frac{1}{3}(-\mathbf{k_x} + 2\mathbf{k_y}), |\mathbf{k_1}| = |\mathbf{k_2}|,$ а символами  $\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y$ обозначены базисные вектора обратной треугольной решетки.

После добавления и вычитания произвольной функции гибридизации в действие для модели Хаббарда получим:

$$S[c, c^*] = \sum_{i} S_{(i)}^{imp} - \sum_{\mathbf{K}\mathbf{k}\mathbf{k}'\omega\sigma} \mathbf{c}^*_{\mathbf{K}\mathbf{k}\sigma} (\Delta_{\omega\mathbf{k}\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\mathbf{K})) \mathbf{c}_{\mathbf{K}\mathbf{k}'\sigma}, \qquad (2.5)$$

где  $S^{\text{imp}}$  есть примесная модель Андерсона (1.86). **k**-зависимость  $\Delta_{\omega}$  возникает из-за пространственного преобразования Фурье по внутренним радиус-векторам узлов сверхрешетки. В случае когда все узлы эквивалентны, модель упрощается до одноузельной и матрица функции гибридизации становится диагональной:  $\Delta_{\omega \mathbf{k} \mathbf{k}'} = \Delta_{\omega} \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}.$ 

Дальнейшие шаги схемы дуальных фермионов аналогичны приведенным в §1.3.3 и в работе [71]. При помощи квантового метода Монте-Карло определяется функция Грина одного из узлов системы. Далее, при помощи преобразования поворота определяются функции Грина и функции гибридизации соседних узлов системы:

$$g_{\omega i} = \hat{U}_i(\frac{\pi}{2}, \pm \frac{2\pi}{3})\hat{g}_{\omega}\hat{U}_i^*(\frac{\pi}{2}, \pm \frac{2\pi}{3}), \qquad (2.6)$$

где  $\hat{U}$  - матрица вращения спина размера  $2 \times 2$ . Вслед за этим выполняются пункты 2 - 6 схемы в §1.3.3, затем вся схема сходилась итеративно к устойчивому решению. В работе использовалась первая нетривиальная диаграмма дуальной собственно-энергетической функции

$$\Sigma_{11'}^{d} = -\frac{1}{2\beta^2} \sum_{\substack{234\\2'3'4'}} \delta_{\omega_1+\omega_3}^{\omega_2+\omega_4} \gamma_{1234}^{(4)} G_{44'}^{d}(\mathbf{R}) G_{2'2}^{d}(-\mathbf{R}) G_{3'3}^{d}(\mathbf{R}) \gamma_{4'3'2'1'}^{(4)}$$

Для сравнения различных фаз рассчитывалась полная энергия системы на один узел  $\langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle$ . При этом использовались следующие формулы [1]:

$$\hat{H}\rangle = \langle \hat{H}_0 + \hat{V} - \mu \hat{N} \rangle,$$
(2.7)

$$\langle H_0 \rangle = -t \sum_{j\sigma} G_{0j}(\tau = 0+),$$
 (2.8)

$$\langle H_0 + 2V - \mu N \rangle = \left(\frac{\partial G_{00}(\tau)}{\partial \tau}\right)_{\tau \to 0+}$$
 (2.9)

Процедура получения производной функции Грина (2.9) требует Фурьепреобразования функции Грина из мацубаровского в представление мнимого времени. Поскольку алгоритм CT-INT (§1.2.5) вычисляет функцию Грина на конечном числе мацубаровских частот, это могло бы быть серьезным источником численных ошибок. Квантовый метод Монте Карло в непрерывном времени с разложением по нелинейному взаимодействию обладает малым шумом
на высоких мацубаровских частотах, что позволяет экстраполировать асимптотики функций Грина и производить фурье-преобразование аналитически для высокочастотной части функции Грина.

### 2.4. Результаты

Для того чтобы вычислить энергетическую диаграмму треугольной решетки было произведено 2-3 серии независимых вычислений, состоявших из 20-30 DMFT итераций и последующих 15-25 DF итераций на решетке размера  $32 \times 32$ . В работе использован метод квантового Монте Карло в непрерывном времени с разложением по величине кулоновского взаимодействия (CT-INT), для которого стохастическая погрешность становится существенной при больших значениях U. Полученные данные были усреднены, соответствующая статистическая погрешность построена на графиках. Спин-поляризованная диэлектрическая фаза построена при помощи вращения в спиновом пространстве, она соответствует неелевскому состоянию. Неполяризованная DMFT диэлектрическая фаза, обладая только локальными корреляциями, описывает парамагнитное состояние. Неполяризованная диэлектрическая DF фаза построена при помощи синглетной диаграммы для собственно-энергетической функции и, следовательно, является приближением состояния RVB-спиновой жидкости.

#### 2.4.1. Энергетика треугольной решетки

Зависимости средней энергии  $\langle H + \mu N \rangle = \langle H \rangle + U/2$  и среднего квадрата магнитного момента  $\langle m^2 \rangle$  на узел решетки как функции от U/t в интервале 8 < U/t < 14 при  $\beta t = 10$  представлены на рисунках 2.2 и 2.3 соответственно. Были рассчитаны отдельные кривые для спин-поляризованного и неполяризованных случаев - таким образом, были отдельно рассмотрены фазовые переходы металл— $120^{\circ}$  антиферромагнетик и металл—спиновая жидкость. Фазовый переход в состояние спиновой жидкости происходит при  $U/t = 9.6 \pm 0.2$ , гистерезис в области  $U/t = 8.25 - 9.4 \pm 0.2$  означает фазовый переход I рода в неколлинеарное антиферромагнитное состояние.

На рис. 2.2 обнаруживается существенная разница между результатами DMFT и метода дуальных фермионов в случае спиновой жидкости. Нелокальные корреляции оказываются сильными в этом состоянии. Без учета DFпоправок эта фаза не может быть основным состоянием во всем изученном интервале U и является металлической вплоть до  $U/t < 11.2 \pm 0.2$ . Это согласуется с предыдущими DMFT-расчетами [102]. Первая отличная от нуля поправка к дуальной собственно-энергетической функции (1.158) снижает общую энергию неупорядоченного диэлектрического состояния, делая его наиболее вероятным в области 9.5 < U/t < 13. Дуальные поправки в  $120^{\circ}$  антиферромагнитной фазе малы и не меняют ее энергии. При больших значениях параметра U/t кривые полной энергии неелевского и спиново-жидкостного состояний становятся близкими и не могут быть разделены в рамках статистической погрешности метода. Тем не менее, поскольку дуальные поправки малы при больших значениях U [10] можно ожидать, что кривые энергий DMFT и DF-состояний совпадут, осталяя 120° антиферромагнитное состояние основным.

Рис. 2.3 иллюстрирует образование магнитных моментов в изучаемых фазах с увеличением U/t. Видно, что в диэлектрической области и спиновая жидкость, и 120° антиферромагнитное состояния обладают сформировавшимеся магнитными моментами, отличаясь по построению типом магнитного упорядочения. Включение дуальной поправки (1.158) в случае неупорядоченного состояния существенно ускоряет образование магнетизма в области моттовского перехода. Таким образом, важна роль синглетных корреляций, образующих состояние спиновой жидкости. В случае неколлинеарной антиферро-

магнитной фазы дуальная поправка (1.158) мала, а магнитное упорядочение образуется при меньшем значении U. Это означает, что статическое спиновое упорядочение может быть эффективно описано уже на уровне динамической теории среднего поля.

# 2.4.2. Плотность состояний и нелокальная часть собственно-энергетической функции

Семейство кривых для плотности состояний N(E) сильнокоррелированного металлического состояния изображено на рис. 2.4. Кривые получены при помощи аналитического продолжения температурной функции Грина при помощи метода максимальной энтропии [36, 37]. Такая процедура не позволяет различить особенности спектра, однако воспроизводит его основные свойства и обладает хорошей точностью в области энергий около уровня Ферми. На рис. 2.4 видна типичная для металлической части фазовой диаграммы трехпиковая структура — две хаббардовские зоны и центральный "кондовский" квазичастичный пик [1]. Такая структура наблюдается как для результатов, полученных при помощи динамической теории среднего поля, так и для результатов, полученных методом дуальных фермионов. Есть существенная разница в форме центрального пика. Плотность состояний на уровне Ферми в локальной среднеполевой теории зафиксирована правилом сумм Фриделя, т.е. в металлической части фазовой диаграммы  $N(E_f)$  должно быть равно точно такому же значению, что и для системы свободных электронов (U = 0) [1]. В методе дуальных фермионов правило сумм может не выполняться: нелокальные корреляции уменьшают высоту центрального пика с увеличением U.

Графики плотности состояний спиновой жидкости и 120° антиферромагнитного состояния изображены на рис. 2.5. Спектральная щель в случае спи-

75

новой жидкости шире, чем аналогичная щель неелевской фазы. Это соответствует RVB-картине диэлектрического основного состояния без дальнего магнитного порядка как жидкости, сформированной локальными синглетами [56]. Действительно, спектр такого состояния должен быть унаследован от спектра синглета - изолированного кластера, состоящего из двух спинов. Чтобы подчеркнуть это утверждение, на рис. 2.5 черными линиями изображен спектр такого кластера с тем же значением t. Из вкладки к рис. 2.5 можно сделать вывод, что нелокальные поправки к собственно энергетической функции между ближайшими соседями решетки в случае спиновой жидкости намного больше, чем для неелевского состояния и именно они определяют низкочастотный энергетический спектр. Это говорит о важности нелокальных динамических флуктуаций в случае спиновой жидкости. Для неелевской фазы, напротив, нелокальность состоит в статическом магнитном упорядочении и потому эффективно описывается уже в рамках динамической теории среднего поля. Это соответствует выводам к рис. 2.2 и 2.3.

