

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

им. М.В. ЛОМОНОСОВА

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

На правах рукописи

Кривенко Игорь Станиславович

**ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА
МАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ ПРИ НИЗКОЙ
ТЕМПЕРАТУРЕ**

01.04.09 – Физика низких температур

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н.

Рубцов Алексей Николаевич

Москва – 2012

Содержание

Введение	5
Глава 1. Обзор методов решения квантовых примесных задач . . .	12
1.1. Функции Грина для ферми-систем	12
1.1.1. Запаздывающая, опережающая и временная функции Грина.	12
1.1.2. Температурная функция Грина	16
1.1.3. Двухчастичные функции Грина	18
1.2. Аппарат фермионных континуальных интегралов	18
1.2.1. Общие сведения	18
1.2.2. Алгебра Грассмана	20
1.2.3. Определение и свойства фермионного континуального интеграла	23
1.2.4. Теория возмущений по взаимодействию	27
1.2.5. Преобразование к дуальным фермионам	32
1.3. Модель Андерсона для описания магнитных примесей в металле	35
1.3.1. Вывод модели	35
1.3.2. Режимы поведения электронов в модели Андерсона. Эффект Кондо	40
1.3.3. Краткая история исследований модели Андерсона . . .	43
1.3.4. Квантовые методы Монте-Карло	47
1.3.5. Ренормгруппа для матрицы плотности	53
1.3.6. Суперпертурбативный метод решения	57
1.4. Модель Хаббарда и динамическая теория среднего поля	60
1.4.1. Модель Хаббарда — основная модель теории сильных электронных корреляций	60

1.4.2.	Динамическая теория среднего поля	62
1.4.3.	Переход металл-диэлектрик и пиковая структура хаббардовских подзон	66
1.5.	Проблема аналитического продолжения зашумленных численных данных	69
1.5.1.	Постановка задачи	69
1.5.2.	Аппроксимация Паде	70
1.5.3.	Метод наименьших квадратов	71
1.5.4.	Динамический метод	73
1.5.5.	Теорема Байеса и метод максимальной энтропии	74
1.5.6.	Стохастический метод Сэндвика	80
1.5.7.	Метод Мищенко	84
Глава 2. Аналитическое продолжение зашумленных численных данных по методу оптимальной стохастической регуляризации		87
2.1.	Оптимальный регуляризационный функционал	87
2.2.	Выбор представления. Корреляционная матрица	91
2.3.	Корреляционная матрица лоренцевых пиков	93
2.4.	Переход Хаббарда-Мотта: практический расчет плотности состояний	95
2.5.	Исследование природы пиковой структуры хаббардовских подзон	101
2.6.	Заключение	104
Глава 3. Дуальная теория возмущений для однозонной примесной модели Андерсона		106
3.1.	Постановка задачи	106
3.2.	Предварительный анализ задачи	107

3.3.	Низкоэнергетические свойства: общее рассмотрение.	109
3.4.	Низкоэнергетические свойства: аналитические результаты для полукруглой зоны проводимости.	112
3.5.	Процедура перенормировки.	118
3.6.	Заключение	121
Основные выводы		125
Литература		126

Введение

Диссертационная работа посвящена разработке новых и усовершенствованию существующих теоретических методов, предназначенных для изучения электронного спектра магнитных примесей при низкой температуре. Теоретическое исследование электронной структуры металлов в присутствии разрезанных магнитных примесей осуществляется на модельном уровне с помощью двух семейств гамильтонианов. Это однозонная и многозонная примесные модели Андерсона [1] и родственная им модель s-d-обмена (модель Кондо) [2, 3].

На сегодняшний день интерес к этим моделям имеет двоякую природу. Во-первых, они, будучи сформулированы около полувека назад, отнюдь не утратили своего фундаментального значения для теории магнитных примесей. Напротив, с появлением возможности манипулировать отдельными атомами и создавать магнитные квантовые точки, экспериментально стали доступны более широкие области значений параметров в таких моделях. Поскольку эти модели допускают точное решение лишь в некоторых частных случаях, а методы теории возмущений зачастую неприменимы для реалистичных значений параметров, то возникает вопрос об их численном решении. Особо остро он встает при решении многозонных задач — при наличии у электронов примеси большого нескомпенсированного орбитального момента: с увеличением момента примеси экспоненциально возрастает количество состояний, определяющих структуру электронного спектра.

Во-вторых, модель Андерсона является результатом редукции значительно более сложной решеточной модели Хаббарда [4] в рамках метода динамической теории среднего поля [5]. Модель Хаббарда — центральная модель теории материалов с сильными электронными корреляциями. Она воспроизводит большое разнообразие физических явлений, как то: моттовский переход

металл-диэлектрик, магнитное упорядочение, отклонение от ферми-жидкостного поведения электронов [4]. Модель Хаббарда является одной из моделей для описания высокотемпературных сверхпроводников на основе купратов [6]. Поэтому ее исследование чрезвычайно важно и является перспективным направлением в современной физике конденсированного состояния.

В настоящее время разработано множество различных методов численного решения квантовых примесных задач. Грубо их можно разделить на три класса по характеру результатов.

К первому классу относятся квантовые методы Монте-Карло (Quantum Monte Carlo, QMC). Они основаны на приближенном вычислении физических величин как суммы большого числа слагаемых (сумма по траекториям, конфигурациям, диаграммам и т.п.). Количество слагаемых в таких суммах экспоненциально возрастает с ростом числа степеней свободы (величины локализованного момента, количества одновременно рассматриваемых примесных атомов). Экспоненциальная сложность суммирования преодолевается путем организации случайных марковских блужданий по множеству всех слагаемых. Вероятность перехода от одного состояния к следующему, как правило, определяется критерием Метрополиса-Гастингса [7, 8]. Согласно этому критерию, вероятность “посещения” некоторого слагаемого определяется его величиной (вкладом в сумму), и в то же время выполняется условие эргодичности — любое слагаемое, в принципе, может быть “посещено” с ненулевой вероятностью.

Принципиально алгоритмы QMC позволяют вычислять спектральные и корреляционные функции с любой наперед заданной точностью. В этом смысле они являются референсными, свободными от приближений. Однако на практике их ценность существенно ограничена так называемой проблемой знака. Дело в том, что при вычислении различных средних для системы фермионов возникают знакопеременные суммы, для которых критерий Метро-

полиса-Гастингса, опирающийся лишь на абсолютное значение слагаемых, не так успешен. Средний знак учитываемых слагаемых оказывается мал — среднее значение “тонет” на фоне стохастических флуктуаций. Эта сложность непосредственно связана с антисимметричностью волновых функций электронов и, по всей видимости, непреодолима [9].

Проблема знака приводит к тому, что затрачиваемое время счета (количество суммируемых слагаемых) экспоненциально растет с ростом требуемой точности (а также, с понижением температуры). В то же время, наиболее интересен как раз случай низких температур, так как в этом пределе поведение электронов является сугубо квантовым и определяется низлежащими энергетическими уровнями. На практике выходные данные монте-карловских алгоритмов всегда зашумлены. Другое существенное ограничение, накладываемое проблемой знака, — это невозможность производить вычисления корреляционных функций на реальной оси времени (частоты). Вместо этого используют мнимое время (представление Мацубары [10]). В случае же реального времени слагаемые в суммах для средних становятся комплексными, что ведет, фактически, к неработоспособности алгоритма.

При вычислении статических величин, например, примесного вклада в намагниченность материала использование мацубаровского представления не приносит принципиальных сложностей. Однако динамические величины — функции Грина и восприимчивости для непосредственного сравнения с экспериментом нужно вычислять, разумеется, на вещественных частотах. Задача об аналитическом продолжении данных с мнимой оси частот на вещественную — в математическом смысле некорректно поставленная задача. Искомое аналитическое продолжение чрезвычайно чувствительно к неустранимому шуму входных данных, получаемых из QMC. Несмотря на большое количество публикаций по теме, эта задача еще далека от решения.

Во второй класс можно условно выделить методы, использующие раз-

личные приближения, или специализированные для изучения определенного круга физических явлений, присущих модели. Используемые приближения в достаточной степени контролируемы, а получаемые с их помощью результаты могут быть не менее содержательными, чем у QMC. Сюда можно отнести численные алгоритмы, использующие идею группы перенормировок (Numerical renormalization group, NRG [11]; Dynamical density matrix renormalization group DDMRG [12]) и точную диагонализацию конечных кластеров [13].

Наконец, в третий класс попадают приближения, обладающие серьезными недостатками (например, нарушение причинности и правил сумм) в некоторых областях параметров решаемой модели. Среди них такой метод, как NCA — приближение непересекающихся диаграмм [14], его обобщения с более сложными диаграммами и родственные им $1/N$ разложения [15]. Их результаты нужно проверять на физическую корректность для каждого конкретного применения.

Хотя по сравнению с QMC методы из второй и третьей групп во многих случаях дают более точные и легче поддающиеся интерпретации результаты, все они основаны на более или менее контролируемых приближениях. Оправданность этих приближений приходится проверять, исходя из физической интуиции и уже имеющихся знаний об изучаемом эффекте.

В диссертационной работе затрагиваются вопросы, касающиеся первой и третьей групп методов.

Цель диссертационной работы состоит в исследовании особенностей электронного спектра атомов коррелированных примесей с помощью новых теоретических методов для решения квантовых примесных задач при низких температурах.

Актуальность работы определяется потребностью в новых методах теоретического описания физики квантовых примесных задач, допускающих прямое сравнение предсказанных электронных спектров с экспериментом.

Научная новизна результатов диссертации состоит в реализации новой схемы аналитического продолжения зашумленных численных данных QMC, изучении с помощью реализованной схемы физической природы тонкой пиковой структуры хаббардовских подзон в электронном спектре однозонной модели Хаббарда на бесконечномерной решетке и в аналитическом исследовании однозонной модели Андерсона методом дуального преобразования в реальном времени.

Практическая значимость. Результаты, изложенные в диссертации, обладают предсказательной силой и могут быть использованы для количественно точного расчета электронных спектров экспериментально реализуемых систем — изолированных магнитных примесей и квантовых точек на поверхности или в объеме металлов.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

- Одноэлектронный спектр полузаполненной однозонной модели Хаббарда на решетке Бете содержит особенности на внутренних краях хаббардовских подзон при низкой температуре и значениях константы взаимодействия U , отвечающих фазовому переходу Хаббарда-Мотта.
- Получено свидетельство того, что при конечной (низкой) температуре за формирование пиковой структуры хаббардовских подзон ответственны зарядовые, а не спиновые возбуждения.
- Изменение частот атомных переходов в атомах примесей за счет гибридизации с электронами проводимости металла может быть эффективно описано перенормировкой кинетического слагаемого в действии примесной задачи.

Апробация работы происходила на следующих конференциях:

1. VII конференция “Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления”, г. Троицк, 18.06.2009: И.С. Кривенко, А.Н. Рубцов, А.И. Лихтенштейн, “Kondo peak in the first order of perturbation theory”.
2. 1st International Workshop “New generation in strongly correlated electron systems-2010”, Лансароте, Испания, 20-25.06.2010: I. Krivenko, A. Rubtsov, M. Katsnelson, A. Lichtenstein, “Analytical approximation for single-impurity Anderson model”.
3. Международная конференция “Realistic theories of correlated electrons in condensed matter”, р. Волга, 01-08.08.2010: I. Krivenko, A. Rubtsov, M. Katsnelson, A. Lichtenstein, “A new analytical solver for multiorbital impurity problems”.
4. Международный симпозиум “Strong correlation from first principles”, Монастырь Зееон, Германия, 30.08.2011 - 02.09.2011: I. Krivenko, A. Rubtsov, “Analytic continuation of QMC data: optimal stochastic regularization approach”.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 6 печатных работах, из них 2 статьи в рецензируемых журналах [16, 17] и тезисы 4 докладов.

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.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 138 страниц, из них 125 страниц текста, включая 18 рисунков. Библиография включает 122

наименования на 13 страницах (в том числе публикации автора по теме диссертации).

Глава 1

Обзор методов решения квантовых примесных задач

1.1. Функции Грина для ферми-систем

1.1.1. Запаздывающая, опережающая и временная функции Грина.

Аппарат временных и температурных функций Грина (ФГ) — это язык, на котором изъясняется современная статистическая физика систем многих частиц. Изначально он был разработан в квантовой электродинамике, а в начале 1960х годов адаптирован для нужд статистики А.А. Абрикосовым, Л.П. Горьковым и И.Е. Дзялошинским [18]. С тех пор было написано множество руководств по использованию этой техники [19, 20]. Здесь будут приведены некоторые важные определения и свойства гриновских функций в теории взаимодействующих фермионов, а также связанных с ними динамических величин.

Пусть система многих взаимодействующих нерелятивистских фермионов определяется гамильтонианом следующего вида:

$$\hat{H} = -\mu\hat{N} + \sum_{\alpha\beta} h_{\alpha\beta}\hat{c}_{\alpha}^{\dagger}\hat{c}_{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\gamma\delta}\hat{c}_{\alpha}^{\dagger}\hat{c}_{\beta}^{\dagger}\hat{c}_{\gamma}\hat{c}_{\delta} \quad (1.1)$$

Индексы $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ при операторах $\hat{c}, \hat{c}^{\dagger}$ — сокращение для совокупности спиновых, орбитальных и любых других индексов, отвечающих интегралам движения отдельной частицы. Далее всюду будет подразумеваться, что мы рассматриваем большой канонический ансамбль, и слагаемое с химическим потенциалом μ всегда будет включаться в гамильтониан.

В отсутствие взаимодействия, т.е. при $U_{\alpha\beta\gamma\delta} \equiv 0$ гамильтониан (1.1) ре-

шается точно путем канонического преобразования операторов $\hat{c}_\alpha, \hat{c}_\beta^\dagger$ к базису, в котором матрица $h_{\alpha\beta}$ диагональна. В этом базисе энергия системы есть сумма энергий невзаимодействующих квазичастиц, которым соответствуют новые преобразованные операторы.

Запаздывающая и опережающая функции Грина (надстрочные индексы R и A соответственно) определяются так:

$$G_{\alpha\beta}^R(t_1, t_2) = -i\theta(t_1 - t_2)\langle \hat{c}_\alpha(t_1)\hat{c}_\beta^\dagger(t_2) + \hat{c}_\beta^\dagger(t_2)\hat{c}_\alpha(t_1) \rangle \quad (1.2)$$

$$G_{\alpha\beta}^A(t_1, t_2) = i\theta(t_2 - t_1)\langle \hat{c}_\alpha(t_1)\hat{c}_\beta^\dagger(t_2) + \hat{c}_\beta^\dagger(t_2)\hat{c}_\alpha(t_1) \rangle \quad (1.3)$$

Названия этих функций отражают тот факт, что они отличны от нуля при $t_1 > t_2$ и $t_1 < t_2$ соответственно.

Угловые скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по равновесному гиббсовскому распределению при заданной температуре T :

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\text{Sp}[\hat{A} \exp(-\hat{H}/T)]}{\text{Sp}[\exp(-\hat{H}/T)]} \quad (1.4)$$

В определении функций Грина использованы зависящие от времени гайзенберговские операторы, которые связаны с исходными шредингеровскими с помощью унитарного преобразования

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{A} e^{-i\hat{H}t} \quad (1.5)$$

(везде в тексте диссертации $\hbar = 1$ и $k_B = 1$, если это не оговорено особо).

Согласно теореме Нетер, закон сохранения энергии, выполняющийся в любой гамильтоновой системе, связан с инвариантностью уравнений движения по отношению к сдвигу во времени. Из этого следует, что запаздывающая и опережающая функции Грина зависят лишь от разности времен $t_1 - t_2$, и для них можно ввести частотное представление:

$$G_{\alpha\beta}^{R,A}(\epsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\epsilon(t_1-t_2)} G_{\alpha\beta}^{R,A}(t_1 - t_2) dt \quad (1.6)$$

Комбинируя определения (1.2)–(1.6) и используя разложение единицы по ортонормированному собственному базису $\langle n |$ гамильтониана \hat{H} , можно получить явные выражения для функций Грина в частотном представлении:

$$G_{\alpha\beta}^{R,A}(\epsilon) = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \frac{\langle n | \hat{c}_\alpha | m \rangle \langle m | \hat{c}_\beta^\dagger | n \rangle + \langle n | \hat{c}_\beta^\dagger | m \rangle \langle m | \hat{c}_\alpha | n \rangle}{\epsilon - (E_m - E_n) \pm i0} (e^{-E_m/T} + e^{-E_n/T}), \quad (1.7)$$

где $Z = \text{Sp}[e^{-\hat{H}/T}]$ — статистическая сумма системы, E_n — уровни энергии, отвечающие собственным состояниям $|n\rangle$; верхний знак при инфинитезимальной мнимой добавке в знаменателе относится к G^R , нижний — к G^A . Этот знак выбирается, исходя из условия сходимости интеграла (1.6).

Кратко опишем аналитические свойства опережающей и запаздывающей функций Грина. Если рассматривать $G_{\alpha\beta}^R$ как функцию комплексной частоты ϵ , то все ее полюса лежат ниже (у $G_{\alpha\beta}^A$ — выше) вещественной оси. Коэффициент при $1/\epsilon$ в высокочастотном разложении функций Грина с совпадающими индексами равен единице в силу канонических антикоммутиационных соотношений. Это свойство абсолютно универсально и не зависит от каких-либо динамических свойств системы. Поскольку $G_{\alpha\alpha}^R$ аналитична в верхней полуплоскости ϵ и спадает на бесконечности, для нее справедливы соотношения Крамерса-Кронига [21, 22]:

$$\Re G_{\alpha\alpha}^R(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Im G_{\alpha\alpha}^R(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon'} d\epsilon' \quad (1.8)$$

$$\Im G_{\alpha\alpha}^R(\epsilon) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Re G_{\alpha\alpha}^R(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon'} d\epsilon' \quad (1.9)$$

Эти соотношения говорят о достаточности всего одной вещественной функции для задания $G_{\alpha\alpha}^R(\epsilon)$. Такая функция называется спектральной функцией $A_\alpha(\epsilon)$:

$$A_\alpha(\epsilon) \equiv -\frac{1}{\pi} \Im G_{\alpha\alpha}^R(\epsilon), \quad G_{\alpha\alpha}^R(\epsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A_\alpha(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon' + 0i} d\epsilon', \quad (1.10)$$

а само представление — спектральным представлением Лемана [23].

В выражении (1.7) вклад в сумму дают только пары состояний $|m\rangle$ и $|n\rangle$, которые отличаются по полному числу частиц на ± 1 , а полюса, соответствующие этим слагаемым, равны с точностью до бесконечно малых мнимых сдвигов частотам одночастичных переходов между уровнями E_n в E_m . Каждому полюсу $G_{\alpha\alpha}^R(\epsilon)$ соответствует δ -пик в спектральной функции, а интеграл по всей вещественной оси от нее (полный спектральный вес) равен единице (правило сумм для спектральной функции).

Если гамильтониан \hat{H} описывает систему с макроскопически большим числом степеней свободы (например, модель Андерсона), то полюса сливаются, и $A_\alpha(\epsilon)$ делается отличной от нуля на целых отрезках оси — образуется непрерывный (зонный) спектр. Хотя такой спектр качественно отличается от дискретного атомоподобного спектра, аналитические свойства функций Грина и спектральной функции остаются теми же, в частности, функция $A_\alpha(\epsilon)$ по-прежнему всюду неотрицательна.

Кроме запаздывающей и опережающей ФГ вводят также временную или фейнмановскую ФГ как t -упорядоченное среднее:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(t_1 - t_2) &\equiv -i\langle \mathbb{T} \hat{c}_\alpha(t_1) \hat{c}_\beta^\dagger(t_2) \rangle = \\ &= -i\theta(t_1 - t_2) \langle \hat{c}_\alpha(t_1) \hat{c}_\beta^\dagger(t_2) \rangle + i\theta(t_2 - t_1) \langle \hat{c}_\beta^\dagger(t_2) \hat{c}_\alpha(t_1) \rangle \quad (1.11) \end{aligned}$$

Эта функция имеет смысл амплитуды процесса, при котором в систему, находящуюся в термодинамическом равновесии при температуре T , в момент времени t_2 добавляют один электрон, а в более поздний момент t_1 один электрон из системы убирают. Если t_1 предшествует t_2 , то вместо электрона в процессе участвует одна добавочная дырка.

Частотная версия временной ФГ представляет эквивалентное описание одночастичной динамики системы, но обладает другими аналитическими свойствами по сравнению с $G_{\alpha,\beta}^{R,A}(\epsilon)$. Ее особые точки лежат ниже вещественной оси

при $\epsilon > 0$ и выше — при $\epsilon < 0$. Этот вывод следует из явной связи $G_{\alpha\beta}^{R,A}(\epsilon)$ с $G_{\alpha\beta}(\epsilon)$:

$$G_{\alpha\beta}^{R,A}(\epsilon) = \Re G_{\alpha\beta}(\epsilon) \pm i \operatorname{cth}\left(\frac{\epsilon}{2T}\right) \Im G_{\alpha\beta}(\epsilon) \quad (1.12)$$

В пределе нулевой температуры $\operatorname{cth}(\epsilon/2T) \rightarrow \operatorname{sgn}(\epsilon)$ и связь становится еще проще:

$$G_{\alpha\beta}(\epsilon) = \begin{cases} G_{\alpha\beta}^R(\epsilon), & \epsilon > 0 \\ G_{\alpha\beta}^A(\epsilon), & \epsilon < 0 \end{cases} \quad (1.13)$$

1.1.2. Температурная функция Грина

Хотя описание одночастичной динамики систем с использованием запаздывающих и опережающих ФГ весьма наглядно, оказалось, что существует более удобное (а в численных приложениях — незаменимое) определение функции Грина. Оно было предложено Т. Мацубарой в 1955 году [10] и основано на введении новой переменной с размерностью времени $\tau = it$ (в теории поля этот прием называется поворотом Вика). В результате такой замены вместо гайзенберговских операторов рождения и уничтожения в теории появляются мацубаровские операторы:

$$\hat{c}_\alpha(\tau) = e^{\hat{H}\tau} \hat{c}_\alpha e^{-\hat{H}\tau} \quad (1.14)$$

$$\bar{\hat{c}}_\alpha(\tau) = e^{\hat{H}\tau} \hat{c}_\alpha^\dagger e^{-\hat{H}\tau} \quad (1.15)$$

(эти два уравнения независимы, поскольку $\bar{\hat{c}}_\alpha(\tau)$ и $\hat{c}_\alpha(\tau)$ не связаны эрмитовым сопряжением). Температурная ФГ определяется аналогично временной, но в новом мнимом времени:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) &\equiv -\langle \mathbb{T}_\tau \hat{c}_\alpha(\tau_1) \bar{\hat{c}}_\beta(\tau_2) \rangle = \\ &= -\theta(\tau_1 - \tau_2) \langle \hat{c}_\alpha(\tau_1) \bar{\hat{c}}_\beta(\tau_2) \rangle + \theta(\tau_2 - \tau_1) \langle \bar{\hat{c}}_\beta(\tau_2) \hat{c}_\alpha(\tau_1) \rangle \end{aligned} \quad (1.16)$$

В силу инвариантности по отношению к сдвигу во времени, а значит, и во мнимом времени, $\mathcal{G}_{\alpha\beta}$ зависит от $\tau = \tau_1 - \tau_2$, и ее можно преобразовать

следующим образом:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau) = \begin{cases} -(1/Z) \text{Sp}[e^{-\tau\hat{H}}\hat{c}_\beta^\dagger e^{-(1/T-\tau)\hat{H}}\hat{c}_\alpha], & \tau > 0 \\ (1/Z) \text{Sp}[e^{-(1/T-\tau)\hat{H}}\hat{c}_\beta^\dagger e^{-\tau\hat{H}}\hat{c}_\alpha], & \tau < 0 \end{cases} \quad (1.17)$$

Эти выражения полностью вещественные, поскольку не содержат мнимой единицы явно, а собственный базис гамильтониана всегда можно выбрать так, чтобы вещественными были и все элементы $\hat{c}_\alpha, \hat{c}_\beta^\dagger$.

Переменная τ фактически пробегает значения лишь в интервале $-1/T \leq \tau \leq 1/T$, причем температурная ФГ удовлетворяет условию антипериодичности:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau) = -\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau + 1/T), \quad \text{для } \tau < 0 \quad (1.18)$$

Это условие позволяет представить $\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau)$ в виде ряда Фурье по фермионным мацубаровским частотам $\omega_n = (2n + 1)\pi T$:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau) = T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n\tau} \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\omega_n) \quad (1.19)$$

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\omega_n) = \int_0^{1/T} e^{i\omega_n\tau} \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau) d\tau \quad (1.20)$$

По аналогии с (1.7) для температурной ФГ имеем:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\omega_n) = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \frac{\langle n|\hat{c}_\alpha|m\rangle\langle m|\hat{c}_\beta^\dagger|n\rangle + \langle n|\hat{c}_\beta^\dagger|m\rangle\langle m|\hat{c}_\alpha|n\rangle}{i\omega_n - (E_m - E_n)} (e^{-E_m/T} + e^{-E_n/T}) \quad (1.21)$$

Сравнивая (1.7) и (1.21), приходим к важному результату:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\omega_n) = G_{\alpha\beta}^R(i\omega_n), \quad \omega_n > 0 \quad (1.22)$$

Он означает, что описания динамики средствами функций G^R и \mathcal{G} полностью эквивалентны, и переход от одного к другому осуществляется аналитическим продолжением G^R с набора точек верхней мнимой полуоси ω_n на вещественную ось.

1.1.3. Двухчастичные функции Грина

В двух предыдущих параграфах рассматривались динамические величины, характеризующие одночастичные возбуждения в системе многих взаимодействующих фермионов. Описанный подход можно развить, введя корреляционные функции более высоких (четных) порядков. Наиболее востребованными, как правило, являются четырехточечные корреляционные функции (двухчастичные ФГ), поскольку по предположению взаимодействие в гамильтониане (1.1) — парное, включает только квартичные по \hat{c}, \hat{c}^\dagger члены.

Двухчастичные ФГ для реального и мнимого времени определены по аналогии с $G_{\alpha\beta}(t_1, t_2)$ и $\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2)$:

$$\chi_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}(t_1, t_2, t_3, t_4) = \langle \mathbb{T} \hat{c}_\alpha(t_1) \hat{c}_\beta(t_2) \hat{c}_\gamma^\dagger(t_3) \hat{c}_\delta^\dagger(t_4) \rangle \quad (1.23)$$

$$\chi_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) = \langle \mathbb{T}_\tau \hat{c}_\alpha(\tau_1) \hat{c}_\beta(\tau_2) \hat{c}_\gamma^\dagger(\tau_3) \hat{c}_\delta^\dagger(\tau_4) \rangle \quad (1.24)$$

Частотное представление и свойства этих функций можно анализировать, работая в гамильтоновой картине квантовой механики. Однако гораздо удобнее использовать как для этой задачи, так и для многих других формулировку в терминах континуальных интегралов.

1.2. Аппарат фермионных континуальных интегралов

1.2.1. Общие сведения

Понятие континуального интеграла было введено в теоретическую физику П. Дираком в 1933 году [24]. Дирак преследовал цель построить квантовую механику, исходя из механики классической в ее лагранжевой форме, более общей и фундаментальной, чем гамильтонова форма. В полной мере эта задача была решена Р. Фейнманом к 1948 году [25], с чьим именем теперь и связывают этот формализм.

Согласно Фейнману, квантово-механическая частица может двигаться одновременно по бесконечному числу траекторий $\mathbf{x}(t)$, что на самом деле является одной из возможных физических интерпретаций двухщелевого эксперимента. Если частица в момент времени t_a находилась в точке \mathbf{x}_a , а к моменту t_b она оказывается в точке \mathbf{x}_b , то ее траектории сопоставляется амплитуда вероятности, имеющая, по постулату, экспоненциальную форму $\exp(iS[\mathbf{x}(t)]/\hbar)$, где $S[\mathbf{x}(t)]$ — классический функционал действия. Полная амплитуда перехода есть сумма (интеграл) по всем возможным траекториям, а вероятность перехода — квадрат модуля амплитуды:

$$K(\mathbf{x}_a, t_a; \mathbf{x}_b, t_b) = \int_{\mathbf{x}_a(t_a)}^{\mathbf{x}_b(t_b)} \exp\left(i\frac{S[\mathbf{x}(t)]}{\hbar}\right) \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)], \quad P(\mathbf{x}_a, t_a; \mathbf{x}_b, t_b) = |K(\mathbf{x}_a, t_a; \mathbf{x}_b, t_b)|^2 \quad (1.25)$$

Хотя подход не был безукоризненным с математической точки зрения (понятие меры континуального интеграла требует уточнения), он наглядно иллюстрировал идею квантовой интерференции и делал более интуитивным переход от классической механики к квантовой (в частности, квазиклассическое приближение соответствует вычислению интеграла по траекториям методом стационарной фазы [26]).

Кроме того, при заданном действии не составляет труда с помощью интегралов по траекториям сформулировать задачу о равновесной статистике соответствующей системы. Для этого достаточно выполнить виковский поворот к переменной $\tau = it/\hbar$, меняющейся на отрезке $[0; 1/T]$. До поворота имели амплитуду перехода частицы из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$ за время t :

$$\langle f, t | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | i, 0 \rangle = \int_{|i\rangle}^{|f\rangle} \exp\left(i\frac{S[\mathbf{x}(t)]}{\hbar}\right) \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)], \quad S[\mathbf{x}(t)] = \int_0^t dt' (\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - H(\mathbf{x}, \mathbf{p})) \quad (1.26)$$

Статистическая сумма той же системы представима в виде

$$Z = \text{Sp}[e^{-\hat{H}/T}] = \sum_{\lambda} \langle \lambda, t | e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} | \lambda, 0 \rangle |_{t=-i(\hbar/T)}, \quad (1.27)$$

т.е. в виде интеграла по всем замкнутым траекториям $|\lambda\rangle \mapsto |\lambda\rangle$ во мнимом времени τ :

$$Z = \int_{|\lambda\rangle}^{|\lambda\rangle} \exp(-S_E[\mathbf{x}(\tau)]) \mathcal{D}[\mathbf{x}(\tau)], \quad S_E[\mathbf{x}(\tau)] = \int_0^{1/T} d\tau \left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \partial_\tau \mathbf{x} + H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \right) \quad (1.28)$$

Аппарат континуальных интегралов был обобщен для случая систем многих тождественных частиц и квантованных полей, став незаменимым инструментом в квантовой теории. В настоящее время имеется весьма обширная литература, посвященная как техническим вопросам интегрирования по траекториям, так и многочисленным применениям континуальных интегралов в квантовой и статической физике (и смежных дисциплинах) [27–29]. Далее мы подробно рассмотрим только фермионные интегралы в реальном и мнимом времени, необходимые для изложения оригинальных результатов диссертации.

1.2.2. Алгебра Грассмана

Согласно принципу Паули, волновая функция системы фермионов должна быть полностью антисимметрична по отношению к перестановке любых двух частиц. Благодаря этому свойству фермионы, в отличие от бозонов, являются исключительно квантовыми объектами и не имеют корректного классического предела. С ним же связан тот факт, что для последовательного построения фермионного континуального интеграла необходимо вместо вещественных функций времени (траекторий или полей) рассматривать в качестве степеней свободы элементы особой антикоммумутативной алгебры — алгебры Грассмана.

Впервые континуальный интеграл в терминах антикоммутирующих переменных был получен Дж.Л. Мартином в 1959 году [30]. Подробный математический аппарат был разработан Ф.А. Березиным в 1960х годах [31].

Далее кратко излагается вывод и свойства фермионных континуальных интегралов, в основном следуя главе 13 книги [32].

Пусть имеется единственное одночастичное состояние, в котором может находиться не более одного фермиона. Ему ставятся в соответствие операторы \hat{c} и \hat{c}^\dagger . Известно, что фермиевский оператор уничтожения не имеет собственных значений на множестве комплексных чисел. Однако можно формально записать его левый собственный вектор (и правый собственный вектор \hat{c}^\dagger), используя грассмановы переменные \bar{c}, c в качестве коэффициентов разложения по состояниям $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Грассмановы переменные — образующие алгебры Грассмана — по определению антикоммутируют друг с другом, с операторами рождения/уничтожения и состояниями $|0\rangle, |1\rangle$:

$$\begin{aligned} c\bar{c} + \bar{c}c &= 0, & c^2 &= 0, & \bar{c}^2 &= 0, \\ c\hat{c} + \hat{c}c &= 0, & c\hat{c}^\dagger + \hat{c}^\dagger c &= 0, & \bar{c}\hat{c} + \hat{c}\bar{c} &= 0, & \bar{c}\hat{c}^\dagger + \hat{c}^\dagger\bar{c} &= 0, \\ c|0\rangle + |0\rangle c &= 0, & c|1\rangle + |1\rangle c &= 0, & \bar{c}|0\rangle + |0\rangle\bar{c} &= 0, & \bar{c}|1\rangle + |1\rangle\bar{c} &= 0 \end{aligned} \quad (1.29)$$

Функция от набора грассмановых переменных определяется через соответствующее формальное разложение в степенной ряд. Поскольку квадрат, а значит, и высшие степени переменной равны нулю, любая функция нескольких грассмановых переменных линейна по каждой из них и содержит конечное число членов в степенном разложении. Например, в случае двух переменных

$$f(\bar{c}, c) = f_0 + \bar{c}f_{\bar{c}} + f_c c + f_{\bar{c}c}\bar{c}c, \quad \forall f \quad (1.30)$$

Используя данные определения, можно записать искомые собственные

векторы (фермионные когерентные состояния) в явном виде:

$$\begin{aligned}
|c\rangle &= e^{\hat{c}^\dagger c}|0\rangle = |0\rangle - c|1\rangle, \quad \hat{c}|c\rangle = c|c\rangle \\
\langle\bar{c}| &= \langle 0|e^{\bar{c}\hat{c}} = \langle 0| - \langle 1|\bar{c}, \quad \langle\bar{c}|\hat{c}^\dagger = \langle\bar{c}|\bar{c} \\
\langle\bar{c}|c\rangle &= 1 + \bar{c}c = e^{\bar{c}c}
\end{aligned} \tag{1.31}$$

Интеграл и производная от функции по грассмановой переменной вводятся аксиоматически:

$$\int dc1 = \partial_c 1 = 0, \quad \int dcc = \partial_c c = 1 \tag{1.32}$$

(можно сказать, что определение интеграла инвертировано по отношению к обычному интегралу $\int_{-1/2}^{1/2} dx$).