#### 2.5. Обсуждение

Поправки к собственно-энергетической функции, полученные при помощи метода дуальных фермионов существенны при промежуточных значениях параметра U/t, который по порядку величины равен ширине зоны. График, полученный при учете только первой ненулевой диаграммы, соответствует представлению о спиновой жидкости как состояния, которое может наблюдаться в конечном интервале параметра U/t. Металлическое состояние при этом наблюдается при меньших значениях U, а 120° антиферромагнитная диэлектрическая фаза — при больших. Это соответствует известным литературным данным [98, 101, 106]. Существует расхождение в значениях  $U_c$  оба полученных значения являются переоцененными. При получении вышеизложенных результатов были сделаны некоторые предположения и допущения. Они должны быть обсуждены в контексте фазовой диаграммы исследуемой модели. Основные допущения состоят в конечности температуры и учете только первой ненулевой дуальной поправки.

На рисунке 2.3 показано, что включение синглетных поправок существенно влияет на формирование магнетизма - дуальные поправки существенно понижают критическое значение U. Расчеты были сделаны используя только первую диаграмму, и, ожидается, что последующие поправки будут сдвигать величину  $U_{c1}$  в сторону еще меньших значений. Это проиллюстрировано штриховой линией на рис. 2.2. Предполагается, что основное состояние спиновой жидкости будет продолжено в область меньших U по сравнению с текущим значением  $U_{c1} = 9.6$ , и 120° антиферромагнитное состояние появится после спиновой жидкости. Для количественного описания фазовой диаграммы необходимо включить ряд диаграмм, таких как лестничные, которые могут привести к формированию связных синглетных состояний [73].

Верхняя граница фазы спиновой жидкости  $U_{c2} \geq 14$  выглядит переоцененной из-за конечности температуры. Действительно, тепловые флуктуации всегда уничтожают магнитное упорядочение. Наиболее ярким примером является наполовину заполненная решетка Хаббарда, где упорядоченное основное состояние реализуется при любых (даже бесконечно малых) U, из-за perfect nesting - резонансного положения поверхности Ферми в первой зоне Бриллюэна. Однако расчеты методом динамической теории среднего поля при относительно небольшой температуре  $\beta = 20$  показывают разрушение локальными флуктуациями магнитного состояния при  $U \leq 1$  [72]. Говоря об энергетической зависимости, представленной на 2.2, ожидается, что понижение температуры должно сдвинуть энергию 120° антиферромагнитного состояния вниз.

77



Рис. 2.2. Зависимость полной энергии от параметра U при  $\beta t = 10$ . Были получены различные кривые для фазовых переходов металл-спиновая жидкость и металл-неколлинеарный неелевский диэлектрик. Спиновая жидкость обладает меньшей энергией в интервале 9.5 < U/t < 13. При больших значениях U энергии диэлектрических состояний становятся близкими. Фазовый переход из металлического в состояние спиновой жидкости происходит при  $U/t \approx 9.6 \pm 0.2$ , значение критического U/t для моттовского перехода в 120° неелевское состояние принадлежит интервалу  $8.25 - 9.4 \pm 0.2$ . Штрихованная линия соответствует монотонной интерполяции кривой для энергии спиново-жидкостного состояния.



Рис. 2.3. Зависимость среднего квадрата магнитного момента одного узла решетки от хаббардовского U при  $\beta t = 10$ . С увеличением U формирование магнитных моментов происходит вначале для 120° антиферромагнитного состояния при  $U/t = 8.25 - 9.4 \pm 0.2$ . Гистерезис на кривой для этого состояния означает фазовый переход I рода. Формирование магнитных моментов в спиново-жидкостном состоянии происходит при критическом U моттовского перехода  $U = 9.6 \pm 0.2$ .



Рис. 2.4. Плотность состояний N(E) металлической фазы при  $\beta t = 10$  и U/t = 8.0, 8.4, 8.56. Верхняя часть графика соответствует решению, полученному при помощи метода дуальных фермионов, нижняя часть получена в рамках динамической теории среднего поля.



Рис. 2.5. Плотность состояний N(E) диэлектрической фазы при  $\beta t = 15$  и U/t = 11.2 спиново-жидкостного и неколлинеарного антиферромагнитного состояний. Спектр 2х-атомного синглета с теми же значениями U и t изображен черными вертикальными прямыми. Серые прямые обозначают значение  $\pm U/2$ . На вкладке изображен график зависимости действительной части собственно-энергетической функции от значения мацубаровских частот для случая спиновой жидкости (черная кривая). Аналогичная величина для неколлинеарного антиферромагнитного состояния (красная кривая) пренебрежимо мала, а нелокальная часть собственно-энергетической функции в динамической теории среднего поля всегда равна нулю.

### Глава З

## Роль вращательной симметрии в магнетизме многозонной модели Хаббарда

В данной главе исследуется роль многоорбитальной структуры валентной оболочки систем с сильными электронными корреляциями в определении характеристик фазового перехода металл-изолятор. При помощи расчета статической магнитной восприимчивости показано, что учет полной матрицы кулоновского взаимодействия приводит к понижению температуры перехода фазового перехода из парамагнитного в упорядоченное состояние. Трехкратное вырождение основного состояния двухорбитальной модели Хаббарда приводит к появлению при конечной температуре Кондо-пика в плотности состояний, а также к увеличению значения критического U, что согласуется с данными, полученными методом численной ренормализационной группы (NRG) для случая нулевой температуры [107].

### 3.1. Многоорбитальные эффекты в системах с сильными электронными корреляциями

Эффекты, связанные с орбитальными флуктуациями, играют важную роль в физике систем с сильными электронными корреляциями. Наличие дополнительных степеней свободы валентных электронов приводит к появлению новых механизмов ферромагнетизма - сложного упорядочения одновременно спина и орбитального момента валентных электронов [9]. Варьирование плотности состояний или чисел заполнения валентных электронов в зависимости от проекции орбитального момента приводит к образованию нового типа квантового фазового перехода - орбитально зависящего моттов-

82

ского перехода (Orbital selective Mott transition) [108]. Такой тип фазового перехода был теоретически исследован [109] и экспериментально обнаружен в  $Ca_{2-x}RuO_4$  [110] и  $La_{n+1}Ni_nO_{3n+1}$  [111].

Учет полной матрицы кулоновского взаимодействия необходим для количественного описания свойств систем с сильными электронными корреляциями. Существовавшие до недавнего времени алгоритмы расчета примесной задачи динамической теории среднего поля [1] могли рассматривать только взаимодействия вида плотность-плотность, имеющие *диагональный* вид в пространстве кубических гармоник. LDA-DMFT расчеты, выполненные для взаимодействия типа плотность-плотность, приводят к завышению температуры Кюри железа [62] и различных манганитов [112] в 1.5-2 раза. Учет недиагональных матричных элементов в общем случае приводил к экспоненциальному увеличению времени расчета [113]. Появление алгоритмов метода квантового Монте-Карло в непрерывном времени позволило решить эту проблему [43]. Учет полного многоорбитального характера единичной примеси на металлической поверхности приводит к сдвигу кондовского пика в плотности состояний примеси [114] и подавлению такого пика для  $Sr_2RuO_4$  [115, 116].

Многозонная (двух- или трехзонная) модель Хаббарда в базисе кубических гармоник имеет вид:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} (\hat{c}^{+}_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}^{+}_{j\sigma} \hat{c}_{i\sigma}) - \mu \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + \sum_{i} \hat{H}^{\text{int}}_{i}$$
(3.1)

$$\hat{H}^{\text{int}} = \frac{U}{2} \sum_{\alpha\sigma} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha\bar{\sigma}} + \frac{U - 2J}{2} \sum_{\alpha\neq\alpha',\sigma} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha'\bar{\sigma}} + \frac{U - 3J}{2} \sum_{\alpha\neq\alpha',\sigma} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha'\sigma} - \frac{J}{2} \sum_{\alpha\neq\alpha',\sigma} (c^{\dagger}_{\alpha\sigma} c^{\dagger}_{\alpha'\bar{\sigma}} c_{\alpha'\sigma} c_{\alpha\bar{\sigma}} + c^{\dagger}_{\alpha'\sigma} c^{\dagger}_{\alpha'\bar{\sigma}} c_{\alpha\sigma} c_{\alpha\bar{\sigma}}). \quad (3.2)$$

Индексы  $\alpha, \alpha'$  пробегают номер гармоники,  $\sigma$  означает проекцию спина. Первые 3 члена в формуле (3.2) описывают взаимодействие типа плотность-плотность. Собственные состояния двухорбитальной модели (3.2) изображены в таблице 3.1. Недиагональный вклад от последних двух членов в формуле (3.2) существенно меняет свойства матрицы кулоновского взаимодействия: в случае полного гамильтониана, обладающего вращательной симметрией, основное состояние полузаполненной двухорбитальной модели является трехкратно вырожденным спиновым триплетом, тогда как в случае взаимодействия вида плотность-плотность в основном состоянии присутствуют только два состояния с коллинеарным направлением спинов. В результате в плотности состояний, найденной при помощи метода численной ренормализационной группы, при нулевой температуре в первом случае обнаруживается Кондоник, тогда как во втором случае такого пика нет [107].

Использование квантового метода Монте-Карло позволяет исследовать как одноэлектронные свойства системы, так и ее термодинамические характеристики. В данной работе изучается влияние типа матрицы кулоновского взаимодействия в двух- и трехорбитальной моделей Хаббарда на температуру и величину критического U перехода из парамагнитного в упорядоченное магнитное состояние, а также исследуется электронная плотность состояний с обеих сторон фазового перехода. Для того, чтобы разделить роль эффектов многоорбитальности и нелокальности, исследование проведено на решетке Бете бесконечной размерности. В этом случае, нелокальные корреляции отсутствуют, и решение, полученное в рамках динамической теории среднего поля, является точным [58].