Через интегралы по грассмановым переменным можно выразить разложение единицы

$$\int d\bar{c}dc|c\rangle\langle\bar{c}|e^{-\bar{c}c} = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = 1 \tag{1.33}$$

и след нормально упорядоченного оператора, являющегося функцией \hat{c}, \hat{c}^\dagger :

$$\text{Sp}[\hat{A}] = \int d\bar{c}dce^{-\bar{c}c}\langle-\bar{c}|\hat{A}|c\rangle \tag{1.34}$$

Если подынтегральная функция зависит от $2P$ переменных, кратный интеграл по любым $2\tilde{P}$ из них ($\tilde{P} \leq P$) понимается как повторный. При замене переменных в кратном интеграле якобиан преобразования вычисляется как для обычного кратного интеграла, но берется в минус первой степени:

$$\begin{aligned}
c_p &= f_p(\xi_1, \dots, \xi_P), \quad \forall 1 \leq p \leq P \\
J\left(\frac{c_1, \dots, c_P}{\xi_1, \dots, \xi_P}\right) &= \det \left\| \frac{f_p}{\xi_q} \right\|_{pq}^{-1}
\end{aligned} \tag{1.35}$$

Наконец, очень часто используемая на практике формула — интеграл от многомерной гауссовой функции:

$$\int \prod_{p=1}^P d\bar{c}_p dc_p \exp \left[- \sum_{p,q=1}^P \bar{c}_p M_{pq} c_q - \sum_{p=1}^P (\bar{\xi}_p c_p + \bar{c}_p \xi_p) \right] = \det M \exp \left[\sum_{p,q=1}^P \bar{\xi}_p M_{pq}^{-1} \xi_q \right] \tag{1.36}$$

1.2.3. Определение и свойства фермионного континуального интеграла

Используя определение и алгебраические свойства грассмановых переменных, можно перейти к решению физической задачи — записать в форме континуального интеграла и вычислить статистическую сумму простой гамильтоновой системы. В качестве примера рассмотрим один фермионный осциллятор — систему с гамильтонианом

$$\hat{H} = \varepsilon \hat{c}^\dagger \hat{c} \quad (1.37)$$

Разобьем отрезок мнимого времени $\tau \in [0; \beta]$ ($\beta \equiv 1/T$ согласно распространенной нотации) на N равных частей длиной $\Delta\tau = \beta/N$. Тогда след из определения (1.27) запишется в виде

$$Z = \text{Sp}[(e^{-\Delta\tau\hat{H}})^N] \quad (1.38)$$

Вставляя между временными “слоями” разложения единицы (1.33) и используя выражение для следа (1.34), получаем промежуточное представление статсуммы

$$Z = - \int d\bar{c}_N dc_1 e^{\bar{c}_N c_1} \prod_{j=1}^{N-1} d\bar{c}_j dc_{j+1} e^{-\bar{c}_j c_{j+1}} \prod_{j=1}^N \langle \bar{c}_j | e^{-\hat{H}\Delta\tau} | c_j \rangle, \quad (1.39)$$

где первый интеграл возникает из выражения для следа, а остальные — из разложений единицы. Если теперь дополнительно определить переменную $c_{N+1} = -c_1$, т.е. задать антипериодическое граничное условие для c_j на концах отрезка $[0; \beta]$, выражение упрощается:

$$Z = \int \prod_{j=1}^N d\bar{c}_j dc_{j+1} e^{-\bar{c}_j c_{j+1}} \langle \bar{c}_j | e^{-\hat{H}\Delta\tau} | c_j \rangle \quad (1.40)$$

Поскольку гамильтониан (1.37) нормально упорядочен (оператор \hat{c}^\dagger стоит левее \hat{c}), матричный элемент из предыдущей формулы легко выражается

через грасмановы переменные с использованием определения когерентных состояний (1.31):

$$\langle \bar{c}_j | e^{-\hat{H}\Delta\tau} | c_j \rangle = e^{\bar{c}_j c_j} e^{-H[\bar{c}_j, c_j]\Delta\tau} + O(\Delta\tau^2), \quad H[\bar{c}, c] = \varepsilon \bar{c} c \quad (1.41)$$

В пределе $N \rightarrow \infty$ (бесконечно тонкие “слои”, континуальный предел) можно пренебречь квадратичными по $\Delta\tau$ слагаемыми:

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N d\bar{c}_j d c_j \exp[-S] \quad (1.42)$$

$$S = \sum_{j=1}^N \left[\bar{c}_j (c_{j+1} - c_j) / \Delta\tau + \varepsilon \bar{c}_j c_j \right] \Delta\tau$$

Действие здесь записано все еще в разностном виде. Переход к дифференциальной форме осуществляется по правилам

$$\bar{c}_j (c_j - c_{j-1}) / \Delta\tau \rightarrow \bar{c}(\tau) \partial_\tau c(\tau)$$

$$\sum_{j=1}^N \Delta\tau \rightarrow \int_0^\beta d\tau \quad (1.43)$$

Окончательно для статистической суммы имеем

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

$$\mathcal{D}[\bar{c}, c] \equiv \prod_{\tau} d\bar{c}(\tau) d c(\tau) \quad (1.44)$$

$$S = \int_0^\beta d\tau [\bar{c}(\tau) (\partial_\tau + \varepsilon) c(\tau)]$$

По сути, континуальный интеграл и его мера здесь — лишь нотация, скрывающая предельную процедуру, подробно описанную выше. Условие антипериодичности переменных на границах временного отрезка сохраняется и в континуальном пределе:

$$c(\tau + \beta) = -c(\tau), \quad \bar{c}(\tau + \beta) = -\bar{c}(\tau) \quad (1.45)$$

Это условие позволяет разложить “траектории” $\bar{c}(\tau)$ и $c(\tau)$ в ряд по мацу-баровским частотам, подобно тому, как это было сделано для температурной функции Грина (1.19):

$$c(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{-i\omega_n \tau} \quad (1.46)$$

$$\bar{c}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \bar{c}_n e^{i\omega_n \tau} \quad (1.47)$$

В новых переменных действие является диагональной квадратичной формой переменных \bar{c}_n, c_n . Поэтому можно воспользоваться формулой (1.36) для явного вычисления статсуммы:

$$S = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \bar{c}_n (-i\omega_n + \varepsilon) c_n \quad (1.48)$$

$$Z = \int \prod_{n=-\infty}^{+\infty} d\bar{c}_n dc_n \exp[-S] = \det_n [-i\omega_n + \varepsilon] = \prod_{n=-\infty}^{+\infty} (-i\omega_n + \varepsilon) \quad (1.49)$$

Последний переход содержит математическую неточность. Итоговое произведение, строго говоря, расходится и не может быть вычислено. Такая ситуация — возникновение бесконечных множителей — типична при работе с континуальными интегралами. Обычно эту трудность обходят, апеллируя к тому, что статистическая сумма определена с точностью до мультипликативной константы (а соответствующая свободная энергия — с точностью до аддитивной константы). Чтобы отбросить эту константу, нужно в выражение для свободной энергии ввести регуляризующий фактор $e^{i\omega_n 0^+}$:

$$F \equiv -\frac{1}{\beta} \ln Z = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \ln(\varepsilon - i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+} \quad (1.50)$$

Техника вычисления таких сумм хорошо разработана (сведение к контурным интегралам по методу Ватсона). Конечный ответ, как то и должно быть, совпадает с результатом прямой диагонализации гамильтониана \hat{H} :

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln(1 + e^{-\beta\varepsilon}) \quad (1.51)$$

Подробно правила работы с фермионными детерминантами и возникающими при их вычислении бесконечностями описаны, например, в параграфе 7.11 книги [27].

Хотя здесь была рассмотрена наипростейшая модельная система, полученные выражения остаются в силе для произвольного нормально упорядоченного гамильтониана и для любого числа фермионных мод:

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

$$\mathcal{D}[\bar{c}, c] \equiv \prod_{\alpha, \tau} d\bar{c}_\alpha(\tau) dc_\alpha(\tau) \quad (1.52)$$

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_\alpha \bar{c}_\alpha(\tau) \partial_\tau c_\alpha(\tau) + H[\bar{c}, c] \right]$$

Разумеется, на языке континуальных интегралов можно выражать не только статистические суммы, но и всевозможные средние значения. Очень часто для этой цели вводится производящий функционал:

$$\mathcal{Z}[\bar{j}, j] = \int \mathcal{D}[\bar{c}, c] \exp \left[-S + \int_0^\beta d\tau \sum_\alpha (\bar{c}_\alpha(\tau) j_\alpha(\tau) + \bar{j}_\alpha(\tau) c_\alpha(\tau)) \right] \quad (1.53)$$

Производящий функционал зависит от грассмановых “источников” $\bar{j}_\alpha(\tau)$, $j_\alpha(\tau)$ или, эквивалентно, $\bar{j}_{\alpha n}$, $j_{\alpha n}$. Варьируя $\mathcal{Z}[\bar{j}, j]$ по ним, можно получить выражение для температурной ФГ или любых других корреляторов более высоких порядков:

$$\left. \frac{\delta \ln \mathcal{Z}}{\delta \bar{j}_\alpha(\tau)} \right|_{j=\bar{j}=0} = \langle c_\alpha(\tau) \rangle, \quad \left. \frac{\delta \ln \mathcal{Z}}{\delta j_\beta(\tau)} \right|_{j=\bar{j}=0} = \langle \bar{c}_\beta(\tau) \rangle \quad (1.54)$$

$$\left. \frac{\delta^2 \ln \mathcal{Z}}{\delta j_\beta(\tau_2) \delta \bar{j}_\alpha(\tau_1)} \right|_{j=\bar{j}=0} = \langle \mathbb{T}_\tau c_\alpha(\tau_1) \bar{c}_\beta(\tau_2) \rangle - \langle c_\alpha(\tau) \rangle \langle \bar{c}_\beta(\tau) \rangle \quad (1.55)$$

Для любого гамильтониана вида (1.1) средние от одиночных переменных равны нулю, и вторая вариация \mathcal{Z} с точностью до знака совпадает с температурной функцией Грина. Важно отметить, что τ -упорядочение в определе-

нии (1.16) “отрабатывается” автоматически при использовании континуального интеграла.

Если действие — квадратичная форма фермионных переменных (система без взаимодействия между частицами), то производящий функционал, а значит, и все средние, вычисляется точно с использованием формулы (1.36). Например, для одного фермионного осциллятора имеем:

$$\mathcal{Z}[\bar{j}, j] = \prod_{n=-\infty}^{+\infty} (-i\omega_n + \varepsilon) \exp \left[\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \bar{j}_n (-i\omega_n + \varepsilon)^{-1} j_n \right] \quad (1.56)$$

$$\mathcal{G}(\omega_n) = - \left. \frac{\delta^2 \ln \mathcal{Z}}{\delta j_n \delta \bar{j}_n} \right|_{j=\bar{j}=0} = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon} \quad (1.57)$$

Этот результат совпадает с тем, что получается в гамильтоновой картине по формуле (1.21).

1.2.4. Теория возмущений по взаимодействию

Континуальные интегралы особенно удобны при формулировании диаграммной теории возмущений по взаимодействию. Связано это с двумя фактами. Во-первых, все выражения можно сразу записывать в терминах мацубаровских (или реальных) частот, в то время, как в гамильтоновом формализме необходимо стартовать с временного представления. Во-вторых, без каких-либо усложнений можно рассматривать функционалы действия, не имеющие гамильтоновых аналогов — системы с запаздыванием.

Рассмотрим действие, отвечающее гамильтониану (1.1), и разобьем его на квадратичную часть и часть со взаимодействием $S = S_0 + S_{int}$:

$$S_0 = - \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{\alpha\beta} \bar{c}_{\alpha n} [\hat{\mathcal{G}}^0(\omega_n)]_{\alpha\beta}^{-1} c_{\beta n}, \quad \mathcal{G}_{\alpha\beta}^0(\omega_n) = (i\omega_n + \mu - \hat{h})_{\alpha\beta}^{-1} \quad (1.58)$$

$$S_{int} = \frac{1}{2\beta} \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ n_3 n_4}} \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \gamma\delta}} \delta_{\omega_{n_1} + \omega_{n_2} - \omega_{n_3} - \omega_{n_4}} U_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{c}_{\alpha n_1} \bar{c}_{\beta n_2} c_{\gamma n_3} c_{\delta n_4} \quad (1.59)$$

δ -символ в S_{int} возникает в результате преобразования Фурье и выражает собой закон сохранения энергии. Теория возмущений для статсуммы состоит в разложении континуального интеграла в (1.44) по S_{int} :

$$Z = \sum_{K=0}^{+\infty} \frac{1}{K!} \int \mathcal{D}[\bar{c}, c] \left(\frac{-1}{2\beta} \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ n_3 n_4}} \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \gamma\delta}} \delta_{\omega_{n_1} + \omega_{n_2} - \omega_{n_3} - \omega_{n_4}} U_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{c}_{\alpha n_1} \bar{c}_{\beta n_2} c_{\gamma n_3} c_{\delta n_4} \right)^K e^{-S_0} \quad (1.60)$$

Поскольку действие S_0 квадратично по фермионным переменным, среднее от любого произведения переменных, фигурирующего в разложении, можно вычислить точно, используя соответствующий производящий функционал:

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}[\bar{c}, c] \bar{c}_{\alpha_1 n_1} c_{\beta_1 m_1} \dots \bar{c}_{\alpha_{2K} n_{2K}} c_{\beta_{2K} m_{2K}} e^{-S_0} = \\ = Z_0 \det \begin{vmatrix} \delta_{n_1 m_1} \mathcal{G}_{\alpha_1 \beta_1}^0(\omega_{n_1}) & \dots & \delta_{n_1 m_{2K}} \mathcal{G}_{\alpha_1 \beta_{2K}}^0(\omega_{n_1}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta_{n_{2K} m_1} \mathcal{G}_{\alpha_{2K} \beta_1}^0(\omega_{n_{2K}}) & \dots & \delta_{n_{2K} m_{2K}} \mathcal{G}_{\alpha_{2K} \beta_{2K}}^0(\omega_{n_{2K}}) \end{vmatrix} \quad (1.61) \end{aligned}$$

Статистическая сумма Z_0 и функция Грина $\mathcal{G}_{\alpha\beta}^0(\omega_n)$ отвечают невозмущенной задаче с действием S_0 . Последнее тождество составляет утверждение теоремы Вика для фермионов [19]. Из него следует, что поправка k -го порядка теории возмущений состоит из $(2K)!$ слагаемых, некоторые из которых, однако, совпадают с точностью до переобозначения индексов суммирования в (1.60).

При вычислении поправок обычно прибегают к средствам диаграммной техники, в которой каждой группе эквивалентных слагаемых сопоставляется график. Например, выпишем явно поправку первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{Z}{Z_0} = 1 - \frac{1}{1!} \frac{1}{2\beta} \sum_{n_1 n_2} \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \gamma\delta}} U_{\alpha\beta\gamma\delta} [\mathcal{G}_{\alpha\gamma}^0(\omega_{n_1}) \mathcal{G}_{\beta\delta}^0(\omega_{n_2}) - \mathcal{G}_{\alpha\delta}^0(\omega_{n_1}) \mathcal{G}_{\beta\gamma}^0(\omega_{n_2})] + \dots = \\ = 1 - \frac{1}{\beta} \sum_{n_1 n_2} \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \gamma\delta}} U_{\alpha\beta\gamma\delta} \mathcal{G}_{\alpha\gamma}^0(\omega_{n_1}) \mathcal{G}_{\beta\delta}^0(\omega_{n_2}) + \dots \quad (1.62) \end{aligned}$$

Здесь оба слагаемых первой поправки сведены к одному с учетом свойства антисимметрии $U_{\alpha\beta\gamma\delta} = -U_{\alpha\beta\delta\gamma}$. Выражение (1.62) представляется в графическом виде так:

$$\frac{Z}{Z_0} = 1 + \text{diagram} + \dots \quad (1.63)$$

Тонкие стрелки означают затравочные функции Грина $\mathcal{G}_{\alpha\beta}^0(\omega_n)$, а вершины графика — $(-U_{\alpha\beta\gamma\delta})$:

$$\begin{aligned} \alpha\omega_{n_1} \longleftarrow \beta\omega_{n_2} &= \delta_{\omega_{n_1}-\omega_{n_2}} \mathcal{G}_{\alpha\beta}^0(\omega_{n_1}) \\ \begin{array}{c} \delta\omega_{n_4} \quad \alpha\omega_{n_1} \\ \bullet \\ \beta\omega_{n_2} \quad \gamma\omega_{n_3} \end{array} &= -U_{\alpha\beta\gamma\delta} \delta_{\omega_{n_1}+\omega_{n_2}-\omega_{n_3}-\omega_{n_4}} \end{aligned} \quad (1.64)$$

В каждой вершине производится суммирование $\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_{n_1}\omega_{n_2}\omega_{n_3}\omega_{n_4}}$. Коэффициент перед диаграммой равен $P/(2^K K!)$, где P — количество эквивалентных слагаемых, описываемых этой диаграммой. Например, поправка второго порядка к Z дается тремя диаграммами:

$$\frac{1}{2} \text{diagram1} + \frac{1}{2} \text{diagram2} + 2 \text{diagram3} \quad (1.65)$$

Аналогичный диаграммный ряд можно сопоставить функции

$$\begin{aligned} (Z/Z_0)\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\omega_n) &= \\ &= \frac{1}{Z_0} \sum_{K=0}^{+\infty} \frac{1}{K!} \int \mathcal{D}[\bar{c}, c] (-c_{\alpha n} \bar{c}_{\beta n}) \left(\frac{-1}{2\beta} \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ n_3 n_4}} \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \gamma\delta}} \delta_{\omega_{n_1}+\omega_{n_2}-\omega_{n_3}-\omega_{n_4}} U_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{c}_{\alpha n_1} \bar{c}_{\beta n_2} c_{\gamma n_3} c_{\delta n_4} \right)^K e^{-S_0} \end{aligned} \quad (1.66)$$

Отличие состоит в том, что теперь каждая диаграмма имеет один вход и один выход с фиксированными значениями индексов α, β и частоты ω_n . Диаграммы

для $(Z/Z_0)\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\omega_n)$ до первого порядка включительно:

$$\leftarrow + \left(\leftarrow \bullet \leftarrow \right) + 2 \left(\leftarrow \bullet \leftarrow \right) \quad (1.67)$$

Сравнивая диаграммные ряды для $(Z/Z_0)\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\omega_n)$ и Z/Z_0 , можно заметить следующий факт. Каждому несвязанному графику из первого разложения соответствует некоторый график из второго (с тем же коэффициентом), повторяющий структуру несвязанной части. Связанным графикам первого разложения соответствует единица из второго. Таким образом, можно поделить два ряда друг на друга и получить, что разложение температурной ФГ $\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\omega_n)$ состоит из всех связанных диаграмм с одним входом и одним выходом. Это утверждение называется теоремой о несвязанных диаграммах.