### 3.2. Динамическая теория среднего поля на многоорбитальной решетке Бете

В рамках динамической теории среднего поля в лагранжево действие системы вводится эффективное поле, действующее на каждый узел решетки, которое определяется самосогласованно. Эффективное одноузельное действие имеет вид примесной модели Андерсона (1.86):

$$S^{\rm imp} = \sum_{\omega} (\Delta_{\omega\sigma} - i\omega - \mu) c^*_{\omega\sigma} c_{\omega\sigma} - \sum_{\omega} m H(n_{\uparrow\omega} - n_{\downarrow\omega}) + \int_0^\beta d\tau H^{\rm int}[c, c^*], \quad (3.3)$$

где  $\Delta_{\omega\sigma}$  - эффективное поле,  $\omega$  - мацубаровская частота,  $\mu$  - химический потенциал,  $m = \mu_B g$  - магнитный момент электрона, принятый равным 1 ( $\mu_B$  магнетон Бора, g - спиновый g-фактор электрона), H - внешнее статическое магнитное поле. Химический потенциал, соответствующий одинаковому заполнению электронов и дырок, равен  $\mu = 1.5U - 2.5J$  для двухорбитальной и  $\mu = 2.5U - 5J$  для трехорбитальной моделей. Примесная модель Андерсона решалась при помощи квантового метода Монте-Карло, действующего в непрерывном времени с разложением по величине кулоновского взаимодействия (алгоритм CT-INT, изложенный в §1.2.5 первой главы или в работе [11]). Этот метод обладает слабым шумом при больших значениях мацубаровских частот, что позволяет аккуратно проводить фурье-преобразование и получать термодинамические характеристики. Для учета недиагональных элементов использовался кластерный тип шагов, который добавляет возможность добавления и уничтожения сразу пары частиц. Это делает возможным учет членов  $c_1c_2^*c_3c_4^*$  общего вида [114].

Условие самосогласования динамической теории среднего поля на такой решетке имеет вид:

$$\Delta_{\omega\sigma} = t^2 g_{\omega\overline{\sigma}},$$

где для изучения антиферромагнитного упорядочения на решетке может быть введена спиновая поляризация в эффективном поле  $\sigma \neq \overline{\sigma}$ . Для каждого набора параметров  $(U, t, \beta, H)$  функция Грина определялась итеративно численным решением модели (3.3) и подстановкой в (3.2). Сходимость схемы наблюдалась после  $\approx 5$  итераций, всего для каждого набора параметров проводилось 10 итераций. Статическая магнитная восприимчивость определяется при помощи варьирования системы слабым внешним магнитным полем (mH < 0.08):

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_{H \to 0} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \langle n_{\uparrow} - n_{\downarrow} \rangle}{\partial H} \Big|_{H \to 0}$$
(3.4)

Температура перехода определялась из интерполяции линейного участка температурной зависимости обратной статической магнитной восприимчивости:

$$\chi = \frac{\langle m^2 \rangle}{3(T - T_c)} \tag{3.5}$$

В рамках среднеполевого метода такой подход не приводит к ошибке в определении температуры перехода.

#### 3.3. Результаты

В начале рассмотрен случай  $\Delta_{\omega\sigma}=0$  одиночного атома, описываемого гамильтонианом (3.2). Термодинамические характеристики такой системы можно получить, не прибегая к квантовому методу Монте-Карло, а используя точную диагонализацию гамильтоновой проблемы. На рис. 3.1 изображено семейство кривых обратной магнитной восприимчивости  $\chi^{-1}(T)$  одиночного атома для разных размерностей валентной орбитали (N = 1, 2, 3) при U/t = 3.6, J = t. Кривые состоят из двух линейных участков вида  $\chi = \frac{C}{T}$ . В низкотемпературной области  $U \gg T$  значение константы Кюри C зависит от степени вырождения триплетного основного состояния, которое определяется правилом Хунда. Для случая инвариантной относительно операций поворота U-матрицы (3.2) константа Кюри имеет вид:  $C = \mathbf{S}(\mathbf{S}+1)/3 = N(N/2+1)/6$ [117]. В высокотемпературной области в обоих случаях  $C_{T\gg U} = C_{T\ll U}^{\text{full}}/2$ , что соответствует [5]. Необходимо отметить изменение константы Кюри в низкотемпературной области, которое происходит при учете только диагональных членов матрицы кулоновского взаимодействия: с 0.66 до 0.94 (42%) в двухорбитальном случае, с 1.25 до 2.21 (78%) в трехорбитальном случае. На рис.

3.2 приведены результаты сравнительных тестовых QMC расчетов функции Грина для одиночного атома, которые показали хорошее совпадение с результатами точной диагонализации.

На рис. 3.3 представлена зависимость обратной магнитной восприимчивости двухзонной модели Хаббарда на решетке Бете от температуры при U/t = 4, J = t для случаев учета полной матрицы кулоновского взаимодействия и только ее диагональной части. Фазовый переход в обоих случаях происходит при величине температуры 0.4 - 0.5. При повышении температуры статическая магнитная восприимчивость системы в парамагнитной области принимает вид закона Кюри-Вейсса. Поправка к температуре Нееля от учета полной матрицы взаимодействия в обоих случаях составляет  $\approx 15\%$ .

Существенное отличие в поведении кривых намагниченности обнаруживается в изучаемой модели вдали от полузаполнения. На рис. 3.4 исследован случай U/t = 8, J = 1.2t при заполнении n = 1 в двухорбитальной и n = 2в трехорбитальной моделях. В случае заполнения n = 1 среднее значение недиагональных операторов парного переброса и парного переворота спинов (последних двух членов в формуле (3.2)) оказывается равным 0, и кривые намагниченности в обоих исследуемых случаях совпадают. В случае n = 2при тех же параметрах в трехзонной модели указанные два процесса являются эффективными, что приводит к уменьшению температуры перехода в два раза.

На рис. 3.5 изображено семейство плотностей состояний в двухзонной модели при  $\beta t = 5, J = U/4$ . Обнаружено, что учет полной матрицы взаимодействия приводит к повышению критического U, а фазовый переход происходит с образованием центрального кондовского пика в плотности состояний. В случае гамильтониана с матрицей взаимодействия вида плотность-плотность такого пика нет.

Обнаруженный эффект понижения критической температуры аналоги-

чен изменению критических параметров в модели Изинга при добавлении слагаемых гейзенберговского типа. Разница между полученными температурами перехода в антиферромагнитное состояние при полузаполнении для решетки Бете, равная  $\sim 15\%$ , меньше, чем аналогичная ошибка в 1.5-2 раза в работах [62, 112], и столь существенное отклонение от экспериментально найденного значения связано с нелокальными корреляциями, вызванными решеткой. Однако при изменении заполнения системы вклад от взаимодействия вида плотность-плотность оказывается не столь доминирующим, что делает учет недиагональных компонент матрицы кулоновского взаимодействия необходимым. Отметим, что в работе [113] добавление недиагональных членов в матрицу взаимодействия в рамках алгоритма Хирша-Фая при заполнении n = 1.25 в двухорбитальной модели Хаббарда приводит к смене знака температуры Кюри, т.е. к разрушению ферромагнитного состояния. Рассмотренный эффект будет наиболее заметным в случае рассмотрения полной пятиорбитальной валентной *d*-оболочки, количество вариантов заполнения которой является большим по сравнению с рассмотренными случаями двухи трехорбитальной моделей. Рассмотрение таких задач является доступным для современных *QMC*-алгоритмов [55, 114].

N	E	S	Собственные векторы
0	0	0	$\ket{0}\ket{0}$
1	$-\mu$	1/2	$\left \uparrow ight angle\left.\left 0 ight angle,\left \downarrow ight angle\left 0 ight angle,\left 0 ight angle\left \uparrow ight angle,\left 0 ight angle\left \downarrow ight angle$
2	$-2\mu + U - 3J$	1	$\left \uparrow\right\rangle\left \uparrow\right\rangle,rac{1}{\sqrt{2}}(\left \uparrow\right\rangle\left \downarrow\right\rangle+\left \downarrow\right\rangle\left \uparrow\right\rangle),\left \downarrow\right\rangle\left \downarrow\right\rangle$
2	$-2\mu + U - J$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\left \uparrow\right\rangle\left \downarrow\right\rangle-\left \downarrow\right\rangle\left \uparrow\right\rangle),\frac{1}{\sqrt{2}}(\left \uparrow\downarrow\right\rangle\left 0\right\rangle-\left 0\right\rangle\left \uparrow\downarrow\right\rangle)$
2	$-2\mu + U + J$	0	$rac{1}{\sqrt{2}}(\left \uparrow\downarrow ight angle \left 0 ight angle + \left 0 ight angle \left \uparrow\downarrow ight angle )$
3	$-3\mu + 3U - 5J$	1/2	$\left \uparrow\downarrow\right\rangle\left \uparrow\right\rangle,\left \uparrow\downarrow\right\rangle\left \downarrow\right\rangle,\left \uparrow\right\rangle\left \uparrow\downarrow\right\rangle,\left \downarrow\right\rangle\left \uparrow\downarrow\right\rangle$
4	$-4\mu + 6U - 10J$	0	$\left \uparrow\downarrow ight angle\left \uparrow\downarrow ight angle$

Полный гамильтониан взаимодействия:

Гамильтониан взаимодействия плотность-плотность:

N	E	S	Собственные векторы
0	0	0	$ 0\rangle  0\rangle$
1	$-\mu$	1/2	$\left \uparrow ight angle\left.\left 0 ight angle,\left \downarrow ight angle\left 0 ight angle,\left 0 ight angle\left \uparrow ight angle,\left 0 ight angle\left \downarrow ight angle$
2	$-2\mu + U - 3J$	1	$\left \uparrow ight angle \left \uparrow ight angle \left,\left \downarrow ight angle \left \downarrow ight angle$
2	$-2\mu + U - 2J$	0	$\left  \uparrow  ight angle \left  \downarrow  ight angle \left  \downarrow  ight angle \left  \uparrow  ight angle$
2	$-2\mu + U$	0	$\left \uparrow\downarrow ight angle\left.\left 0 ight angle\left.\left \uparrow\downarrow ight angle ight angle ight angle$
3	$-3\mu + 3U - 5J$	1/2	$\left \uparrow\downarrow ight angle$ , $\left \uparrow\downarrow ight angle$ , $\left \uparrow ight angle$ , $\left \downarrow ight angle$ , $\left \downarrow ight angle$ , $\left \downarrow ight angle$
4	$-4\mu + 6U - 10J$	0	$ \uparrow\downarrow\rangle  \uparrow\downarrow\rangle$

Таблица 3.1. Собственные состояния одиночного двухорбитального хаббардовского атома. В таблицах выделено основное состояние при наличие полузаполнения при U > 0, J > 0.