Далее рассмотрим все диаграммы для температурной ФГ, которые нельзя разделить на две части, соединенные лишь одной стрелкой. Сумма всех таких диаграмм называется функцией собственной энергии $\Sigma_{\alpha\beta}(\omega_n)$, а соответствующий блок на диаграммах обозначается кружком. Выделение такого графического блока позволяет записать полную ФГ (жирная стрелка) в виде ряда:

$$\leftarrow = \leftarrow + \leftarrow \bullet \leftarrow + \leftarrow \bullet \leftarrow \bullet \leftarrow + \dots = \leftarrow \bullet \leftarrow \quad (1.68)$$

Или в формульном виде

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\omega_n) = \mathcal{G}_{\alpha\beta}^0(\omega_n) + \sum_{\gamma\delta} \mathcal{G}_{\alpha\gamma}(\omega_n) \Sigma_{\gamma\delta}(\omega_n) \mathcal{G}_{\delta\beta}^0(\omega_n) \quad (1.69)$$

Это уравнение называется уравнением Дайсона. Оно решается с помощью операции обращения матриц:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\omega_n) = \left(\frac{1}{[\hat{\mathcal{G}}^0(\omega_n)]^{-1} - \hat{\Sigma}(\omega_n)} \right)_{\alpha\beta} \quad (1.70)$$

Из уравнения Дайсона следует, что собственная энергия описывает изменение динамики частиц за счет взаимодействия: если взаимодействия нет, то полная ФГ совпадает с затравочной, и $\Sigma_{\alpha\beta}(\omega_n)$ тождественно обращается в нуль.

Диаграмматику можно использовать для вычисления и идентификации физически различных вкладов в корреляторы высших порядков. В рамках данной работы потребуется вычислять двухчастичную ФГ в частотном представлении:

$$\chi_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}, \omega_{n_3}, \omega_{n_4}) = \langle c_{\alpha n_1} c_{\beta n_2} \bar{c}_{\gamma n_3} \bar{c}_{\delta n_4} \rangle_S \quad (1.71)$$

Среди всех диаграмм с двумя входами и двумя выходами, образующих ряд теории возмущений для этой величины, можно выделить вклад, сводящийся к движению двух частиц без рассеяния друг на друге (виковская часть):

$$\chi_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}, \omega_{n_3}, \omega_{n_4}) = \beta \left[\begin{array}{c} \alpha\omega_{n_1} \longleftarrow \delta\omega_{n_4} \\ \beta\omega_{n_2} \longleftarrow \gamma\omega_{n_3} \end{array} - \begin{array}{c} \alpha\omega_{n_1} \longleftarrow \delta\omega_{n_4} \\ \beta\omega_{n_2} \longleftarrow \gamma\omega_{n_3} \end{array} \right] + \begin{array}{c} \alpha\omega_{n_1} \swarrow \delta\omega_{n_4} \\ \beta\omega_{n_2} \swarrow \gamma\omega_{n_3} \\ \gamma^{(4)} \\ \beta\omega_{n_2} \swarrow \alpha\omega_{n_1} \\ \gamma\omega_{n_3} \swarrow \delta\omega_{n_4} \end{array} \quad (1.72)$$

Блок $\gamma^{(4)}$, включающий все процессы двухчастичного рассеяния, называется неприводимой вершинной частью 4-го порядка:

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}, \omega_{n_3}, \omega_{n_4}) &= \\ &= \sum_{\alpha'\beta'\gamma'\delta'} [\hat{\mathcal{G}}(\omega_{n_1})]_{\alpha\alpha'}^{-1} [\hat{\mathcal{G}}(\omega_{n_2})]_{\beta\beta'}^{-1} \Gamma_{\alpha'\beta'\gamma'\delta'}^{(4)}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}, \omega_{n_3}, \omega_{n_4}) [\hat{\mathcal{G}}(\omega_{n_3})]_{\gamma'\gamma}^{-1} [\hat{\mathcal{G}}(\omega_{n_4})]_{\delta'\delta}^{-1} \\ &\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}, \omega_{n_3}, \omega_{n_4}) \equiv \chi_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}, \omega_{n_3}, \omega_{n_4}) - \\ &- \beta\delta_{\omega_{n_1}-\omega_{n_4}} \delta_{\omega_{n_2}-\omega_{n_3}} \mathcal{G}_{\alpha\delta}(\omega_{n_1}) \mathcal{G}_{\beta\gamma}(\omega_{n_2}) + \beta\delta_{\omega_{n_1}-\omega_{n_3}} \delta_{\omega_{n_2}-\omega_{n_4}} \mathcal{G}_{\alpha\gamma}(\omega_{n_1}) \mathcal{G}_{\beta\delta}(\omega_{n_2}) \end{aligned} \quad (1.73)$$

Результаты данного параграфа без труда переносятся на случай вещественных частот при нулевой температуре. Правила преобразования формул включают 3 пункта:

1. замена сумм по мацубаровским частотам на интегралы: $\frac{1}{\beta} \sum \omega_n \mapsto \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon$;
2. замена δ -символов Кронекера на δ -функции: $\beta \delta_{\Omega} \mapsto \delta(\Omega)$
3. учет мнимой единицы, возникающей при переходе от e^{-S} к e^{iS} .

1.2.5. Преобразование к дуальным фермионам

Преобразование к дуальным переменным — тождественная замена переменных в континуальном интеграле, позволяющая формулировать теорию возмущений таким образом, чтобы нулевое ее приближение было ближе к точному решению задачи, нежели для случая обычной теории возмущений по взаимодействию.

Этот прием был сформулирован А.Н. Рубцовым сначала в рамках классической статистической физики [33], а затем и для систем взаимодействующих электронов [34, 35]. В этом параграфе процедура дуального преобразования излагается в общем виде. Ее конкретные физические применения будут рассмотрены ниже.

Пусть динамика системы многих фермионов определяется действием $S[\bar{c}, c]$. Разобьем это действие на сумму двух слагаемых: точно решаемого S_{ref} и квадратичную форму переменных с матрицей \hat{D} :

$$S[\bar{c}, c] = S_{ref}[\bar{c}, c] + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha\beta} \bar{c}_{\alpha n} D_{\alpha\beta}(\omega_n) c_{\beta n} \quad (1.74)$$

(до конца этого параграфа подразумевается мацубаровское представление; формулы на реальной оси частот получаются по рецепту из предыдущего параграфа). Разумеется, разбиение неоднозначно и при построении конкретных приложений оставляет свободу выбора. Действие S_{ref} должно быть точно решаемым в том смысле, что для него возможно вычислить корреляционную функцию любого порядка с наперед заданной точностью.

Введем новый набор грассмановых переменных \bar{f}_α, f_α (дуальные фермионы). Новые переменные связываются со старыми посредством основного тождества дуального преобразования (немного обобщенная формула (1.36)):

$$\begin{aligned} & \exp\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha\beta} \bar{c}_{\alpha n} D_{\alpha\beta} c_{\beta n}\right) = \\ & = \det(\hat{B}\hat{D}\hat{B}) \int \mathcal{D}[\bar{f}, f] \exp\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha\beta} -\bar{f}_{\alpha n} [\hat{B}\hat{D}\hat{B}]_{\alpha\beta}^{-1} f_{\beta n} - \bar{c}_{\alpha n} [\hat{B}]_{\alpha\beta}^{-1} f_{\beta n} - \bar{f}_{\alpha n} [\hat{B}]_{\alpha\beta}^{-1} c_{\beta n}\right) \end{aligned} \quad (1.75)$$

Используя это тождество, статистическую сумму исходной системы можно записать в виде двойного континуального интеграла по новым и по старым переменным:

$$Z = \det(\hat{B}\hat{D}\hat{B}) \int \mathcal{D}[\bar{c}, c] \mathcal{D}[\bar{f}, f] \exp(-S[\bar{c}, c; \bar{f}, f]) \quad (1.76)$$

$$S[\bar{c}, c; \bar{f}, f] \equiv S_{ref} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha\beta} \bar{f}_{\alpha n} [\hat{B}\hat{D}\hat{B}]_{\alpha\beta}^{-1} f_{\beta n} + \bar{c}_{\alpha n} [\hat{B}]_{\alpha\beta}^{-1} f_{\beta n} + \bar{f}_{\alpha n} [\hat{B}]_{\alpha\beta}^{-1} c_{\beta n} \quad (1.77)$$

На следующем шаге необходимо избавиться от исходных переменных и прийти к дуальному действию:

$$Z = \det(\hat{B}\hat{D}\hat{B}) Z_{ref} \int \mathcal{D}[\bar{f}, f] \exp(-S^d[\bar{f}, f]) \quad (1.78)$$

Поскольку действие S_{ref} , вообще говоря, — произвольная функция \bar{c}, c , взять интеграл по ним невозможно. Однако можно разложить экспоненту в (1.76) по смешанному слагаемому $\bar{c}_{\alpha n} [\hat{B}]_{\alpha\beta}^{-1} f_{\beta n} + \bar{f}_{\alpha n} [\hat{B}]_{\alpha\beta}^{-1} c_{\beta n}$, вычислить образовавшиеся при этом корреляционные функции действия S_{ref} и свернуть полученный ряд обратно в экспоненциальную форму. Оказывается, что если в качестве $B_{\alpha\beta}$ взять точную ФГ действия S_{ref} (до этого \hat{B} была свободным параметром), то

дуальное действие, зависящее только от новых переменных будет иметь вид:

$$\begin{aligned}
S^d[\bar{f}, f] = & - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha\beta} \bar{f}_{\alpha n} [\hat{\mathcal{G}}^{d0}(\omega_n)]_{\alpha\beta}^{-1} f_{\beta n} - \\
& - \frac{1}{4} \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ n_3 n_4}} \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \gamma\delta}} \gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}, \omega_{n_3}, \omega_{n_4}) \bar{f}_{\alpha n_1} \bar{f}_{\beta n_2} f_{\gamma n_3} f_{\delta n_4} - \\
& - \frac{1}{36} \sum_{\substack{n_1 n_2 n_3 \\ n_4 n_5 n_6}} \sum_{\substack{\alpha\beta\gamma \\ \delta\mu\nu}} \gamma_{\alpha\beta\gamma\delta\mu\nu}^{(6)}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}, \omega_{n_3}, \omega_{n_4}, \omega_{n_5}, \omega_{n_6}) \bar{f}_{\alpha n_1} \bar{f}_{\beta n_2} \bar{f}_{\gamma n_3} f_{\delta n_4} f_{\mu n_5} f_{\nu n_6} - \dots \quad (1.79)
\end{aligned}$$

$$\hat{\mathcal{G}}^{d0}(\omega_n) \equiv -\hat{\mathcal{G}}(\omega_n)(\hat{\mathcal{G}}(\omega_n) + \hat{D}^{-1}(\omega_n))^{-1}\hat{\mathcal{G}}(\omega_n) \quad (1.80)$$

Здесь коэффициенты при нелинейных слагаемых — неприводимые вершинные части точно решаемой системы. Дуальное действие сложнее, чем исходное, т.к. содержит нелинейности всех порядков, а не только квартичные. При этом коэффициенты при нелинейностях могут зависеть от частот сложным образом. Тем не менее, теория возмущений с параметрами разложения $\gamma^{(4)}$, $\gamma^{(6)}$ и т.д. во многих случаях дает лучшие результаты, поскольку в затравочной дуальной ФГ $\hat{\mathcal{G}}^{d0}(\omega_n)$ и неприводимых вершинах уже “защита” более полная информация о динамике системы.

Существуют точные линейные соотношения, связывающие произвольную корреляционную функцию исходных фермионов с корреляционными функциями того же порядка для дуальных фермионов. В частности, для функции Грина имеем

$$\hat{\mathcal{G}}(\omega_n) = \hat{D}^{-1}(\omega_n) + (\hat{\mathcal{G}}(\omega_n)\hat{D}(\omega_n))^{-1}\hat{\mathcal{G}}^d(\omega_n)(\hat{D}(\omega_n)\hat{\mathcal{G}}(\omega_n))^{-1} \quad (1.81)$$

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}^d(\omega_n) \equiv -\langle f_{\alpha n} \bar{f}_{\beta n} \rangle_{S^d} \quad (1.82)$$

Эти соотношения означают, что дуальное действие $S^d[\bar{f}, f]$ предоставляет полностью эквивалентное описание исходной системы.

Исчерпывающе формализм дуального преобразования и его применения по состоянию на 2009 год описаны в книге [36].

1.3. Модель Андерсона для описания магнитных примесей в металле

1.3.1. Вывод модели

Основным объектом исследований в данной работе являются модели, описывающие поведение электронов в немагнитном металле в присутствии разреженных магнитных примесей (атомов Fe, Co, Ni, редкоземельных элементов). Уже небольшая добавка атомов примеси (0.1% и менее) вызывает возникновение в металле необычных физических явлений, характеристики которых в широких пределах не зависят от концентрации примесей. Среди таких явлений — появление минимума в зависимости проводимости металла от температуры (эффект Кондо), многократное возрастание низкотемпературной электронной теплоемкости, а также аномальное поведение других термодинамических и динамических свойств.

Причина всех этих необычных эффектов — влияние, оказываемое на электронный спектр атомами переходных и редкоземельных элементов с незамкнутыми внешними d - и f -оболочками. Изолированные атомы таких элементов обладают нескомпенсированным угловыми, а значит, и магнитными моментами на своих внешних оболочках. Кулоновское взаимодействие между электронами приводит к известным правилам Хунда, согласно которым, в частности, незаполненная оболочка должна иметь максимально возможный суммарный спин.

При помещении атома примеси в кристаллическую решетку дискретные атомные уровни превращаются в электронные подзоны, ширина которых, однако, значительно меньше, чем ширина s - и p -зон электронов проводимости. Природа взаимодействия между электронами, локализованными на примеси, и электронами проводимости может сильно меняться в зависимости от па-

раметров конкретного материала (сила кулоновского взаимодействия, ширина зоны проводимости), температуры или напряженности внешнего магнитного поля. Эти изменения на микроскопическом уровне обуславливают широкое разнообразие макроскопически наблюдаемых эффектов [37].

Исходя из первых принципов, можно построить гамильтониан, описывающий движение N электронов в кристалле в присутствии уединенной примеси [38]:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) + V_{\text{imp}}(\mathbf{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i=1}^N \lambda(\mathbf{r}_i) \mathbf{l}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_i \quad (1.83)$$

Первое слагаемое описывает кинетическую энергию электронов, второе — периодический потенциал кристаллической решетки без примеси. Третье слагаемое — это дополнительный потенциал, возникающий при замене одного из атомных ядер ядром примеси. Оставшиеся два члена описывают кулоновское и спин-орбитальное взаимодействия между электронами. Мы сразу же исключим из рассмотрения релятивистские эффекты и отбросим последнее слагаемое. Кроме того, на протяжении всей работы мы будем считать примеси именно уединенными (малая концентрация) и пренебрегать эффектами, обусловленными взаимным влиянием примесных атомов (в частности, РККИ-обменным взаимодействием [39, 40]).

Расчеты из первых принципов, стартующие с гамильтониана (1.83), очень сложны из-за сильного кулоновского отталкивания между частицами, которое невозможно учесть по теории возмущений. Для решения подобных задач была разработана теория функционала плотности (Density Functional Theory; DFT), получившая начало в работах П. Хоэнберга и У. Кона [41], а также У. Кона и Л.Дж. Шама [42]. В основе теории лежит утверждение (теорема Хоэнберга-Шама) о том, что энергия системы взаимодействующих электронов есть функционал их плотности $\rho(\mathbf{r})$, причем плотность, отвечающая волновой функции основного состояния, доставляет минимум функционалу. Кон и Шам

показали, что эту плотность можно вычислить, исходя из одночастичных уравнений, описывающих движение невзаимодействующих электронов во внешнем эффективном потенциале. Точный вид функционала энергии, а значит, и эффективного потенциала неизвестен; вместо него используют различные приближения, чаще всего — приближение локальной плотности (Local Density Approximation, LDA). Метод DFT(LDA) — удобный и широко используемый инструмент для расчета статических свойств (равновесной электронной плотности, теплоемкости, статических восприимчивостей) реальных материалов. Однако он плохо подходит для решения задач об атомах с нескомпенсированным магнитным моментом. Дело в том, что реальная плотность электронов в этом случае может быть очень далека от однородной (экранировка магнитного момента), что нарушает основное предположение LDA. К тому же, DFT не претендует на адекватное описание динамических электронных восприимчивостей, когда помимо свойств основного состояния необходимо надежно знать спектр элементарных возбуждений.