Рис. 3.1. Графики зависимости обратной магнитной восприимчивости  $\chi^{-1}(T)$  одиночного хаббардовского атома, описываемого (3.2) при U = 3.6, J = 1, для разных размерностей валентной орбитали (1,2,3). Константы Кюри C определяются углом наклона прямых в области T < 0.6 к оси  $\chi^{-1} = 0$ . Полученные значения:  $C_{N=1} = 0.25, C_{N=2}^{\text{full}} = 0.66,$  $C_{N=2}^{\text{nn}} = 0.94, C_{N=3}^{\text{full}} = 1.25, C_{N=3}^{\text{nn}} = 2.21$ 



Рис. 3.2. График зависимости мнимой части функции Грина от значения мацубаровской частоты, рассчитанные при помощи методов точной диагонализации и квантового метода Монте-Карло для двух- и трехорбитального одиночного хаббардовского атома для  $\beta = 1, U = 3, J = 0.8$ . На врезке изображена разница между кривыми.



Рис. 3.3. График зависимости обратной магнитной восприимчивости  $\chi^{-1}(T)$  от температуры для двух- и трехорбитальной модели Хаббарда на решетке Бете при U/t = 4, J = t. Пунктирные прямые - интерполяция линейных участков обеих кривых в металлической области. Температура Нееля определяется точкой пересечения этих прямых с осью  $\chi^{-1}(T) = 0$  и для двухорбитальной модели равна  $T_{N=2}^{\text{full}} = 0.43$  в случае полной U-матрицы и  $T_{N=2}^{\text{nn}} = 0.49$  в случае взаимодействия плотность-плотность. В трехорбитальном случае полученные значения температур Нееля составляют  $T_{N=3}^{\text{full}} = 0.83$  и  $T_{N=3}^{\text{nn}} = 0.7$ .



Рис. 3.4. Графики зависимостей обратной магнитной восприимчивости  $\chi^{-1}(T)$  от температуры для двух- и трехорбитальной моделей Хаббарда на решетке Бете при U/t = 8, J =1.2t при заполнении n = 1 и n = 2 соответственно. Для случая n = 1 температуры Нееля и константа Кюри в случае полной матрицы взаимодействия и взаимодействия вида плотность-плотность совпадают, тогда как в трехорбитальной модели при n = 2 полученные температуры перехода различаются в два раза.



Рис. 3.5. Семейство графиков плотности состояний двухорбитальной модели Хаббарда на бесконечномерной решетке Бете при  $\beta t = 5$  при полузаполнении n = 2 для полной матрицы взаимодействия (сверху) и взаимодействия плотность-плотность(внизу).

### Заключение

Основные выводы и научные результаты диссертационной работы можно сформулировать следующим образом:

- Исследована роль нелокальных корреляций в определении фазовой диаграммы модели Хаббарда на треугольной решетке. Исследование проводилось численно, методом дуальных фермионов. Установлено, что при температуре T = 0.1t учет динамических синглетных корреляций существенно понижает энергию изоляторного состояния без дальнего магнитного порядка и не изменяет энергию антиферромагнитного состояния.
- 2. Обнаружена область 9.6 < U/t < 14 параметров модели Хаббарда на треугольной решетке при полузаполнении, в которой неколлинеарный антиферромагнитный порядок разрушается при температуре T = 0.1t, в результате чего образуется фаза без дальнего магнитного упорядочения — спиновая жидкость. Данная фаза характеризуется наличием локализованного магнитного момента и обладает меньшей полной энергией, чем металлическое и антиферромагнитное состояния.
- Показано, что спектральная функция спиновой жидкости при температуре T = 0.067t имеет синглетный характер, что делает ее энергетическую щель шире, чем в антиферромагнитном случае.
- 4. Исследована зависимость магнитной восприимчивости от температуры в двухорбитальной и трехорбитальной модели Хаббарда на решетке Бете с помощью динамической теории среднего поля. Обнаружено, что при U/t = 4, J = t при полузаполнении в случае наличия вращательной симметрии примесного гамильтониана температура Нееля понижается

на ~ 15% по сравнению со случаем гамильтониана взаимодействия вида плотность-плотность. При U/t = 8, J = 1.2t в трехорбитальной модели при заполнении n = 2 аналогичное отличие температур перехода является двукратным, а в двухорбитальной модели при заполнении n = 1 температуры перехода в обоих случаях совпадают.

- 5. Установлено, что в двухорбитальной модели Хаббарда различная степень вырождения основного состояния полного гамильтониана и гамильтониана с взаимодействием плотность-плотность приводит к принципиальному различию в характере металлических фаз: в первом случае в плотности состояний одночастичных возбуждений в двухорбитальной модели Хаббарда при полузаполнении присутствует центральный «кондовский» пик, во втором такого пика нет.
- 6. Показано, что при βt = 5 учет недиагональных членов в гамильтониане взаимодействия в двухорбитальной модели Хаббарда при полузаполнении приводит к повышению экспериментально наблюдаемой величины критического хаббардовского U, при котором происходит фазовый переход Мотт-Хаббарда.

### Приложение А

# Гамильтониан многоорбитальной атомной задачи в представлении вторичного квантования

Гамильтониан многоорбитальной электронной системы в представлении вторичного квантования:

$$\hat{H} = -\sum_{\langle ij\rangle\sigma} t_{ij} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ijkl\\\sigma\sigma'}} U^{\sigma\sigma'}_{ijkl} c^{\dagger}_{i\sigma} c^{\dagger}_{j\sigma'} c_{k\sigma'} c_{l\sigma}$$
(A.1)

В простейшем случае орбитальные индексы i, j, k, l в квартичной части гамильтониана относятся к электронам на одном и том же атоме и с одним и тем же орбительным моментом L, но разными его проекциями на ось квантования:

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_1' m_2' m_1 m_2 \\ \sigma \sigma'}} U_{m_1' m_2' m_1 m_2}^{\sigma \sigma'} c_{m_1' \sigma}^{\dagger} c_{m_2' \sigma'}^{\dagger} c_{m_1 \sigma'} c_{m_2 \sigma}$$
(A.2)

Компоненты тензора  $U_{m'_1m'_2m_1m_2}^{\sigma\sigma'}$  определяются матричными элементами оператора кулоновского взаимодействия между двухчастичными волновыми функциями.

$$U_{m_1'm_2'm_1m_2}^{\sigma\sigma'} = \left\langle \sigma lm_1'; \sigma' lm_2' \left| \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}'|} \right| \sigma lm_2; \sigma' lm_1 \right\rangle$$
(A.3)

Одночастичная атомная ВФ электрона:

$$\psi_{\sigma lm}(\mathbf{r},s) = \chi_{\sigma}(s)\varphi_l(r)Y_{lm}(\Omega), \quad \Omega = (\theta,\phi), \quad d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$$
(A.4)

Для вычисления матричных элементов удобно пользоваться известным

разложением кулоновского потенциала:

$$\frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = e^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2k+1} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \sum_{q=-k}^k Y_{kq}^*(\Omega) Y_{kq}(\Omega'),$$
$$r_{>} = \max\{|\mathbf{r}|, |\mathbf{r}'|\}, \ r_{<} = \min\{|\mathbf{r}|, |\mathbf{r}'|\} \quad (A.5)$$

Запишем матричный элемент в явном виде:

$$\left\langle \sigma lm_{1}^{\prime}; \sigma^{\prime} lm_{2}^{\prime} \left| \frac{e^{2}}{|\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}^{\prime}|} \right| \sigma lm_{2}; \sigma^{\prime} lm_{1} \right\rangle =$$

$$= \sum_{ss^{\prime}} \int d^{3}\mathbf{r} \ d^{3}\mathbf{r}^{\prime} (\psi_{\sigma lm_{1}^{\prime}}(\mathbf{r}, s)\psi_{\sigma^{\prime} lm_{2}^{\prime}}(\mathbf{r}^{\prime}, s^{\prime}))^{*} \frac{e^{2}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}^{\prime}|} (\psi_{\sigma lm_{2}}(\mathbf{r}, s)\psi_{\sigma^{\prime} lm_{1}}(\mathbf{r}^{\prime}, s^{\prime})) =$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} e^{2} \iint_{0}^{+\infty} r^{2} dr \ r^{\prime 2} dr^{\prime} |\varphi_{l}(r)|^{2} |\varphi_{l}(r^{\prime})|^{2} \frac{r_{<}^{k}}{r_{>}^{k+1}} \ A_{k}(m_{1}^{\prime}, m_{2}^{\prime}, m_{2}, m_{1}) =$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} F^{k} A_{k}(m_{1}^{\prime}, m_{2}^{\prime}, m_{2}, m_{1}) \ (A.6)$$

 $F^k$  — радиальная часть матричного элемента. Её конкретное значение зависит от выбора  $\varphi_l(r)$ , т.е. в известной степени произвольно.  $A_k$  — угловая часть матричного элемента.

$$A_{k}(m'_{1}, m'_{2}, m_{2}, m_{1}) = \frac{4\pi}{2k+1} \sum_{q=-k}^{k} \iint d\Omega \ d\Omega' Y_{lm'_{1}}^{*}(\Omega) Y_{lm'_{2}}^{*}(\Omega') Y_{kq}^{*}(\Omega) Y_{kq}(\Omega') Y_{lm_{2}}(\Omega) Y_{lm_{1}}(\Omega') \quad (A.7)$$