Вместо того, чтобы работать с первопринципным гамильтонианом (1.83), мы будем использовать модельный гамильтониан Андерсона [1], описывающий низколежащие возбуждения, связанные с влиянием примеси.

Рассмотрим простой металл (например, один из щелочных металлов), у которого широкая зона проводимости образована электронами из s -атомных состояний. Электроны в такой зоне можно рассматривать как невзаимодействующие частицы (точнее, квазичастицы), движущиеся в периодическом потенциале. В этой ситуации кулоновский потенциал взаимодействия эффективно экранируется на больших расстояниях (много больше периода решетки), давая вклад в не интересующие нас высокочастотные плазмонные возбуждения. Поскольку зона достаточно широкая, а состояния в ней делокализованы, мы также пренебрегаем и взаимодействием на малых расстояниях. Описанной картине можно сопоставить следующий простой гамильтониан в представле-

нии вторичного квантования:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (1.84)$$

Здесь операторы рождения и уничтожения соответствуют описанным квазичастицам с квазиимпульсом \mathbf{k} (блоховская волна $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$) и проекцией спина σ . Они удовлетворяют стандартным антикоммутационным соотношениям для фермионов:

$$\{\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'} \quad \{\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'}\} = 0 \quad (1.85)$$

Затравочный закон дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$ определяется структурой решетки.

Пусть теперь в начало координат помещен магнитный ион, с внешней d -оболочкой $\phi_d(\mathbf{r})$, имевшей энергию ε_d (соответствующие операторы обозначим $\hat{c}_{d, \sigma}^\dagger, \hat{c}_{d, \sigma}$). Поскольку примесь точечная, взаимодействие с ней электронов проводимости удобнее описывать в терминах локализованных функций Ванье [43], нежели волн Блоха:

$$\phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.86)$$

(N_a — число ячеек Вигнера-Зейтца в кристалле). Изменение энергии системы при переходе электрона из зоны проводимости на примесную орбиталь характеризуется матричным элементом гибридизации $V_{\mathbf{k}}$:

$$V_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \langle \phi_d | \hat{H} | \phi_{\mathbf{R}} \rangle \quad (1.87)$$

Если в качестве гамильтониана \hat{H} использовать выражение (1.83), отбросив при этом часть, отвечающую за кулоновское взаимодействие, то мы придем к следующему:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \varepsilon_d \hat{c}_{d, \sigma}^\dagger \hat{c}_{d, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (V_{\mathbf{k}} \hat{c}_{d, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} + V_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{d, \sigma}) \quad (1.88)$$

Полученную модель иногда называют моделью Андерсона без взаимодействия. Важно отметить, что хотя на d -оболочке фактически может находиться

до 5 электронов с одинаковой проекцией спина и разным магнитным квантовым числом (7 электронов для f -оболочки), широко используются модельные упрощения с меньшим числом орбиталей. В частности, в гамильтониане (1.88) имеется в виду простейшее одноорбитальное приближение.

Финальный шаг вывода состоит в явном учете кулоновского отталкивания на локализованной орбитали. Соответствующая константа дается кулоновским интегралом:

$$U = \int \phi_d^*(\mathbf{r})\phi_d^*(\mathbf{r}')\frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\phi_d(\mathbf{r})\phi_d(\mathbf{r}')d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \quad (1.89)$$

Эта константа может быть очень большой для атомных d -орбиталей (до 30 эВ). При помещении иона в решетку ее значение может существенно уменьшаться за счет частичной делокализации орбитали и экранировки $3d$ -электронов другими электронами. Теоретические оценки [44] дают значения в диапазоне 1 – 7 эВ для $3d$ -электронов (переходные металлы); для более компактных $4f$ -состояний (лантаноиды) эти значения несколько больше.

Итоговое выражение для гамильтониана однозонной модели Андерсона имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \varepsilon_d \hat{c}_{d,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{d,\sigma} + U \hat{n}_{d,\uparrow} \hat{n}_{d,\downarrow} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} (V_{\mathbf{k}} \hat{c}_{d,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + V_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{d,\sigma}) \quad (1.90)$$

Этот гамильтониан (и его многоорбитальные версии) активно используется в теории сильных электронных корреляций и как самостоятельная физическая модель, и как вспомогательное средство для решения более сложных решеточных задач [5].

В дальнейшем нам понадобится выражение для действия, соответствующее гамильтониану Андерсона. Это действие устроено так, что по переменным $\bar{c}_{\mathbf{k},\sigma}, c_{\mathbf{k},\sigma}$ можно проинтегрировать сразу:

$$S[\bar{c}_d, c_d] = - \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{\sigma} \bar{c}_{d,\sigma n} (i\omega_n + \mu - \varepsilon_d - \Delta(\omega_n)) c_{d,\sigma n} + \int_0^{\beta} d\tau n_{d,\uparrow}(\tau) n_{d,\downarrow}(\tau) \quad (1.91)$$

$$\Delta(\omega_n) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \quad (1.92)$$

Введенная здесь величина $\Delta(\omega_n)$ называется функцией гибридизации и характеризует усредненное влияние зоны проводимости на электроны примеси. Путем интегрирования нам удалось избавиться от бесконечного числа степеней свободы. Однако платой за это стала потеря гамильтоновости задачи. В самом деле, слагаемое с функцией гибридизации нелокально во времени: произведение $\bar{c}_{d,\sigma n} \Delta(\omega_n) c_{d,\sigma n}$ превращается в свертку во временном представлении.

Если матричный элемент $V_{\mathbf{k}}$ не зависит от квазиимпульса, то функция гибридизации пропорциональна усредненной по векторам \mathbf{k} функции Грина электронов проводимости:

$$\Delta(\omega_n) = V^2 \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega_n) \quad (1.93)$$

1.3.2. Режимы поведения электронов в модели Андерсона. Эффект Кондо

Перед тем, как начинать рассматривать количественные методы решения примесной модели Андерсона, полезно проанализировать ее качественно.

Предположим сначала, что матричные элементы перескока $V_{\mathbf{k}}$ стремятся к нулю. Пространство состояний примеси в атомном пределе включает всего 4 базисных вектора: состояние без электронов $|0\rangle$, два состояния с определенной проекцией спина электрона $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ и состояние с двумя электронами $|2\rangle$. В этом базисе гамильтониан атома уже диагонален:

$$\hat{H}_{at} - \mu \hat{N} = (\varepsilon_d - \mu) |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + (\varepsilon_d - \mu) |\downarrow\rangle\langle\downarrow| + (2\varepsilon_d - 2\mu + U) |2\rangle\langle 2| \quad (1.94)$$

С точностью до температурных поправок, которые, обычно, пренебрежимо малы в интересной области температур, можно считать $\mu = \varepsilon_F$.

Рассмотрим теперь область параметров, в которой 1) атомные уровни лежат по разные стороны от уровня Ферми ($\varepsilon_d \ll \varepsilon_F$, $\varepsilon_d + U \gg \varepsilon_F$), и 2) расстоя-

ние между уровнями значительно больше, чем $|\Delta^R(\varepsilon_F)|$. Этот режим называется режимом локализованного момента, поскольку в основном состоянии имеется один электрон с проекцией спина $S_z = \pm 1/2$ (двукратное вырождение). Состояния с двумя электронами или без электронов энергетически не выгодны, а слабая гибридизация не может заставить число электронов (заряд) на примесном атоме заметно флуктуировать. Флуктуации локализованного спина не связаны с изменением энергии атома и поэтому играют главную роль в рассматриваемом физическом режиме.

Фактически, можно говорить не об электроне, локализованном на примеси, а о квантовомеханическом моменте $1/2$, взаимодействующем с “морем” электронов проводимости. Следуя этой логике, Дж.Р. Шриффер и П.А. Вольф строго показали эквивалентность гамильтониана Андерсона в пределе локализованного момента и более простого гамильтониана s-d-обмена [45]:

$$\hat{H}_{s-d} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - \frac{J}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k} \mathbf{k}' \\ \sigma \sigma'}} (\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\sigma \sigma'}) \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'}, \quad (1.95)$$

где \mathbf{S} — оператор локализованного момента, $\boldsymbol{\tau}$ — вектор матриц Паули, а константа взаимодействия $J = 2|V_{\mathbf{k}_F}|^2 \frac{U}{\varepsilon_d(\varepsilon_d + U)}$.

Используя гамильтониан s-d-обмена, Юн Кондо в 1964 году объяснил эффект увеличения электрического сопротивления слаболегированных магнитными примесями немагнитных металлических сплавов при температурах, близких к абсолютному нулю [46]. Впоследствии эффект был назван его именем. В этой же связи режим локализованного момента часто называют кондовским пределом.

Кондо обнаружил, что в третьем порядке теории возмущений по J амплитуда рассеяния электронов проводимости на примеси логарифмически расходится. Эта расходимость связана не с величиной константы J , а со структурой

взаимодействия спин-спин. Ниже характерной температуры

$$T_K = D \exp[-D/(2J)] \quad (1.96)$$

(D — ширина зоны проводимости) теория возмущений перестает работать.

Удельное сопротивление образца при низкой температуре есть сумма нескольких вкладов: остаточного сопротивления (константа), вклада от фермижидкостных эффектов рассеяния ($\propto T^2$), вклада от рассеяния на фононах ($\propto T^5$) и слагаемого Кондо:

$$\rho(T) = \rho_0 + aT^2 + bT^5 + c_K \ln \frac{\mu}{T} \quad (1.97)$$

При температуре Кондо в эксперименте наблюдается минимум сопротивления; ниже нее доминирует логарифмический вклад в сопротивление, обусловленный процессами рассеяния электронов на примеси с переворотом спина. Стоит отметить, что хотя эффект Кондо обычно относят к низкотемпературной физике, T_K в силу экспоненциальной зависимости от D/J может для разных сплавов принимать значения от нескольких милликельвин до комнатной температуры (пример — сплав AuV с $T_K = 300\text{K}$ [47]).

Если, стартуя с Кондо-предела, начать уменьшать ε_d и U , то в определенный момент атомные уровни сблизятся на величину порядка $|\Delta^R(\varepsilon_F)|$, и станут важны флуктуации заряда на примеси. Такое поведение называется режимом переменной валентности. Он более интересен в контексте динамической теории среднего поля (см. параграф 1.4.2).

Наконец, имеются два немагнитных режима: пустая орбиталь ($\varepsilon_d - \varepsilon_F \gg |\Delta^R(\varepsilon_F)|$) и два электрона на орбитали ($\varepsilon_d + U - \varepsilon_F \ll |\Delta^R(\varepsilon_F)|$). Эти случаи наименее интересны, т.к. основное состояние изолированного атома в них не вырождено, а следовательно, нет реальных проблем в применении теории возмущений по $\Delta(\omega_n)$.

1.3.3. Краткая история исследований модели Андерсона

Работа Кондо вызвала всплеск интереса к свойствам разреженных сплавов с локализованными моментами. Хотя модель Андерсона, предложенная за 4 года до этой работы [1], описывает более широкий спектр явлений, первое время ей уделялось меньше внимания, чем s-d-модели.

Используя приближение Хартри-Фока (HF), Андерсон показал, что в рассмотренной им модели возможно формирование локализованного момента — основного состояния с нарушенной спиновой симметрией. Поскольку приближение было статическим, ориентация спина могла сохраняться сколь угодно долго, что не соответствовало имеющимся представлениям об эффекте Кондо.

На несколько следующих лет приближение Хартри-Фока стало основным инструментом исследования. В 1967 году появилось линейризованное динамическое обобщение HF — приближение случайной фазы (Random Phase Approximation, RPA) [48]. По его результатам, атом примеси находится в каждом из двух поляризованных основных состояний продолжительное, но конечное время, и возможны перевороты локализованного спина. К сожалению, для достаточно больших U , при которых только и может формироваться локальный момент, теория была формально неприменима.

Г. Сул существенно улучшил RPA, введя уширение локального одночастичного спектра за счет флуктуаций [49]. Это сделало теорию пригодной для любых значений U . Однако найденный им характерный энергетический масштаб Кондо-процессов был сильно недооценен: $\exp(-(U/\Delta^R(\epsilon_F))^2)$ вместо $\exp(-U/\Delta^R(\epsilon_F))$, что согласовалось бы с формулой (1.96) для температуры Кондо. Это означало, что из виду была упущена значительная часть процессов рассеяния, в том числе дающих основной вклад в эффект Кондо.

В 1970 году Д. Р. Хаманн, используя идеи Нозьера и Де Доминикиса [50], построил последовательную теорию модели Андерсона в кондовском пределе

[51]. Теория основывалась на аппарате континуальных интегралов и преобразовании Хаббарда-Стратоновича [52, 53], при помощи которого кулоновское отталкивание электронов на примеси эквивалентным образом заменялось на внешний флуктуирующий во времени потенциал. После преобразования две электронные подсистемы со спинами вверх и вниз связаны друг с другом только посредством введенного потенциала, имеющего смысл флуктуирующего магнитного поля. Среди траекторий, по которым эволюционирует потенциал во мнимом времени, Хаманн выделил наиболее важные. Большую часть времени амплитуда поля остается практически постоянной, но в редкие моменты быстро меняет знак на противоположный — происходит рассеяние с переворотом спина. Учет выделенных траекторий позволил адекватно описать поведение проводимости сплава как выше, так и ниже температуры Кондо.

Прорыв в понимании низкоэнергетической физики магнитных примесей произошел в середине 1970х годов, когда Кеннет Вильсон разработал метод численной ренормгруппы (Numerical Renormalization Group; NRG) [54] для решения проблемы Кондо. В этом методе примесная модель (в первых работах Вильсона — модель s-d-обмена) заменяется на модель одномерной цепочки, соединенной с примесным атомом. Узел цепочки отвечает определенному энергетическому масштабу, на котором электроны проводимости взаимодействуют с примесью (масштаб экспоненциально спадает с номером узла). На каждом шаге алгоритма NRG точно диагонализуются гамильтониан, соответствующий части цепочки. После этого определенное количество его высоколежащих уровней отбрасывается, и строится новый гамильтониан путем добавления следующего атома в цепочку. Т.к. метод является непертурбативным, он позволяет исследовать основное состояние и термодинамику моделей при любых значениях параметров и учитывать динамику электронов на энергиях ниже температуры Кондо. В 1980 году метод Вильсона был успешно применен к модели Андерсона [55, 56] (термодинамика), а спустя еще несколько лет

— для определения ее одноэлектронных спектров [57]. Обзор современных применений NRG имеется в [11].

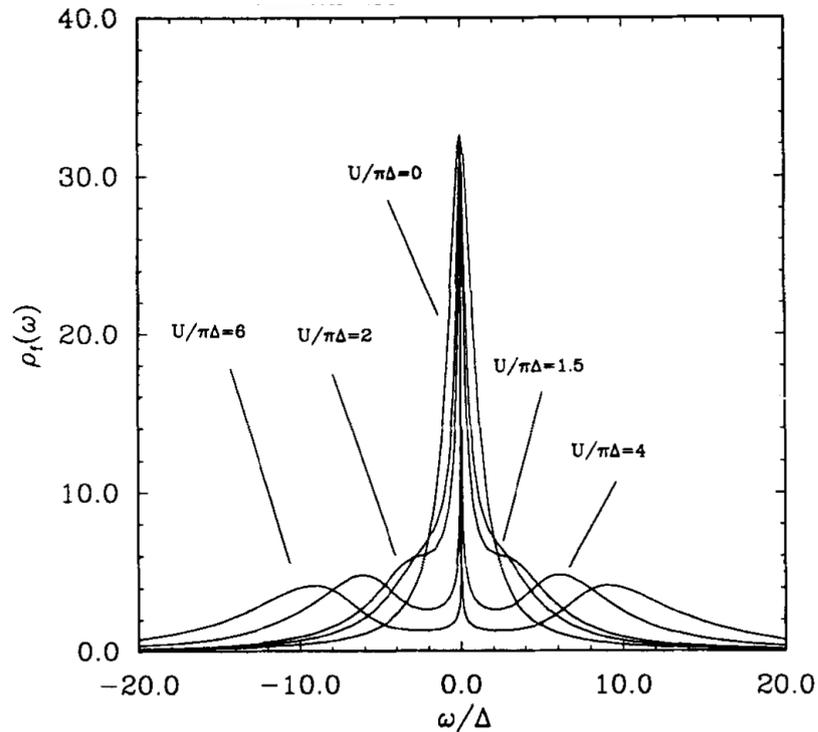


Рис. 1.1. Локальные плотности состояний симметричной модели Андерсона, полученные методом численной ренормгруппы [58]. При больших значениях U (в пределе локализованного момента) хорошо различимы центральный пик, отвечающий низкоэнергетическим Кондо-процессам (резонанс Абрикосова-Сула) и широкие подзоны, образующиеся вблизи атомных резонансов $\pm U/2$.

Параллельно с NRG в 1980х годах началось развитие квантовых методов Монте-Карло (подробнее о них см. параграф (1.3.4)). Монте-карловские и ренормгрупповые методы во многом дополняют друг друга. Первые из них работают при конечной (и не слишком низкой) температуре и обязательно на оси мнимых частот. Вторые же, напротив, позволяют считать спектры на реальных частотах, но только при $T = 0$.

Также в 1980-1981 годах с использованием анзаца Бете были точно решены модель Кондо (Н. Андрей [59] и независимо от него П.Б. Вигман [60]) и модель Андерсона (Вигман [61], Н. Каваками и А. Окиджи [62]). В этих ре-

шениях используются дополнительные предположения о линейности закона дисперсии проводящих электронов и о том, что обменное взаимодействие с примесью имеет нулевой радиус. Оба этих предположения несильно ограничивают релевантность результатов. Хотя к тому моменту физика моделей была уже вполне ясна, решения на основе анзаца Бете позволили получить новые точные формулы для энергии основного состояния и магнитных восприимчивостей в слабых и сильных полях.

Ещё одна важная линия исследований связана с применением теории возмущений и $1/\mathcal{N}$ -разложений. При умеренных значениях U простая теория возмущений по взаимодействию, построенная над приближением Хартри-Фока, позволяет получить качественно верные кривые для плотности состояний как в симметричном, так в асимметричном случаях [63].

В случае многозонной модели Андерсона (с числом локализованных на примеси состояний \mathcal{N}) эффективным оказывается подход, при котором рассматривают бесконечные подмножества диаграмм для собственной энергии, классифицируя их по числу пересечений линий. В самом простом варианте этот подход называется приближением непересекающихся диаграмм (Non Crossing Approximation; NCA) [14, 64]. Суммы диаграмм без пересечений удовлетворяют системе интегральных уравнений, поддающейся точному решению в пределе нулевой температуры [65]. Классификация диаграмм по числу пересечений эквивалентна учету различных порядков $1/\mathcal{N}$ -разложения, поэтому NCA хорошо работает в Кондо-режиме и режиме переменной валентности только в пределе $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ [15]. С NCA и $1/\mathcal{N}$ -разложением тесно связаны методы вспомогательных бозонов [66], вспомогательных роторов [67], а также приближение СТМА (Conserving T-Matrix Approximation) [68].

В завершение обзора следует назвать такие новейшие методы исследования модели Андерсона, как функциональная ренормгруппа [69, 70] и суперпертурбативный метод (параграф (1.3.6)).

1.3.4. Квантовые методы Монте-Карло

На сегодняшний день квантовые методы Монте-Карло являются наиболее востребованными численными методами для решения примесных задач в том случае, если требуется описание электронного спектра при конечной температуре и одновременно на всех энергетических масштабах.

Сформулируем сначала общую идею этих методов. Любая задача классической или квантовой статистической физики состоит в вычислении среднего по фазовому или конфигурационному пространству C от некоторой наблюдаемой $A(\mathbf{x})$:

$$\langle A \rangle_p = \frac{1}{Z} \int_C d\mathbf{x} A(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}), \quad (1.98)$$

где $p(\mathbf{x})$ — статистический вес конфигурации $\mathbf{x} \in C$, а Z — статистическая сумма системы:

$$Z = \int_C d\mathbf{x} p(\mathbf{x}) \quad (1.99)$$

Обычно, размерность пространства C очень велика (в квантовых задачах — бесконечна), и единственный приемлемый способ вычислять интегралы по нему — использовать стохастические алгоритмы Монте-Карло. В таких алгоритмах из пространства C случайным образом выбираются M конфигураций \mathbf{x}_i с вероятностью $p(\mathbf{x}_i)/Z$, и величина $\langle A \rangle_p$ оценивается как

$$\langle A \rangle_p \approx \langle A \rangle_{MC} \equiv \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(\mathbf{x}_i). \quad (1.100)$$

В соответствии с центральной предельной теоремой, при достаточно большом M оценка (1.100) будет распределена нормально вокруг $\langle A \rangle_p$ с дисперсией

$$(\Delta A)^2 \equiv \langle (\langle A \rangle_{MC} - \langle A \rangle_p)^2 \rangle \propto 1/M. \quad (1.101)$$

Наилучший способ выбрать конфигурации \mathbf{x}_i — организовать марковские случайные блуждания по пространству C . Марковская цепь полностью харак-

теризуется матрицей W_{xy} , которая задает вероятность перехода от конфигурации \mathbf{x} к следующей конфигурации \mathbf{y} и нормирована условием $\int_C d\mathbf{y}W_{xy} = 1$. Стартуя с произвольного распределения вероятности, марковские блуждания обеспечивают в пределе $M \rightarrow \infty$ экспоненциально быструю сходимость к распределению $p(\mathbf{x})$, если выполнены два условия:

1. эргодичность: имеется ненулевая вероятность за конечное число шагов попасть из заданного состояния \mathbf{x} в заданное состояние \mathbf{y} (существует такое целое $M < \infty$, что для любого $m \geq M$ вероятность $(W^m)_{xy} \neq 0$);

2. равновесие:

$$\int_C d\mathbf{x}p(\mathbf{x})W_{xy} = p(\mathbf{y}) \quad (1.102)$$

(распределение не меняется от шага к шагу).

Вместо условия равновесия обычно используют достаточное, но не необходимое условие детального равновесия:

$$\frac{W_{xy}}{W_{yx}} = \frac{p(\mathbf{y})}{p(\mathbf{x})} \quad (1.103)$$

Первым и до сих пор используемым алгоритмом случайных блужданий, удовлетворяющим условию детального равновесия, является алгоритм Метрополиса-Гастингса [7, 8]. В нем переход между конфигурациями \mathbf{x} и \mathbf{y} сначала предлагается с вероятностью W_{xy}^{prop} , а затем, возможно, принимается с вероятностью W_{xy}^{acc} . Если предложенный переход не принят, то на следующем шаге используется та же конфигурация \mathbf{x} . Полная вероятность перехода при этом есть произведение

$$W_{xy} = W_{xy}^{prop} W_{xy}^{acc}. \quad (1.104)$$

Критерий Метрополиса гласит, что

$$W_{xy}^{acc} = \min \left[1, \frac{p(\mathbf{y})W_{yx}^{prop}}{p(\mathbf{x})W_{xy}^{prop}} \right]. \quad (1.105)$$

Если взять $W_{xy}^{prop} = W_{yx}^{prop} = \text{const}$ (как обычно и делается), то критерий просто интерпретировать: переход в более вероятное состояние принимается всегда, а в менее вероятное — с вероятностью $p(\mathbf{y})/p(\mathbf{x})$.

Таким образом, среднее значение $A(\mathbf{x})$ оценивается по формуле (1.100), конфигурации \mathbf{x}_i в которой выбираются в ходе марковских блужданий.

История квантовых методов Монте-Карло, предназначенных для решения примесных задач, началась в 1986 году с работы Дж. Хирша и Р. Файя [71]. На протяжении последующих 20 лет их метод оставался, фактически, стандартом де-факто, пока в середине 2000-х годов не началось развитие более совершенных квантовых методов Монте-Карло в непрерывном времени (Continuous time QMC; СТQMC) [72].

Хирш и Фай рассматривали однозонную примесную модель Андерсона (1.91); при этом метод обобщается и на более сложные гамильтонианы с взаимодействиями плотность-плотность. Отрезок мнимого времени $[0; \beta]$ разбивается на N временных слоев “толщиной” $\Delta\tau$, и континуальный интеграл (например, для статсуммы) аппроксимируется многомерным с использованием формулы Троттера-Сузуки:

$$Z = \int D[\bar{c}, c] e^{-(S_0 + S_{int})} \approx \int \prod_{j=1}^N d\bar{c}_j dc_j e^{-\Delta\tau \hat{H}_{int}} e^{-S_0} \quad (1.106)$$

На каждом временном слое квадратичную часть гамильтониана \hat{H}_{int} можно свести к квадратичной форме грассмановых переменных с помощью дискретного преобразования Хаббарда-Стратоновича:

$$e^{-\Delta\tau U [n_{\uparrow}(\tau_j) n_{\downarrow}(\tau_j) - (n_{\uparrow}(\tau_j) + n_{\downarrow}(\tau_j))/2]} = \frac{1}{2} \sum_{s_j = \pm 1} e^{\lambda s_j (n_{\uparrow}(\tau_j) - n_{\downarrow}(\tau_j))}, \quad \lambda = \text{Arch}[\exp(\Delta\tau U/2)] \quad (1.107)$$

Для заданного набора изинговских переменных $\{s_1, \dots, s_N\}$ многомерный гауссов интеграл (1.106) описывает систему невзаимодействующих электронов, помещенных во внешнее магнитное поле $h(\tau_j) = s_j$. Этот интеграл берется

точно, а искомая статистическая сумма получается суммированием по всем возможным наборам s_i :

$$Z = \sum_{s_1 \dots s_N} \det \hat{O}(\{s_i\}) \quad (1.108)$$

Количество слагаемых в сумме равно 2^N , что приводит к необходимости использовать метод Монте-Карло для ее вычисления. Однако для этого имеется препятствие: фермионный детерминант может быть произвольного знака, и его нельзя непосредственно интерпретировать как вес $p(\{s_i\})$. Выход из этой ситуации состоит в том, чтобы задать вес в виде $p(\{s_i\}) = |\det \hat{O}(\{s_i\})|$ и переопределить наблюдаемые: $A(\{s_i\}) \mapsto A(\{s_i\}) \operatorname{sgn}[\det \hat{O}(\{s_i\})]$.

Такой прием позволяет организовать случайные блуждания, но в то же время обнаруживает серьезную проблему, присущую всем стохастическим фермионным алгоритмам, — проблему знака [9]. В сумму по конфигурациям могут входить слагаемые с одинаковым (или очень близким) весом, но с противоположным знаком. Если таких слагаемых много, то среднее значение суммы будет теряться по сравнению с дисперсией монте-карловского счета. Можно показать [72], что относительная погрешность знака $\operatorname{sgn}[\det \hat{O}(\{s_i\})]$ экспоненциально растет с понижением температуры, а также с увеличением числа степеней свободы и числа временных слоев N . От числа шагов Монте-Карло она зависит лишь как $1/\sqrt{M}$, что делает вычисления для очень низких температур и сложных систем практически нереализуемыми (существуют, однако, специальные случаи, когда проблема знака полностью отсутствует).

Алгоритм Хирша-Фая имеет три основных недостатка. Во-первых, конечная величина $\Delta\tau$ вносит систематическую погрешность в результаты (искусственный временной или частотный масштаб). Во-вторых, при больших значениях βU переход марковской цепи к равновесному распределению становится слишком медленным. В-третьих (и в-главных), взаимодействия отличные по форме от андерсоновского (в частности, обменное) могут требовать введения

комплексных вспомогательных полей. Это многократно усугубляет проблему знака, превращает ее в “проблему комплексной фазы”.

В 2004 году А.Н. Рубцов разработал стохастический алгоритм для фермионов, основанный на диаграммном разложении по взаимодействию и не использующий дискретизацию мнимого времени [73]. Спустя два года Ф. Вернер предложил другой вариант диаграммного метода Монте-Карло с разложением по функции гибридизации [74]. Здесь мы остановимся на методе Вернера более подробно, т.к. он применялся для получения результатов диссертации.

Вывод метода стартует с гамильтониана типа (1.90) в котором, однако, локальное взаимодействие на примеси может иметь произвольный вид. Статистическую сумму модели можно разложить по той части действия, которая отвечает гибридизации электронов примеси и электронов проводимости:

$$S_{hyb} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \int_0^{\beta} d\tau (V_{\mathbf{k}} \bar{d}_{\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}, \sigma}(\tau) + V_{\mathbf{k}}^* \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma}(\tau) d_{\sigma}(\tau)) \quad (1.109)$$

Поскольку электроны проводимости непосредственно не взаимодействуют друг с другом, интегралы по соответствующим переменным берутся точно, а влияние зоны проводимости на примесь, как и следует ожидать, выражается через одну функцию гибридизации $\Delta(\omega_n)$. После некоторых алгебраических преобразований, направленных на учет эквивалентных перестановок временных аргументов и спиновых индексов, разложение принимает вид:

$$Z = Z_{conduct} \text{Sp}_{\bar{d}, d} \left[\mathbb{T}_{\tau} e^{-S_{loc}} \prod_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \sum_{k_{\sigma}=0}^{+\infty} \tilde{Z}_{k_{\sigma}} \right] s_{\mathbb{T}_{\tau}} \quad (1.110)$$

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_{k_a} = & \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_{\tau_1}^{\beta} d\tau_2 \dots \int_{\tau_{k_{\sigma}-1}}^{\beta} d\tau_{k_{\sigma}} \int_0^{\beta} d\tau'_1 \int_{\tau'_1}^{\beta} d\tau'_2 \dots \int_{\tau'_{k_{\sigma}-1}}^{\beta} d\tau'_{k_{\sigma}} \det(\hat{M}_{\sigma}) s_{\sigma} \times \\ & \times \hat{d}_{\sigma}(\tau_1) \hat{d}_{\sigma}^{\dagger}(\tau'_1) \hat{d}_{\sigma}(\tau_2) \hat{d}_{\sigma}^{\dagger}(\tau'_2) \dots \hat{d}_{\sigma}(\tau_{k_{\sigma}}) \hat{d}_{\sigma}^{\dagger}(\tau'_{k_{\sigma}}) \quad (1.111) \end{aligned}$$

Матрица \hat{M}_σ^{-1} составлена из функций гибридизации от различных временных аргументов:

$$(\hat{M}_\sigma^{-1})_{ij} = \Delta(\tau'_i - \tau_j) \quad (1.112)$$

Числа s_σ и $s_{\mathbb{T}_\tau}$ введены для компенсации знаков, возникающих в ходе перестановок фермионных операторов. Уравнения (1.110) и (1.111) говорят нам, что конфигурации, по которым следует организовать случайные блуждания, состоят из упорядоченных наборов $2n = 2(k_\uparrow + k_\downarrow)$ операторов $\{\hat{O}(\tau_i)\}_{0 \leq \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_{2n} < \beta}$. Среди этих операторов k_σ операторов \hat{d}_σ и столько же операторов \hat{d}_σ^\dagger , причем они всеми возможными способами попарно связаны функцией гибридизации (интерпретация детерминанта $\det \hat{M}_\sigma^{-1}$). Между операторами рождения и уничтожения “вставлены” локальные операторы эволюции

$$\hat{K}_{loc}(\tau) = e^{-\hat{H}_{loc}\tau} \quad (1.113)$$

Статистический вес конфигурации $\{\hat{O}(\tau_i)\}$ можно определить как

$$p(\{\hat{O}(\tau_i)\}) = \text{Sp}[\hat{K}_{loc}(\beta - \tau_{2n})\hat{O}_{2n}(\tau_{2n}) \dots \hat{O}_2(\tau_2)\hat{K}_{loc}(\tau_2 - \tau_1)\hat{O}_1(\tau_1)\hat{K}_{loc}(\tau_1)] \times \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (\det \hat{M}_\sigma^{-1}) s_\sigma \quad (1.114)$$

Марковская цепь состоит из трех типов элементарных шагов: добавление пары операторов $\hat{d}_\sigma^\dagger(\tau), \hat{d}_\sigma(\tau')$ в конфигурацию, удаление пары операторов и сдвиг оператора на оси мнимого времени. Каждый из этих шагов требует подстановки матричных элементов полевых операторов и пересчета детерминанта, составленного из гибридизационных функций. Существует эффективный способ делать пересчет, основанный на том факте, что обновления затрагивают всегда только одну строку и один столбец матрицы \hat{M}_σ^{-1} . Кроме вычисления детерминанта элементы матрицы \hat{M}_σ^{-1} используются для оценки итоговой

функции Грина:

$$\mathcal{G}_{\sigma\sigma}(\tau) = \left\langle \frac{1}{\beta} \sum_{i,j=1}^{k_{\sigma}} (\hat{M}_{\sigma})_{ij} \hat{\delta}(\tau, \tau_i - \tau'_j) \right\rangle_{MC}, \quad \hat{\delta}(\tau, \tau') \equiv \begin{cases} \delta(\tau - \tau'), & \tau' > 0 \\ -\delta(\tau - \tau' - \beta), & \tau' < 0 \end{cases} \quad (1.115)$$

Помимо алгоритмов Рубцова (СТ-INT) и Вернера (СТ-НУВ) следует отметить работы Э. Гулла с соавторами [75] (СТ-AUX, комбинация разложения по взаимодействию и вспомогательных полей) и Ж. Оцуки с соавторами [76] (СТ-J, специализированный метод для моделей типа Кондо). Сравнение производительности и точности различных методов QMC можно найти в статье [77].

Во избежание “проблемы комплексной фазы” все перечисленные методы принципиально работают на оси мнимого времени, поскольку в случае реального времени любые разложения весового фактора e^{iS} содержали бы комплексные числа. Поэтому для интерпретации результатов QMC всегда требуется дополнительное звено расчета — процедура аналитического продолжения.