В последнем выражении избавимся от комплексного сопряжения, используя тождество  $Y_{lm}^*(\Omega) = (-1)^m Y_{l-m}(\Omega)$ :

$$A_{k}(m'_{1}, m'_{2}, m_{2}, m_{1}) = \frac{4\pi}{2k+1} \times \sum_{q=-k}^{k} (-1)^{m'_{1}+q+m'_{2}} \iint d\Omega \ d\Omega' Y_{l-m'_{1}}(\Omega) Y_{l-m'_{2}}(\Omega') Y_{k-q}(\Omega) Y_{kq}(\Omega') Y_{lm_{2}}(\Omega) Y_{lm_{1}}(\Omega')$$
(A.8)

Далее используем формулу сложения 3 сферических гармоник (сложение моментов):

$$\int Y_{l_1m_1}(\Omega)Y_{l_2m_2}(\Omega)Y_{l_3m_3}(\Omega) \ d\Omega = = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$
(A.9)

Окончательно для  $A_k$  получаем:

$$A_{k}(m'_{1}, m'_{2}, m_{2}, m_{1}) =$$

$$= (2l+1)^{2} \begin{pmatrix} l & k & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{2} \sum_{q=-k}^{k} (-1)^{m'_{1}+q+m'_{2}} \begin{pmatrix} l & k & l \\ -m'_{1} & -q & m_{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & k & l \\ -m'_{2} & q & m_{1} \end{pmatrix}$$
(A.10)

Вычислим ненулевые матричные элементы для конкретных значений *l*.

S-орбиталь - l = 0

$$A_0(0,0,0,0) = 1 \tag{A.11}$$

$$\hat{H}_{int} = U n_{\uparrow} n_{\downarrow}, \qquad U \equiv F^{\mathbf{0}} \tag{A.12}$$

Р-орбиталь - l = 1

$$A_0(m_2, m_1, m_2, m_1) = 1 \tag{A.13}$$

$$A_2(m, 0, m, 0) = A_2(0, m, 0, m) = -2/25 \ (m = \pm 1)$$
(A.14)

$$A_2(m, 0, 0, m) = A_2(0, m, m, 0) =$$
  
=  $-A_2(0, 0, m, -m) = -A_2(m, -m, 0, 0) = 3/25 \ (m = \pm 1) \ (A.15)$ 

$$A_2(m, -m, -m, m) = 6A_2(m, -m, m, -m) = 6/25 \ (m = \pm 1)$$
(A.16)

$$A_2(0,0,0,0) = 4A_2(-1,-1,-1,-1) = 4A_2(1,1,1,1) = 4/25$$
 (A.17)

$$\hat{H}_{int} = \frac{F^{0} - F^{2}/5}{2} \sum_{m \neq m',\sigma} n_{m\sigma} n_{m'\sigma} + \frac{F^{0}}{2} \sum_{mm',\sigma} n_{m\sigma} n_{m'\bar{\sigma}} + \frac{1}{2} \frac{F^{2}}{25} \sum_{mm',\sigma} W^{(1)}_{mm'} n_{m,\sigma} n_{m',\bar{\sigma}} + \frac{1}{2} \frac{F^{2}}{25} \sum_{mm',\sigma} W^{(3)}_{mm'} c^{\dagger}_{m\sigma} c^{\dagger}_{-m\bar{\sigma}} c_{m'\bar{\sigma}} c_{-m'\sigma} \quad (A.18)$$

$$W^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \quad W^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 6 \\ 3 & 0 & 3 \\ 6 & 3 & 0 \end{pmatrix} \quad W^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & -3 & 0 \\ -3 & 0 & -3 \\ 0 & -3 & 0 \\ 0 & -3 & 0 \end{pmatrix} \quad (A.19)$$

В случае р-орбиталей (l = 1) помимо базиса сферических гармоник  $Y_{lm}(\Omega)$  для представления угловой части ВФ можно использовать ещё один базис, состоящий из трех функций (кубические гармоники):

$$Y_{1x}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{11}(\Omega) - Y_{1-1}(\Omega))$$
$$Y_{1y}(\Omega) = \frac{1}{i\sqrt{2}} (Y_{11}(\Omega) + Y_{1-1}(\Omega))$$
$$Y_{1z}(\Omega) = Y_{10}(\Omega)$$

Эти функции являются СФ операторов  $\hat{l}_x$ ,  $\hat{l}_y$  и  $\hat{l}_z$  соответственно, отвечающими нулевым собственным значениям.

Гамильтониан взаимодействия в этом базисе можно получить, используя известные формулы, связывающие операторы  $c^{\dagger}_{m\sigma}$ ,  $c_{m\sigma}$  с операторами  $c^{\dagger}_{\alpha\sigma}$ ,  $c_{\alpha\sigma}$ 

 $(\alpha = x, y, z)$ :

$$c_{m\sigma}^{\dagger} = \sum_{\alpha} \langle Y_{1\alpha} | Y_{1m} \rangle c_{\alpha\sigma}^{\dagger}$$
$$c_{m\sigma} = \sum_{\alpha} \langle Y_{1\alpha} | Y_{1m} \rangle^* c_{\alpha\sigma}$$

$$\hat{H}_{int} = \frac{U}{2} \sum_{\alpha\sigma} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha\bar{\sigma}} + \frac{U - 2J}{2} \sum_{\alpha\neq\alpha',\sigma} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha'\bar{\sigma}} + \frac{U - 3J}{2} \sum_{\alpha\neq\alpha',\sigma} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha'\sigma} - \frac{J}{2} \sum_{\alpha\neq\alpha',\sigma} (c^{\dagger}_{\alpha\sigma} c^{\dagger}_{\alpha'\bar{\sigma}} c_{\alpha'\sigma} c_{\alpha\bar{\sigma}} + c^{\dagger}_{\alpha'\sigma} c^{\dagger}_{\alpha'\bar{\sigma}} c_{\alpha\sigma} c_{\alpha\bar{\sigma}}) \quad (A.20)$$

$$U \equiv F^{0} + \frac{4F^{2}}{25}, \quad J \equiv \frac{3F^{2}}{25}$$
 (A.21)

Последнее выражение можно переписать в несколько ином виде, выделив явно выражения вида  $n_{\alpha\sigma} - 1/2$ . Это полезно при сопоставлении действия данному Гамильтониану.

$$\hat{H}_{int} = \text{const} + 5\left(\frac{U}{2} - J\right)\sum_{\alpha\sigma}\left(n_{\alpha\sigma} - \frac{1}{2}\right) + \frac{U}{2}\sum_{\alpha\sigma}\left(n_{\alpha\sigma} - \frac{1}{2}\right)\left(n_{\alpha\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}\right) + \frac{U - 2J}{2}\sum_{\alpha\neq\alpha',\sigma}\left(n_{\alpha\sigma} - \frac{1}{2}\right)\left(n_{\alpha'\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}\right) + \frac{U - 3J}{2}\sum_{\alpha\neq\alpha',\sigma}\left(n_{\alpha\sigma} - \frac{1}{2}\right)\left(n_{\alpha'\sigma} - \frac{1}{2}\right) - \frac{J}{2}\sum_{\alpha\neq\alpha',\sigma}\left(c_{\alpha\sigma}^{\dagger}c_{\alpha'\bar{\sigma}}^{\dagger}c_{\alpha'\sigma}c_{\alpha\bar{\sigma}} + c_{\alpha'\sigma}^{\dagger}c_{\alpha'\bar{\sigma}}^{\dagger}c_{\alpha\sigma}c_{\alpha\bar{\sigma}}\right)$$
(A.22)

Существует ещё одна компактная форма представления данного гамильтониана - как функции интегралов движения:

$$\hat{H}_{int} = \left(4J - \frac{U}{2}\right)\hat{N} + (U - 3J)\frac{\hat{N}^2}{2} - J\left[2\hat{S}^2 + \frac{\hat{L}^2}{2}\right]$$
(A.23)

Данная форма не только удобна для проведения аналитических выкладок, но и позволяет сразу же отыскать все энергетические уровни, исходя только

лишь из классификации собственных состояний гамильтониана по значениям полного орбитального и полного спинового момента системы:

$E_{int} = \left(4J - \frac{U}{2}\right)N + (U - 3J)\frac{N^2}{2} - J\left[2S(S+1) + \frac{L(L+1)}{2}\right]  (A.24)$						
	N	L	S	E	Степень вырождения $g = (2L + 1)(2S + 1)$	
	0	0	0	0	1	
	1	1	1/2	0	6	
	2	2	0	U - J	5	
	2	1	1	U - 3J	9	
	2	0	0	U + 2J	1	
	3	2	1/2	3U - 6J	10	
	3	1	1/2	3U - 4J	6	
	3	0	3/2	3U - 9J	4	
	4	2	0	6U - 11J	5	
	4	1	1	6U - 13J	9	
	4	0	0	6U - 8J	1	
	5	1	1/2	10U - 20J	6	
	6	0	0	15U - 30J	1	

D-орбиталь - l = 2

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= \frac{F^{0}}{2} \sum_{mm',\sigma} n_{m\sigma} n_{m'\bar{\sigma}} + \frac{1}{2} \sum_{m\neq m',\sigma} (F^{0} + \frac{F^{2}}{49} W_{mm'}^{(0)} - \frac{F^{4}}{147} Z_{mm'}^{(0)}) n_{m\sigma} n_{m'\sigma} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{mm',\sigma} (\frac{F^{2}}{49} W_{mm'}^{(1)} + \frac{F^{4}}{441} Z_{mm'}^{(1)}) n_{m,\sigma} n_{m',\bar{\sigma}} + \\ &+ \sum_{m=\pm 1,\sigma} \frac{3}{49} (-F^{2} + F^{4}) (c_{0\sigma}^{\dagger} c_{m\sigma}^{\dagger} c_{-m\sigma} c_{2m\sigma} + c_{m\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma}^{\dagger} c_{2m\sigma} c_{-m\sigma} + \\ &+ c_{-m\sigma}^{\dagger} c_{2m\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} c_{m\sigma} + c_{2m\sigma}^{\dagger} c_{-m\sigma}^{\dagger} c_{m\sigma} c_{0\sigma}) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{mm',\sigma} (\frac{F^{2}}{49} W_{mm'}^{(2)} + \frac{5F^{4}}{441} Z_{mm'}^{(2)}) c_{m\sigma}^{\dagger} c_{m'\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{m\bar{\sigma}} c_{m'\sigma} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{mm',\sigma} (\frac{F^{2}}{49} W_{mm'}^{(3)} + \frac{5F^{4}}{441} Z_{mm'}^{(3)}) c_{m\sigma}^{\dagger} c_{-m\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{-m'\sigma} + \\ &+ \frac{\sqrt{6}}{49} (F^{2} - \frac{5}{9} F^{4}) \sum_{mm',\sigma} W_{mm'}^{(4)} (c_{0\sigma}^{\dagger} c_{m\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{m-m'\sigma} + c_{m\sigma}^{\dagger} c_{0\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{m-m'\bar{\sigma}} c_{m'\sigma} + \\ &+ c_{m'\sigma}^{\dagger} c_{m-m'\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{0\bar{\sigma}} c_{m\sigma} + c_{m-m'\sigma}^{\dagger} c_{m'\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{m\bar{\sigma}} c_{0\sigma} + \\ &+ c_{m'\sigma}^{\dagger} c_{m-m'\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{0\bar{\sigma}} c_{m\sigma} + c_{m-m'\sigma}^{\dagger} c_{m\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{m\bar{\sigma}} c_{0\sigma} + \\ &+ c_{m'\sigma}^{\dagger} c_{m-m'\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{0\bar{\sigma}} c_{m\sigma} + c_{m-m'\sigma}^{\dagger} c_{m\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{m\bar{\sigma}} c_{0\sigma} + \\ &+ c_{m'\sigma}^{\dagger} c_{m-m'\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{m\bar{\sigma}} c_{m\bar{\sigma}} c_{m\bar{\sigma}} c_{m\bar{\sigma}} c_{m\bar{\sigma}} + \\ &+ c_{m'\sigma}^{\dagger} c_{m-m'\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{m\bar{\sigma}} c_{m\bar{\sigma$$

$$W^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & -8 & -8 & -4 & 4 \\ -8 & 0 & 1 & -5 & -2 \\ -8 & 1 & 0 & -8 & -8 \\ -2 & -5 & 1 & 0 & -8 \\ 4 & -4 & -8 & -8 & 0 \end{pmatrix} \qquad Z^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 3 & 13 & 23 \\ 3 & 0 & 18 & 8 & 13 \\ 3 & 18 & 0 & 18 & 3 \\ 13 & 8 & 18 & 0 & 3 \\ 23 & 13 & 3 & 3 & 0 \end{pmatrix}$$
(A.26)  
$$W^{(1)} = \begin{pmatrix} 4 & -2 & -4 & -2 & 4 \\ -2 & 1 & 2 & 1 & -2 \\ -4 & 2 & 4 & 2 & -4 \\ -2 & 1 & 2 & 1 & -2 \\ 4 & -2 & -4 & -2 & 4 \end{pmatrix} \qquad Z^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \\ -4 & 16 & -24 & 16 & -4 \\ 6 & -24 & 36 & -24 & 6 \\ -4 & 16 & -24 & 16 & -4 \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \end{pmatrix}_{(A.27)}$$

$$W^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 6 & 4 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 1 & 6 & 0 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 \\ 0 & 6 & 1 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 4 & 6 & 0 \end{pmatrix} \qquad Z^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 3 & 7 & 14 \\ 1 & 0 & 6 & 8 & 7 \\ 3 & 6 & 0 & 6 & 3 \\ 7 & 8 & 6 & 0 & 1 \\ 14 & 7 & 3 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$
(A.28)  
$$W^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & -6 & 4 & 0 & 0 \\ -6 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 4 & -1 & 0 & -1 & 4 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -6 \\ 0 & 0 & 4 & -6 & 0 \end{pmatrix} \qquad Z^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 3 & -7 & 0 \\ -1 & 0 & -6 & 0 & -7 \\ 3 & -6 & 0 & -6 & 3 \\ -7 & 0 & -6 & 0 & -1 \\ 0 & -7 & 3 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$
(A.29)  
$$W^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$
(A.30)

### Литература

- Kotliar, G., S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, и С.
   A. Marianetti: *Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory*. Reviews of Modern Physics, 78(3):865, 2006. http://link.aps.org/abstract/RMP/v78/p865.
- [2] Georges, Antoine, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, и Marcelo J. Rozenberg: Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. Rev. Mod. Phys., 68(1):13, Jan 1996.
- [3] Gunnarsson, O.: Superconductivity in fullerides. Rev. Mod. Phys., 69(2):575–606, Apr 1997.
- [4] Bednorz, J. G. и K. A. Müller: Possible high Tc superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. Zeitschrift fur Physik B Condensed Matter, 64:189–193, 1986.
- [5] Hewson, A.C.: The Kondo Problem to Heavy Fermions. Cambridge University Press, New York, N.Y., 1993.
- [6] Khomskii, D.I.: Multiferroics: Different ways to combine magnetism and ferroelectricity. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 306(1):1
  - 8, 2006, ISSN 0304-8853. http://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S0304885306004239.
- [7] Baibich, M. N., J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, и J. Chazelas: *Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices*. Physical Review Letters, 61:2472–2475, 1988.

- [8] Grünberg, P., R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky, и H. Sowers: Layered Magnetic Structures: Evidence for Antiferromagnetic Coupling of Fe Layers across Cr Interlayers. Phys. Rev. Lett., 57(19):2442–2445, Nov 1986.
- [9] Fazekas, P.: Spin and Orbital Order in Itinerant Ferromagnets. Foundations of Physics, 30:1999-2009, 2000, ISSN 0015-9018. http://dx.doi.org/10. 1023/A:1003724522132.
- [10] Rubtsov, A. N., M. I. Katsnelson, и A. I. Lichtenstein: Dual fermion approach to nonlocal correlations in the Hubbard model. Phys. Rev. B, 77(3):033101, Jan 2008.
- [11] Rubtsov, A. N., V. V. Savkin, и А. I. Lichtenstein: Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions. Phys. Rev. B, 72(3):035122, Jul 2005.
- [12] Antipov, A. E., A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, и A. I. Lichtenstein: Electron energy spectrum of the spin-liquid state in a frustrated Hubbard model. Phys. Rev. B, 83(11):115126, Mar 2011.
- [13] Антипов, А.Е., М.С. Алейников, и В.И. Анисимов: Роль вращательной симметрии в магнетизме многозонных моделей. Письма в ЖЭТФ, 94(2):130–133, 2011.
- [14] Glauber, Roy J.: Coherent and Incoherent States of the Radiation Field. Phys. Rev., 131(6):2766–2788, Sep 1963.
- [15] Sudarshan, E. C. G.: Equivalence of Semiclassical and Quantum Mechanical Descriptions of Statistical Light Beams. Phys. Rev. Lett., 10(7):277–279, Apr 1963.

- [16] MacKenzie, R.: Path Integral Methods and Applications. ArXiv Quantum Physics e-prints, апрель 2000.
- [17] Coleman, Piers: The evolving monogram on Many Body Physics. 2011. http://www.physics.rutgers.edu/~coleman/mbody/pdf/bk.pdf.
- [18] Dirac, P.: The Lagrangian in Quantum Mechanics. Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion, 3:64–72, 1933.
- [19] Feynman, R. P.: Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics. Rev. Mod. Phys., 20(2):367–387, Apr 1948.
- [20] Р.Фейнман и А.Хибс: Квантовая механика и интегралы по траекториям. ИО НФМИ, 1998.
- [21] Gerry, Christopher C. и Vijay A. Singh: Feynman path-integral approach to the Aharonov-Bohm effect. Phys. Rev. D, 20(10):2550–2554, Nov 1979.
- [22] Абрикосов, А.А., Л.П. Горьков, и И.Е.Дзялошинский: Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., Физматгиз, 1962.
- [23] Grassmann, Hermann: Die Lineale Ausdehnungslehre. O. Wigand, 1844.
- [24] Ф.А.Березин: Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1968.
- [25] Стратонович, Р. Л.: Об одном методе вычисления квантовых функций распределения. Доклады Академии Наук, 2:416-+, июль 1957.
- [26] Hubbard, J.: Calculation of Partition Functions. Phys. Rev. Lett., 3(2):77–78, Jul 1959.
- [27] Anderson, P. W.: Localized Magnetic States in Metals. Phys. Rev., 124(1):41–53, Oct 1961.