1.3.5. Ренормгруппа для матрицы плотности

Идея метода численной ренормгруппы, разработанного Вильсоном для решения проблемы Кондо, получила новую интерпретацию и развитие в работе С. Р. Уайта 1992 года [78]. Метод Уайта называется ренормгруппой для матрицы плотности (Density Matrix Renormalization Group, DMRG). Он предназначен для исследования моделей одномерных квантовых цепочек с короткодействующими потенциалами взаимодействия между узлами. На каждом узле цепочки могут находиться спиновые, бозонные или фермионные степени свободы (примеры — квантовая модель Гайзенберга или модель Хаббарда). Как правило, целью исследования является нахождение основного состояния

и его энергии (при абсолютном нуле температур). Существуют обобщения на случай двумерных решеток, но они радикально менее точны.

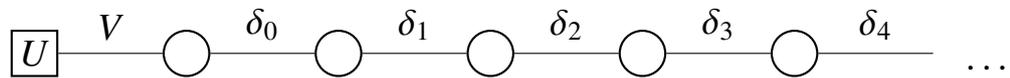
В конце раздела (1.3.1) была использована процедура интегрирования по электронам проводимости в модели Андерсона. Применение ренормгрупповых методов к решению примесных задач основано на приеме, который является обратным к ней: заменить систему с заданными примесным действием и $\Delta^R(\epsilon)$ на полубесконечную одномерную цепочку.

Любую гибридизационную функцию, отвечающую стандартным требованиям аналитичности, можно разложить в цепную дробь:

$$\Delta^R(\epsilon) = \frac{V^2}{\epsilon - \frac{\delta_0^2}{\epsilon - \frac{\delta_1^2}{\epsilon - \dots}}} \quad (1.116)$$

Этому разложению можно сопоставить гамильтониан одномерной цепочки с одним андерсоновским атомом в ее начале:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \epsilon_d \hat{c}_{d,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{d,\sigma} + U \hat{n}_{d,\uparrow} \hat{n}_{d,\downarrow} + V \sum_{\sigma} (\hat{c}_{d,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{0,\sigma} + \hat{c}_{0,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{d,\sigma}) + \sum_{l=0}^{+\infty} \delta_l \sum_{\sigma} (\hat{c}_{l,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{l+1,\sigma} + \hat{c}_{l+1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{l,\sigma}) \quad (1.117)$$



Не останавливаясь на строгом доказательстве соответствия, обозначим лишь его общую идею. В континуальном интеграле с действием, отвечающим (1.117), можно оборвать последовательность δ_l на некотором номере L . После этого последовательно берутся интегралы по $\bar{c}_{l,\sigma}, c_{l,\sigma}$, начиная с узла L и продвигаясь к коррелированному атому в начале цепочки. На каждом следующем узле

возникает “частичная” функция гибридизации, отличающаяся от таковой на предыдущем шаге добавлением нового знаменателя. Таким образом гибридизация коррелированного атома в пределе $L \rightarrow \infty$ будет совпадать с дробью (1.116).

Даже с учетом того, что матрица гамильтониана (1.117) сильно разрежена, точно диагонализировать ее возможно только при конечной и неудовлетворительно малой длине цепочки. DMRG представляет собой итерационную процедуру диагонализации, в которой в рассмотрение поэтапно добавляются все новые и новые части цепочки (блоки), но при этом на каждом этапе часть квантовых состояний отбрасывается, чтобы сдержать экспоненциальный рост гильбертова пространства. Опишем в общих чертах шаги, из которых состоит каждая итерация.

1. В начале итерации имеется два блока A и B , гильбертово пространство которых характеризуются набором из не более, чем D базисных функций. Число D диктуется доступными вычислительными ресурсами и обычно имеет порядок $10^2 \dots 10^3$. На первой итерации в качестве стартовых блоков можно взять единичные узлы с размерностью пространства состояний d у каждого.
2. К каждому из блоков A и B добавляется по атому, в результате чего образует так называемый суперблок $A \bullet \bullet B$. Его пространство состояний есть прямое произведение пространств составных частей и имеет размерность $d^2 D^2$. Любая волновая функция $A \bullet \bullet B$ может быть разложена по соответствующему базису:

$$|\psi\rangle = \sum_{a_A, \sigma_A, \sigma_B, a_B} \psi_{a_A \sigma_A \sigma_B a_B} |a_A\rangle |\sigma_A\rangle |\sigma_B\rangle |a_B\rangle = \sum_{i_{A \bullet \bullet B}} \psi_{i_{A \bullet \bullet B}} |i_{A \bullet \bullet B}\rangle \quad (1.118)$$

3. С помощью прямой диагонализации находится волновая функция, ми-

нимизирующая энергию (основное состояние)

$$E = \frac{\langle \psi | \hat{H}_{A \bullet \bullet B} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (1.119)$$

Эффективный гамильтониан $\hat{H}_{A \bullet \bullet B}$ включает вклад в энергию только от узлов из текущего суперблока.

4. Поскольку блоки $A \bullet$ и $\bullet B$ имеют dD состояний, для начала следующей итерации часть из них нужно отбросить. Успех метода DMRG обусловлен эффективным критерием прореживания квантовых состояний. Этот критерий основан на вычислении редуцированной матрицы плотности:

$$\hat{\rho}_{A \bullet} = \text{Sp}_{\bullet B} |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (\hat{\rho}_{A \bullet})_{i'v'} = \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j}^* \quad (1.120)$$

(аналогично для $\hat{\rho}_{\bullet B}$). Редуцированные матрицы плотности диагонализуются, и в качестве новых базисов $A \bullet$ и $\bullet B$ берутся собственные векторы, отвечающие D старшим собственным значениям матриц (т.е. наиболее вероятные состояния).

Итерации продолжаются до тех пор, пока не будут исчерпаны все узлы цепочки. На выходе получается энергия E_0 и волновая функция основного состояния $|\psi_0\rangle$. Для увеличения точности за описанной процедурой следует аналогичная, но с измененным порядком наращивания суперблоков (sweeping, подробнее см. [79]).

Вычисление динамических функций отклика, в частности, функций Грина осуществляется с помощью разложения их в цепную дробь типа (1.116). Пусть динамическая корреляционная функция в частотном представлении $G_A(z)$ определена согласно

$$G_A(z) \equiv \langle \psi_0 | \hat{A}^\dagger (z - \hat{H})^{-1} \hat{A} | \psi_0 \rangle \quad (1.121)$$

Ее разложение в цепную дробь имеет вид

$$G_A(z) = \frac{\langle \psi_0 | \hat{A}^\dagger \hat{A} | \psi_0 \rangle}{z - a_0 - \frac{b_1^2}{z - a_1 - \frac{b_2^2}{z - \dots}}} \quad (1.122)$$

Коэффициенты a_l и b_l вычисляются рекурсивно с помощью последовательности состояний $|f_l\rangle$:

$$|f_{l+1}\rangle = \hat{H}|f_l\rangle - a_l|f_l\rangle - b_l^2|f_{l-1}\rangle, \quad |f_0\rangle = \hat{A}|\psi_0\rangle, \quad (1.123)$$

$$a_l = \langle f_l | \hat{H} | f_l \rangle / \langle f_l | f_l \rangle, \quad (1.124)$$

$$b_l = \langle f_l | f_l \rangle / \langle f_{l-1} | f_{l-1} \rangle, \quad b_0 = 0 \quad (1.125)$$

Видно, что никакой дополнительной информации кроме знания $|\psi_0\rangle$ для этого не требуется. Описанное расширение DMRG для динамических величин (D-DMRG) было предложено К. Халлбергом [12].

1.3.6. Суперпертурбативный метод решения

Данный метод, основанный на преобразовании к дуальным фермионам, был предложен всего два года назад и пока не успел получить устоявшегося русскоязычного названия. Поэтому в заглавие параграфа вынесена прямая калька с английского *superperturbation solver*. Суперпертурбативный метод создан и развивается в основном теоретической группой из Гамбурга во главе с профессором А.И. Лихтенштейном.

По сути, метод является “улучшенной” версией теории возмущений, в которой неявно суммируются бесконечные ряды диаграмм, дающие основной вклад в наблюдаемые величины как в атомном пределе, так и в пределе слабой связи.

Наивный подход к использованию дуальной теории возмущений заключается в разбиении действия примесной модели на действие для изолированного атома (точно решаемая часть) и часть с гибридизацией. Практика показывает, что такое разбиение не ведет к удовлетворительным результатам, и требуется более сложное построение [80]. В ходе этого построения рассматривается точно решаемая задача вида “коррелированный атом” + “ P одноорбитальных атомов без взаимодействия”. При этом из слагаемого с функцией гибридизации вычитается такая часть, чтобы полное действие задачи осталось неизменным:

$$S[\bar{c}, c] = S_{ref}[\bar{c}, c] + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{\sigma} \bar{c}_{\sigma n} (\Delta(\omega_n) - \Delta^{(P)}(\omega_n)) c_{\sigma n} \quad (1.126)$$

$$S_{ref}[\bar{c}, c] = - \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{\sigma} \bar{c}_{\sigma n} (i\omega_n + \mu - \varepsilon_d - \Delta^{(P)}(\omega_n)) c_{\sigma n} + \int_0^{\beta} d\tau n_{\uparrow}(\tau) n_{\downarrow}(\tau) \quad (1.127)$$

Поправка к гибридизации соответствует P одноорбитальным атомам, несущим атомные уровни ϵ_p и связанным с коррелированным атомом элементами перескока V_p :

$$\Delta^{(P)}(\omega_n) = \sum_{p=1}^P \frac{|V_p|^2}{i\omega_n - \epsilon_p} \quad (1.128)$$

Выбор параметров ϵ_p и V_p осуществляется с целью минимизировать разность $\Delta(\omega_n) - \Delta^{(P)}(\omega_n)$ (максимально улучшить нулевое приближение дуальной теории возмущений). Оптимизацию по параметрам можно производить разными способами; в основополагающей работе [80] был использован функционал, придающий больший вес невязке на малых частотах:

$$d = \frac{1}{\omega_{max}} \sum_{n=0}^{n_{max}} |\omega_n|^{-3} |\Delta(\omega_n) - \Delta^{(P)}(\omega_n)|^2 \quad (1.129)$$

Определив параметры функции $\Delta^{(P)}(\omega_n)$, можно численно отыскать собственные значения и собственные функции гамильтониана \hat{H}_{ref} ($S_{ref}[\bar{c}, c] = \int_0^{\beta} \hat{H}_{ref} d\tau$) и построить дуальную теорию возмущений, используя соотношения из параграфа 1.2.5. На рисунке 1.2 изображены диаграммы 1-го, 2-го и

3-го порядков для дуальной собственной энергии. Квадраты на диаграммах — неприводимые вершинные части $\gamma^{(4)}$, вычисленные по \hat{H}_{ref} . В качестве линий использовались не затравочные дуальные ФГ $\hat{\mathcal{G}}^{d0}(\omega_n)$, а полные ФГ (жирные линии). Они получаются в результате рекурсивного применения теории возмущений, стартующего с $\hat{\mathcal{G}}^{d0}(\omega_n)$ и прекращающегося по достижении “неподвижной точки” по $\hat{\mathcal{G}}^d(\omega_n)$. С учетом этого обстоятельства вычислялись только скелетные диаграммы — графики, которые не содержатся в виде блоков в других, более простых графиках. Можно показать, что теория возмущений становится точной как в пределе почти свободных электронов $U \rightarrow 0$ (малы неприводимые вершины), так и в атомном пределе (малы линии на диаграммах). Методы, удовлетворяющие этому условию, называют интерполяционными.

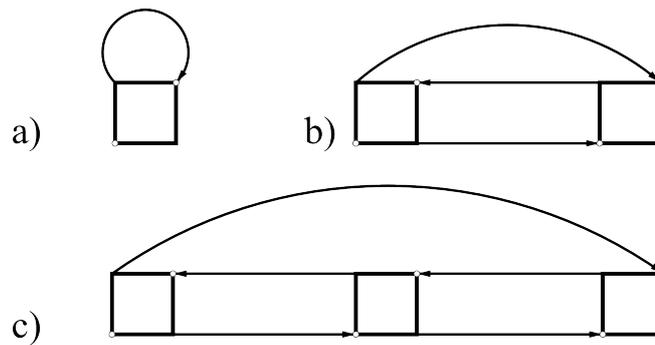


Рис. 1.2. Скелетные дуальные диаграммы, вычисленные в работе [80].

На рисунке 1.3 представлены итоговые спектральные функции для полузаполненной однозонной модели Андерсона с $U = 3.0$, $\beta = 100$ и полукруглой затравочной зоной проводимости с единичной полушириной. Все три кривые получены с использованием процедуры аналитического продолжения (Паде-аппроксимация, см. параграф 1.5.2). Видно, что при $P = 2$ (размер матрицы \hat{H}_{ref} равен 64) результат дуальной теории возмущений почти не отличается от точного QMC-расчета при том, что последний намного более затратен.

В дальнейшем, метод был улучшен за счет совмещения на уровне формул процедур аналитического продолжения и вычисления диаграмм (точнее,

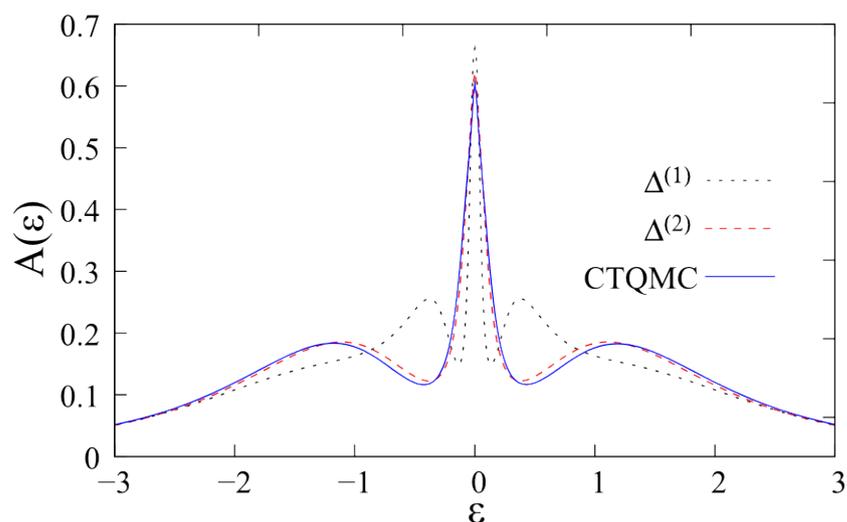


Рис. 1.3. Спектральные функции, вычисленные в работе [80]. Пунктирная линия — дуальная теория возмущений с 2 вспомогательными атомами, точки — то же с 1 вспомогательным атомом, сплошная линия — результаты STQMC.

только диаграммы а) с рисунка 1.2) [81]. Это позволило более детально воспроизводить электронные спектры примесей, в том числе и во многоорбитальном случае. Была также предпринята попытка использовать суперпертурбативный метод для решения нестационарных задач (дуальная диаграммная техника Келдыша) [82]. При этом возникает множество усложнений, т.к. различные функции Грина зависят от двух временных аргументов, а не от их разности, что делает бессмысленным переход к частотному представлению.

1.4. Модель Хаббарда и динамическая теория среднего поля

1.4.1. Модель Хаббарда — основная модель теории сильных электронных корреляций

Вопросы, связанные с описанием динамики электронов при наличии в металле сильно коррелированной примеси, начали активно изучаться в 60-х годах прошлого века и до сих пор не утратили своей актуальности. Еще более сложной проблемой является расчет электронной структуры сильно коррели-

рованных материалов, в которых на каждом атоме имеются локализованные орбитали с сильным кулоновским и обменным взаимодействием. К таким материалам относятся узкозонные переходные металлы, их оксиды (MnO, FeO, CoO, NiO, VO₂) и более сложные соединения (прежде всего, купраты — соединения CuO), а также соединения лантаноидов и актиноидов.

Исследование сильно коррелированных материалов представляется интересным не только с теоретической точки зрения. ВТСП-керамики — слоистые материалы на основе купратов — являются высокотемпературными сверхпроводниками. Изучение свойств электронов в этих структурах может прояснить физику высокотемпературной сверхпроводимости и, возможно, позволит создавать сверхпроводники с еще более привлекательными свойствами (большей температурой сверхпроводящего перехода).

Простейшая модель сильно коррелированного материала с локализованной на атомах нелинейностью — модель Хаббарда, была предложена в 1963 году практически одновременно тремя авторами [83–85]. Модель получила имя Джона Хаббарда, поскольку он внес фундаментальный вклад в изучение статистической механики этой системы. Гамильтониан модели имеет вид:

$$\hat{H}_H = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (1.130)$$

Операторы $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{i\sigma}$ отвечают состояниям, локализованным на i -м атоме решетки. Как и в однозонной модели Андерсона, считается, что это s-состояния, содержащие до двух электронов, хотя в реальных материалах коррелированы, естественно, d- и f-орбитали. Первое слагаемое в гамильтониане — это кинетическая энергия перескоков между узлами решетки, задаваемая матрицей t_{ij} . Характерная величина элементов этой матрицы — 1-3 эВ. Символ $\langle i, j \rangle$ означает, что суммирование ведется только по ближайшими соседями. Число таких соседей (координационное число z) зависит от размерности и структуры решетки. Параметр U — энергия кулоновского отталкивания двух электронов на

одном узле.

Простота и достаточность гамильтониана (1.130) сделала модель Хаббарда весьма популярной и эффективной для описания сильно коррелированных электронных систем, в которых параметр U больше или порядка ширины зоны W (для простой кубической решетки $W = 2zt$).