- [28] Mazurenko, V. V., S. N. Iskakov, A. N. Rudenko, V. I. Anisimov, и А. I. Lichtenstein: *Renormalized spectral function for Co adatom on the Pt(111)* surface. Phys. Rev. B, 82(19):193403, Nov 2010.
- [29] Wilson, Kenneth G.: The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. Rev. Mod. Phys., 47(4):773–840, Oct 1975.
- [30] Bulla, Ralf, Theo A. Costi, и Thomas Pruschke: Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. Rev. Mod. Phys., 80(2):395–450, Apr 2008.
- [31] Рубцов, А. Н.: Методы реалистического описания систем с сильными корреляциями и нелокальностью. Диссертация доктора физ.-мат. наук, МГУ им. Ломоносова, 2009.
- [32] Hirsch, J. E. и R. M. Fye: Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals. Phys. Rev. Lett., 56(23):2521–2524, Jun 1986.
- [33] Werner, P., A. Comanac, L. de' Medici, M. Troyer, и A. J. Millis: Continuous-Time Solver for Quantum Impurity Models. Physical Review Letters, 97(7):076405, 2006. http://link.aps.org/abstract/PRL/v97/ e076405.
- [34] Hirsch, J. E.: Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermion lattice models. Phys. Rev. B, 28(7):4059–4061, Oct 1983.
- [35] Jarrell, М. и О. Biham: Dynamical approach to analytic continuation of quantum Monte Carlo data. Phys. Rev. Lett., 63(22):2504—2507, 1989.
- [36] R.N.Silver, D.S.Sivia, и J.E.Gubernatis: Maximum-entropy method for analytic continuation of quantum Monte Carlo data. Phys. Rev. B, 41(4):2380—2389, 1990.
- [37] J.E.Gubernatis, M.Jarell, R.N.Silver, и D.S.Sivia: Quantum Monte Carlo simulations and maximum entropy: Dynamics from imaginary-time data. Phys. Rev. B, 44(12):6011–6029, 1991.
- [38] Krivenko, I. S. и A. N. Rubtsov: Analytic Continuation of Quantum Monte Carlo Data: Optimal Stochastic Regularization Approach. ArXiv Condensed Matter e-prints, декабрь 2006.
- [39] Scalapino, D.J. и R.L. Sugar: Method for Performing Monte Carlo Calculations for Systems with Fermions. Phys. Rev. Lett., 46(8), 1981.
- [40] Metropolis, N., A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, и Е. Teller: *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*. J. Chem. Phys, 21(6):1087–1092, 1953.
- [41] Fye, R. M. и J. E. Hirsch: Monte Carlo study of the symmetric Andersonimpurity model. Phys. Rev. B, 38(1):433–441, Jul 1988.
- Yoo, Jaebeom, Shailesh Chandrasekharan, Ribhu K. Kaul, Denis Ullmo, и Harold U. Baranger: On the Sign Problem in the Hirsch-Fye Algorithm for Impurity Problems. MATH.GEN., 38:10307, 2005. doi:10.1088/ 0305-4470/38/48/004.
- [43] Gull, Emanuel, Andrew J. Millis, Alexander I. Lichtenstein, Alexey N. Rubtsov, Matthias Troyer, и Philipp Werner: Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models. Rev. Mod. Phys., 83(2):349–404, May 2011.
- [44] Hubbard, J.: Electron Correlations in Narrow Energy Bands. Proc. Royal Soc. A, 276(1365):238–257, 1963.

- [45] Wannier, Gregory H.: The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals. Phys. Rev., 52(3):191–197, Aug 1937.
- [46] Kotliar, G.: Landau theory of the Mott transition in the fully frustrated Hubbard model in infinite dimensions. Eur. Phys. J. B, 11(1):27-39, 1999. http://dx.doi.org/10.1007/s100510050914.
- [47] Karski, Michał, Carsten Raas, и Götz S. Uhrig: Electron spectra close to a metal-to-insulator transition. Phys. Rev. B, 72(11):113110, Sep 2005.
- [48] Lichtenstein, А. І. и М. І. Katsnelson: Antiferromagnetism and d-wave superconductivity in cuprates: A cluster dynamical mean-field theory. Phys. Rev. B, 62(14):R9283–R9286, Oct 2000.
- [49] Sentef, M., P. Werner, E. Gull, и А. Р. Kampf: Superconductivity and Pairing Fluctuations in the Half-Filled Two-Dimensional Hubbard Model. ArXiv e-prints, февраль 2011.
- [50] Khomskii, D.I.: Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids: Order and Elementary Excitations. Cambridge University Press, 2010, ISBN 9780521835213. http://books.google.com/books?id= 0yFzIw8BgZoC.
- [51] Moriya, T: Spin fluctuations in itinerant electron magnetism, 1985.
- [52] Emery, V. J.: Theory of the quasi-one-dimensional electron gas with strong "on-site" interactions. Phys. Rev. B, 14(7):2989–2994, Oct 1976.
- [53] Nagaoka, Yosuke: Ferromagnetism in a Narrow, Almost Half-Filled s Band.
   Phys. Rev., 147(1):392–405, Jul 1966.
- [54] Peters, Robert и Thomas Pruschke: Orbital and magnetic order in the twoorbital Hubbard model. Phys. Rev. B, 81(3):035112, Jan 2010.

- [55] Chan, Ching Kit, Philipp Werner, и Andrew J. Millis: Magnetism and orbital ordering in an interacting three-band model: A dynamical mean-field study. Phys. Rev. B, 80(23):235114, Dec 2009.
- [56] Anderson, P. W.: Resonating valence bonds: A new kind of insulator?
   Materials Research Bulletin, 8(2):153–160, 1973.
- [57] Jacobsen, J., S. Ouvry, и V. Pasquier: Exact Methods in Low-Dimensional Statistical Physics and Quantum Computing: Lecture Notes of the Les Houches Summer School: Volume 89, July 2008. Номер v. 89 в Lecture Notes of the Les Houches Summer School. Oxford University Press, 2010, ISBN 9780199574612. http://books.google.com/books? id=KW7XutNSumwC.
- [58] Metzner, W. и D. Vollhardt: Correlated Lattice Fermions in  $d = \infty$ Dimensions. Phys. Rev. Lett., 62(3):324–327, Jan 1989.
- [59] Займан, Дж.: Модели беспорядка. М.: Мир, 1982.
- [60] Nekrasov, I.A., K. Held, N. Blümer, A.I. Poteryaev, V.I. Anisimov, и D. Vollhardt: *Calculation of photoemission spectra of the doped Mott insulator*. The European Physical Journal B Condensed Matter and Complex Systems, 18:55–61, 2000, ISSN 1434-6028. http://dx.doi.org/10.1007/s100510070077, 10.1007/s100510070077.
- [61] Oudovenko, V. S., G. Pálsson, S. Y. Savrasov, K. Haule, и G. Kotliar: *Calculations of optical properties in strongly correlated materials*. Phys. Rev. B, 70(12):125112, Sep 2004.
- [62] Lichtenstein, A. I., M. I. Katsnelson, и G. Kotliar: Finite-Temperature Magnetism of Transition Metals: An ab initio Dynamical Mean-Field Theory. Phys. Rev. Lett., 87(6):067205, Jul 2001.

- [63] Anderson, P.W.: The Theory of Superconductivity in High-Tc Cuprates. Princeton University Press, 1997.
- [64] Poteryaev, Alexander I., Jan M. Tomczak, Silke Biermann, Antoine Georges, Alexander I. Lichtenstein, Alexey N. Rubtsov, Tanusri Saha-Dasgupta, и Ole K. Andersen: Enhanced crystal-field splitting and orbitalselective coherence induced by strong correlations in V2O3. Phys. Rev. B, 76(8):085127, Aug 2007.
- [65] Shimizu, Y., K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Maesato, и G. Saito: Spin Liquid State in an Organic Mott Insulator with a Triangular Lattice. Phys. Rev. Lett., 91(10):107001, Sep 2003.
- [66] Irkhin, V. Yu., A. A. Katanin, и М. I. Katsnelson: Effects of van Hove singularities on magnetism and superconductivity in the t – t' Hubbard model: A parquet approach. Phys. Rev. B, 64(16):165107, Oct 2001.
- [67] Bulut, N. и D. J. Scalapino: dx2-y2 symmetry and the pairing mechanism.
   Phys. Rev. B, 54(21):14971–14973, Dec 1996.
- [68] Maier, Thomas, Mark Jarrell, Thomas Pruschke, и Matthias H. Hettler: *Quantum cluster theories.* Rev. Mod. Phys., 77(3):1027–1080, Oct 2005.
- [69] Fuchs, Sebastian, Emanuel Gull, Matthias Troyer, Mark Jarrell, и Thomas Pruschke: Spectral properties of the three-dimensional Hubbard model. Phys. Rev. B, 83(23):235113, Jun 2011.
- [70] Hafermann, H.: Numerical Approaches to Spatial Correlations in Strongly Interacting Fermion Systems. Cuvilier Verlag Göttingen, 2009.

- [71] Hafermann, H., S. Brener, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, и А. I. Lichtenstein: *Cluster dual fermion approach to nonlocal correlations*. JETP Lett., 86:677–682, декабрь 2007.
- [72] Rubtsov, A. N., M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, и A. Georges: Dual fermion approach to the two-dimensional Hubbard model: Antiferromagnetic fluctuations and Fermi arcs. Phys. Rev. B, 79(4):045133, Jan 2009.
- [73] Hafermann, H., G. Li, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein,
  и H. Monien: *Efficient Perturbation Theory for Quantum Lattice Models*.
  Phys. Rev. Lett., 102(20):206401, May 2009.
- [74] Brener, S., H. Hafermann, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, и A. I. Lichtenstein: Dual fermion approach to susceptibility of correlated lattice fermions. Phys. Rev. B, 77(19):195105, May 2008.
- [75] Hafermann, H., C. Jung, S. Brener, M. I. Katsnelson, A. N. Rubtsov, и A. I. Lichtenstein: Superperturbation solver for quantum impurity models. EPL (Europhysics Letters), 85(2):27007, 2009. http://stacks.iop.org/ 0295-5075/85/i=2/a=27007.
- [76] Vidberg, H. J. и J. W. Serene: Solving the Eliashberg equations by means of N-point Padé approximants. Journal of Low Temperature Physics, 29:179–192, 1977, ISSN 0022-2291. http://dx.doi.org/10. 1007/BF00655090, 10.1007/BF00655090.
- [77] Krivenko, I., A. Rubtsov, M. Katsnelson, и A. Lichtenstein: Analytical approximation for single-impurity Anderson model. JETP Letters, 91:319–325, 2010, ISSN 0021-3640. http://dx.doi.org/10.1134/S0021364010060123, 10.1134/S0021364010060123.

- [78] Jung, C., A. Wilhelm, H. Hafermann, S. Brener, и A. Lichtenstein: Superperturbation theory on the real-axis. ArXiv e-prints, февраль 2011.
- [79] Jung, C.: Superperturbation theory for correlated fermions. Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades des Fachbereiches Physik der Universitat Hamburg, 2010.
- [80] Sachdev, Subir: Quantum Phase Transitions. Cambridge Univ. Press, 1999.
- [81] Fazekas, Р. и Р. W. Anderson: On the ground state properties of the anisotropic triangular antiferromagnet. Philosophical Magazine, 30(2):423 440, 1974.
- [82] Powell, В J и Ross H McKenzie: Quantum frustration in organic Mott insulators: from spin liquids to unconventional superconductors. Reports on Progress in Physics, 74(5):056501, 2011. http://stacks.iop.org/ 0034-4885/74/i=5/a=056501.
- [83] Zheng, Weihong, John O. Fjærestad, Rajiv R. P. Singh, Ross H. McKenzie, и Radu Coldea: Excitation spectra of the spin- 12 triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet. Phys. Rev. B, 74(22):224420, Dec 2006.
- [84] Katsura, Shigetoshi, Tsugio Ide, и Tohru Morita: The ground states of the classical heisenberg and planar models on the triangular and plane hexagonal lattices. Journal of Statistical Physics, 42(3):381–404, февраль 1986.
- [85] Jolicoeur, Th., E. Dagotto, E. Gagliano, и S. Bacci: Ground-state properties of the S=1/2 Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice. Phys. Rev. B, 42(7):4800–4803, Sep 1990.

- [86] Bernu, B., P. Lecheminant, C. Lhuillier, и L. Pierre: Exact spectra, spin susceptibilities, and order parameter of the quantum Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice. Phys. Rev. B, 50(14):10048–10062, Oct 1994.
- [87] Capriotti, Luca, Adolfo E. Trumper, и Sandro Sorella: Long-Range Néel Order in the Triangular Heisenberg Model. Phys. Rev. Lett., 82(19):3899–3902, May 1999.
- [88] White, Steven R. и A. L. Chernyshev: Neél Order in Square and Triangular Lattice Heisenberg Models. Phys. Rev. Lett., 99(12):127004, Sep 2007.
- [89] Kalmeyer, Vadim и R. B. Laughlin: Theory of the spin liquid state of the Heisenberg antiferromagnet. Phys. Rev. B, 39(16):11879–11899, Jun 1989.
- [90] Kanoda, Kazushi: Metal-Insulator Transition in κ-(ET)<sub>2</sub>X and (DCNQI)<sub>2</sub>M: Two Contrasting Manifestation of Electron Correlation. Journal of the Physical Society of Japan, 75(5):051007, 2006. http://jpsj.ipap.jp/link?JPSJ/75/051007/.
- [91] Yamashita, Satoshi, Yasuhiro Nakazawa, Masaharu Oguni, Yugo Oshima, Hiroyuki Nojiri, Yasuhiro Shimizu, Kazuya Miyagawa, и Kazushi Kanoda: Thermodynamic properties of a spin-1/2 spin-liquid state in a [kappa]-type organic salt. Nat Phys, 4(6):459–462, июнь 2008.
- [92] Helton, J. S., K. Matan, M. P. Shores, E. A. Nytko, B. M. Bartlett, Y. Yoshida, Y. Takano, A. Suslov, Y. Qiu, J. H. Chung, D. G. Nocera, и Y. S. Lee: Spin Dynamics of the Spin-1/2 Kagome Lattice Antiferromagnet ZnCu3(OH)6Cl2. Phys. Rev. Lett., 98(10):107204, Mar 2007.
- [93] Lee, Patrick A.: An End to the Drought of Quantum Spin Liquids. Science, 321(5894):1306–1307, 2008.

- [94] Okamoto, Yoshihiko, Minoru Nohara, Hiroko Aruga-Katori, и Hidenori Takagi: Spin-Liquid State in the S = 1/2 Hyperkagome Antiferromagnet Na4Ir3O8. Phys. Rev. Lett., 99(13):137207, Sep 2007.
- [95] Norman, М. R. и T. Micklitz: Electronic structure of hyper-kagome Na4Ir3O8. Phys. Rev. B, 81(2):024428, Jan 2010.
- [96] Kandpal, Hem C., Ingo Opahle, Yu Zhong Zhang, Harald O. Jeschke, и Roser Valentí: Revision of Model Parameters for κ-Type Charge Transfer Salts: An Ab Initio Study. Phys. Rev. Lett., 103(6):067004, Aug 2009.
- [97] Nakamura, Kazuma, Yoshihide Yoshimoto, Taichi Kosugi, Ryotaro Arita, и Masatoshi Imada: Ab initio Derivation of Low-Energy Model for κ-ET Type Organic Conductors. Journal of the Physical Society of Japan, 78(8):083710, 2009.
- [98] Yoshioka, Takuya, Akihisa Koga, и Norio Kawakami: Quantum Phase Transitions in the Hubbard Model on a Triangular Lattice. Phys. Rev. Lett., 103(3):036401, Jul 2009.
- [99] Watanabe, S., T. Mizusaki, и M. Imada: Comment on arXiv:0811.1575 entitled "Quantum phase transitions in the Hubbard model on triangular lattice" by T. Yoshioka, A. Koga and N. Kawakami.
- [100] Morita, Hidekazu, Shinji Watanabe, и Masatoshi Imada: Nonmagnetic Insulating States near the Mott Transitions on Lattices with Geometrical Frustration and Implications for к-(ET)<sub>2</sub>Cu<sub>2</sub>(CN)<sub>3</sub>. Journal of the Physical Society of Japan, 71(9):2109–2112, 2002.
- [101] Sahebsara, Реутап и David Sénéchal: Hubbard Model on the Triangular Lattice: Spiral Order and Spin Liquid. Phys. Rev. Lett., 100(13):136402, Mar 2008.

- [102] Aryanpour, K., W. E. Pickett, и R. T. Scalettar: Dynamical mean-field study of the Mott transition in the half-filled Hubbard model on a triangular lattice. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 74(8):085117, 2006. http://link.aps.org/abstract/PRB/v74/e085117.
- [103] Liebsch, A., H. Ishida, и J. Merino: Mott transition in two-dimensional frustrated compounds. Phys. Rev. B, 79(19):195108, May 2009.
- [104] Kyung, Bumsoo: Electronic properties of the Hubbard model on a frustrated triangular lattice. Phys. Rev. B, 75(3):033102, Jan 2007.
- [105] Lee, Hunpyo, Gang Li, и Hartmut Monien: Hubbard model on the triangular lattice using dynamical cluster approximation and dual fermion methods. Phys. Rev. B, 78(20):205117, Nov 2008.
- [106] Kyung, В. и А. М. S. Tremblay: Mott Transition, Antiferromagnetism, and d-Wave Superconductivity in Two-Dimensional Organic Conductors. Phys. Rev. Lett., 97(4):046402, Jul 2006.
- [107] Pruschke, Th. и R. Bulla: Hund's coupling and the metal-insulator transition in the two-band Hubbard model. The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems, 44:217–224, 2005, ISSN 1434-6028.
- [108] Koga, Akihisa, Norio Kawakami, Т. М. Rice, и Manfred Sigrist: Orbital-Selective Mott Transitions in the Degenerate Hubbard Model. Phys. Rev. Lett., 92(21):216402, May 2004.
- [109] V.I. Anisimov, I.A. Nekrasov, D.E. Kondakov, Т.M. Rice, и М. Sigrist: Orbital-selective Mott-insulator transition in Ca<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>RuO<sub>4</sub>. Eur. Phys. J. B, 25(2):191-201, 2002. http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e20020021.

- [110] Neupane, M., P. Richard, Z. H. Pan, Y. M. Xu, R. Jin, D. Mandrus, X. Dai,
   Z. Fang, Z. Wang, и H. Ding: Observation of a Novel Orbital Selective Mott
   Transition in Ca<sub>1.8</sub>Sr<sub>0.2</sub>RuO<sub>4</sub>. Phys. Rev. Lett., 103(9):097001, Aug 2009.
- [111] Sreedhar, K., M. McElfresh, D. Perry, D. Kim, P. Metcalf, и J. M. Honig: Low-Temperature Electronic Properties of the Lan+1NinO3n+1 (n = 2, 3, and [infinity]) System: Evidence for a Crossover from Fluctuating-Valence to Fermi-Liquid-like Behavior. Journal of Solid State Chemistry, 110(2):208 - 215, 1994, ISSN 0022-4596. http://www.sciencedirect.com/science/ article/B6WM2-45NJFYB-2J/2/3f93f73b1fecdcaf015aaa093519618e.
- [112] Held, К. и D. Vollhardt: *Electronic Correlations in Manganites*. Phys. Rev. Lett., 84(22):5168–5171, May 2000.
- [113] Sakai, Shiro, Ryotaro Arita, Karsten Held, и Hideo Aoki: Quantum Monte Carlo study for multiorbital systems with preserved spin and orbital rotational symmetries. Phys. Rev. B, 74(15):155102, Oct 2006.
- [114] Gorelov, E., T. O. Wehling, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, и А. I. Lichtenstein: Relevance of the complete Coulomb interaction matrix for the Kondo problem: Co impurities in Cu hosts. Phys. Rev. B, 80(15):155132, Oct 2009.
- [115] Mravlje, J., M. Aichhorn, T. Miyake, K. Haule, G. Kotliar, и A. Georges: The coherence-incoherence crossover and the mass-renormalization puzzles in Sr2RuO4. arXiv:1010.5910v1, октябрь 2010.
- [116] Nevidomskyy, Andriy H. и P. Coleman: Kondo Resonance Narrowing in dand f-Electron Systems. Phys. Rev. Lett., 103(14):147205, Oct 2009.
- [117] Schwabl, Franz: Statistical Mechanics. Advanced Texts in Physics. Springer Berlin Heidelberg, 2006.