В гамильтониане (1.130), записанном в узельном представлении, диагонален кулоновский член, а в представлении блоховских волн, напротив, диагонально кинетическое слагаемое, которому отвечает зонный спектр (простая кубическая решетка; d — размерность пространства)

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t \sum_{\alpha=1}^d \cos(k_{\alpha}) \quad (1.131)$$

Диагональность того или иного члена в гамильтониане открывает возможность построить теорию возмущений в двух предельных случаях: $U \ll W$ и $U \gg W$. Если размерность пространства больше единицы, то в первом случае основное состояние полузаполненной модели является металлом, а во втором — моттовским диэлектриком [83]. Промежуточный случай $U \sim W$, естественно, наиболее труден, но и наиболее физически интересен, поскольку именно в этой области сильнее проявляются корреляционные эффекты, приводящие к фазовому переходу металл-изолятор.

Литература, посвященная исследованиям гамильтониана Хаббарда, выходит в большом количестве, но в основном на английском языке. Хорошее русскоязычное введение в методы исследования модели Хаббарда в режиме сильных корреляций — обзорная статья Ю.А. Изюмова [4], на основе которой написаны этот и следующий параграфы.

1.4.2. Динамическая теория среднего поля

Неприменимость теории возмущений в области $U \sim W$ сильно ограничивала возможности изучения модели Хаббарда. Несмотря на это, в период с

1963 по 1989 годы был получен ряд важных результатов. Сам Хаббард предложил приближения, основанные на расщеплении уравнений движения и получившие названия “Хаббард-I” и “Хаббард-III”, по номерам работ в серии статей [83, 86]. Приближение Хаббард-III предсказывает фазовый переход как раз при $U \sim W$. М. Гутцвиллер построил вариационную волновую функцию, дающую, как выяснилось, неплохой результат для энергии основного состояния. Э. Лиеб и Ф. Ву получили точную энергию и волновую функцию основного состояния в одномерии, используя анзац Бете [87]. Они показали, что при $d = 1$ переход металл-диэлектрик в системе отсутствует.

Качественный прорыв в исследованиях произошел в 1989 году, когда В. Метцнер и Д. Фолльхардт рассмотрели предел $d \rightarrow \infty$. Оказалось, что предел бесконечной размерности пространства (бесконечного координационного числа) является содержательным при правильном масштабировании параметров гамильтониана. При $U = 0$ плотность состояний простой гиперкубической решетки, согласно центральной предельной теореме, стремится к гауссовой:

$$A_{HC}^0(\epsilon)|_{d \gg 1} = \frac{1}{2t\sqrt{\pi d}} \exp\left[-\left(\frac{\epsilon}{2t\sqrt{d}}\right)^2\right] \quad (1.132)$$

Средняя кинетическая энергия электронов на решетке остается конечной и отличной от нуля, только если вместе с увеличением d масштабировать константу перескоков:

$$t = \frac{t^*}{\sqrt{2d}} = \frac{t^*}{\sqrt{z}}, \quad t^* = \text{const} \quad (1.133)$$

При конечном U этот вывод остается в силе, а само значение U масштабировать не нужно. Вместо гиперкубической решетки в теоретических построениях можно использовать абстрактную решетку Бете — связный граф без циклов, каждая вершина которого имеет z соседей. Плотность состояний решетки Бете без взаимодействия имеет форму полукруга:

$$A_B^0(\epsilon)|_{z \gg 1} = \frac{2}{\pi(2t^*)^2} \sqrt{(2t^*)^2 - \epsilon^2}, \quad |\epsilon| \leq 2t^* \quad (1.134)$$

Функция собственной энергии $\Sigma_{ij}(\omega_n)$ в пределе $d \rightarrow \infty$ локальна, т.е. отлична от нуля только для $i = j$. Этот факт позволил сформулировать динамическую теорию среднего поля (Dynamical Mean Field Theory, DMFT), являющуюся точным решением задачи в этом случае [88, 89]. Кратко изложим суть теории.

Функция Грина решетки через уравнение Дайсона связана с собственной энергетической функцией:

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega_n)} \quad (1.135)$$

В пределе бесконечной размерности собственная энергия не зависит от квазиимпульса \mathbf{k} : $\Sigma_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega_n) = \Sigma(\omega_n)$. (При конечном d DMFT можно использовать как приближенную схему, в которой локальность собственной энергии постулируется).

Для вычисления локальной собственной энергии рассматривают вспомогательную примесную задачу (модель Андерсона):

$$S[\bar{c}, c] = - \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_\sigma \bar{c}_\sigma(\tau) [\mathcal{G}^0(\tau - \tau')]^{-1} c_\sigma(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_\uparrow(\tau) n_\downarrow(\tau) \quad (1.136)$$

Это действие описывает один атом решетки, помещенный в эффективную среду, динамическое влияние которой задается затравочной ФГ $\mathcal{G}^0(\tau - \tau')$.

Примесная задача характеризуется собственной энергией $\Sigma_{imp}(\omega_n)$:

$$\mathcal{G}_{imp}(\omega_n) = -\langle c_{\sigma n} \bar{c}_{\sigma n} \rangle_S = [\mathcal{G}^0(\omega_n)^{-1} - \Sigma_{imp}(\omega_n)]^{-1} \quad (1.137)$$

Это первое уравнение DMFT. Второе уравнение является условием самосогласования, позволяющим связать решение примесной задачи с затравочной функцией Грина. Согласно ему, собственную энергию на каждом атоме решетки нужно положить равной $\Sigma_{imp}(\omega_n)$ и потребовать, чтобы полная примесная

ФГ была равна решеточной ФГ при совпадающих индексах:

$$\mathcal{G}_{imp}(\omega_n) = \mathcal{G}_{ii}(\omega_n) \Leftrightarrow$$

$$\mathcal{G}_{imp}(\omega_n) = \frac{1}{\Omega_B} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{imp}(\omega_n)} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \frac{A^0(\epsilon)}{i\omega_n + \mu - \epsilon - \Sigma_{imp}(\omega_n)} \quad (1.138)$$

Можно показать, что для случая решетки Бете это уравнение упрощается до алгебраического:

$$\mathcal{G}^0(\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - (t^*)^2 \mathcal{G}_{imp}(\omega_n)} \quad (1.139)$$

или в терминах гибридационной функции для вспомогательной модели Андерсона

$$\Delta(\omega_n) = (t^*)^2 \mathcal{G}_{imp}(\omega_n). \quad (1.140)$$

Пара уравнений (1.137) и (1.138) позволяет самосогласованным образом вычислить Σ_{imp} и \mathcal{G}_{ii} . Обычно это делается с помощью итеративной процедуры. Наиболее сложная часть этой процедуры — решить примесную задачу. Здесь применяется весь спектр методов решения примесных задач, однако, наиболее востребованы квантовые методы Монте-Карло, а также NRG и D-DMRG. Хотя уравнения DMFT можно записать на оси реальных частот, это делает невозможным использование QMC. Поэтому очень часто приходится иметь дело со связкой DMFT + QMC + процедура аналитического продолжения для восстановления финального спектра $A_{ii}(\epsilon)$.

Динамическая теория среднего поля сегодня — одна из важнейших областей в физике сильных электронных корреляций. С ее помощью исследуют не только разнообразные решеточные модели [5], но и электронную структуру реальных материалов [90]. Кроме того разработаны обобщения DMFT, направленные на учет нелокальных корреляций. Среди таких обобщений необходимо назвать кластерные теории [91] (в качестве примесной задачи рассматривает-

ся не один атом, а небольшой кластер на решетке, либо в \mathbf{k} -пространстве) и учет дуальных поправок.

Дуальное преобразование, использующее DMFT-решение для вычисления затравочной дуальной ФГ и неприводимых вершин, позволяет регулярным образом учитывать нелокальные корреляции на всех пространственных масштабах [34]. В рамках соответствующей дуальной теории возмущений были успешно исследованы такие нелокальные эффекты в модели Хаббарда, как формирование псевдощели и дуг Ферми на двумерной квадратной решетке [35] и переход в состояние спиновой жидкости на треугольной решетке [92].

1.4.3. Переход металл-диэлектрик и пиковая структура хаббардовских подзон

Полузаполненная модель Хаббарда в пределе $d \rightarrow \infty$ испытывает фазовый переход металл-диэлектрик. В фазе моттовского диэлектрика плотность состояний состоит из двух подзон, форма которых примерно повторяет форму затравочной зоны, а центры находятся в точках $\pm U/2$ (хаббардовские подзоны). В металлической фазе помимо “фоновой” зоны проводимости имеется квазичастичный пик на уровне Ферми, родственник Кондо-пику в модели Андерсона. Высота этого пика фиксирована следствием из теоремы Латтинжера до тех пор, пока система остается Ферми-жидкостью [93].

При низкой, но конечной температуре T рассматриваемый переход является фазовым переходом первого рода. Он происходит при критическом значении $U_c(T)$, лежащем между границей нестабильности изоляторной фазы $U_{c1}(T)$ и границей нестабильности металла $U_{c2}(T)$ [5]. В случае нулевой температуры переход происходит при $U_c(T = 0) = U_{c2}$ и обладает чертами как перехода первого рода (скачок энтропии системы), так и второго (спектральный вес центрального квазичастичного пика меняется с U непрерывно).

Впервые эволюция локальной спектральной функции электронов при нулевой температуре в зависимости от значения U была изучена в работе [94]. На рисунке 1.4 представлены плотности состояний, полученные для ряда значений $U = D, 2D, 2.7D, 3D, 4D$ (сверху вниз).

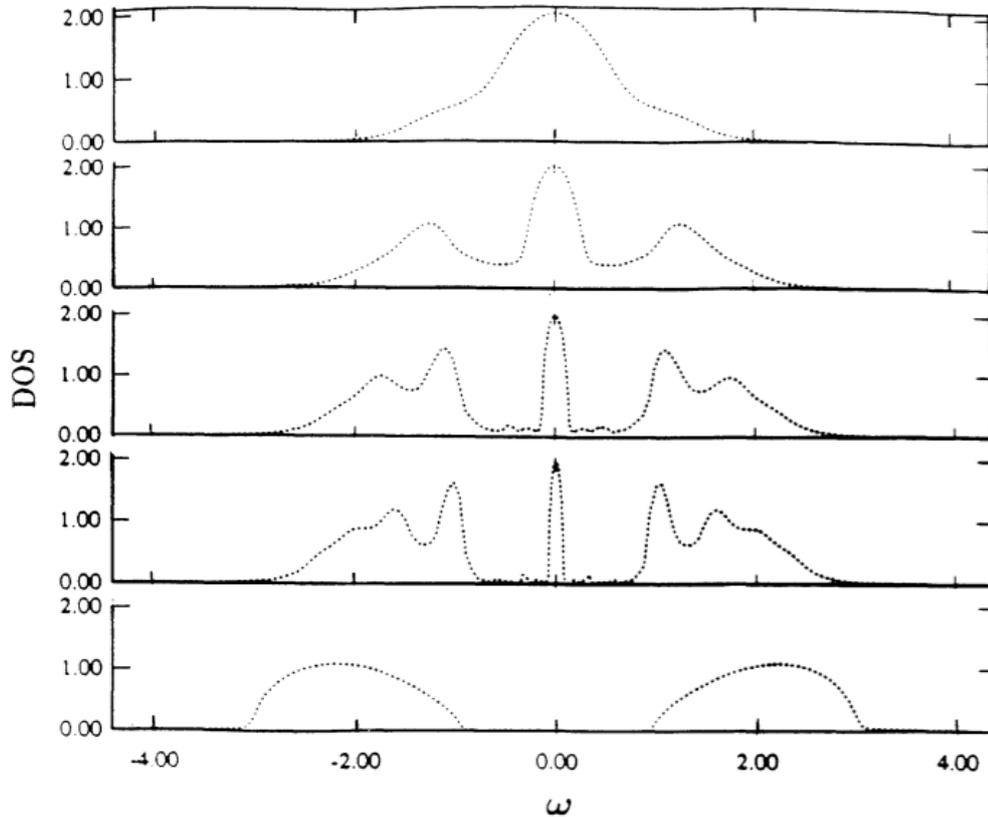


Рис. 1.4. Локальные плотности состояний полузаполненной модели Хаббарда на решетке Бете, рассчитанные методом ИРТ при нулевой температуре и различных значениях U . Сверху вниз: $U = D, 2D, 2.7D, 3D, 4D$. Рисунок взят из [94].

Для решения примесной задачи использовалась теория возмущений по U во втором порядке, в котором $\Sigma_{imp}(\tau) = U^2 \mathcal{G}^0(\tau) \mathcal{G}^0(-\tau)$ (точно такое же выражение справедливо и для вещественного времени). Обычно, DMFT в этом приближении называют итеративной теорией возмущений (Iterative Perturbation Theory, IPT). На графиках видно, что при $U = 2.7D$ и $U = 3D$ (вблизи точки перехода) в хаббардовских подзонах выделяется пиковая структура. К сожалению, ИРТ - приближенный и довольно грубый метод, что не позволяло с

уверенностью сказать, являлась ли структура физически релевантной.

В 2005 году М. Карски с соавторами провел высокоточные вычисления DMFT+D-DMRG и надежно подтвердил существование пиковой структуры в спектре [95] (см. рисунок 1.5).

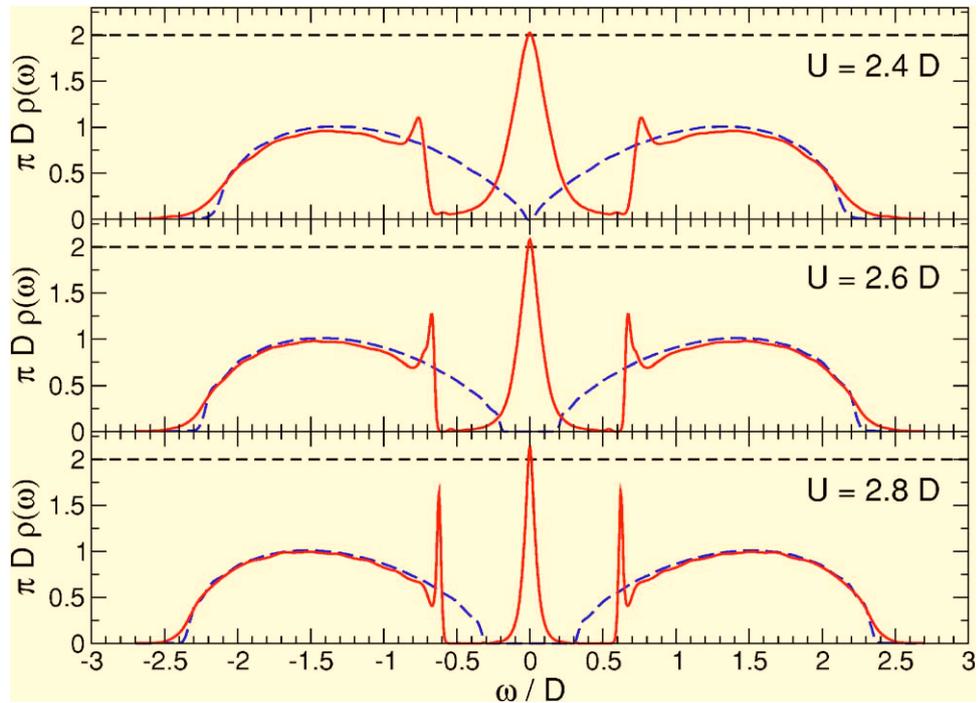


Рис. 1.5. Локальные плотности состояний полузаполненной модели Хаббарда на решетке Бете, рассчитанные методом DMFT+D-DMRG при различных значениях U . Сплошные красные линии — решения в металлической фазе, синий пунктир — изоляторные решения. Рисунок взят из [95].

Спустя три года та же группа авторов выпустила статью с подробным исследованием пиковой структуры [96]. Было высказано предположение, что пики на границах подзон связаны со взаимодействием квазичастиц центрального “кондовского” пика с теми или иными коллективными возбуждениями. Это косвенно подтверждается тем обстоятельством, что спектральный вес центрального пика и пиков в подзонах при приближении к точке перехода уменьшается одинаковым образом.

Однако строгого объяснения природы пиковой структуры подзон до сих

пор представлено не было. Нет даже ясности в вопросе, связано ли ее появление со спиновыми или зарядовыми степенями свободы многоэлектронной системы.

1.5. Проблема аналитического продолжения зашумленных численных данных

1.5.1. Постановка задачи

Как отмечалось в параграфе 1.3.4, широко используемые для решения примесных задач квантовые методы Монте-Карло дают значения температурных функций Грина (и корреляционных функций более высоких порядков) на мацубаровских частотах. Согласно уравнению (1.22) температурная ФГ однозначно связана с запаздывающей ФГ, а значит, и с реальным спектром электронных возбуждений. Однако задача об аналитическом продолжении, требуемом для восстановления спектра, — в математическом смысле некорректно поставленная задача.

В явном виде связь между спектральной функцией и температурной ФГ получается, если в определение (1.10) подставить уравнение (1.22):

$$\mathcal{G}_{\alpha\alpha}(\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A_{\alpha}(\epsilon')}{i\omega_n - \epsilon'} d\epsilon' \quad (1.141)$$

Чтобы привести это интегральное уравнение к каноническому виду, наиболее часто используемому в литературе, нужно сделать обратное Фурье-преобразование от мацубаровских частот к мнимому времени τ . При этом преобразуется ядро уравнения:

$$\mathcal{G}_{\alpha\alpha}(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(\tau, \epsilon') A_{\alpha}(\epsilon') d\epsilon', \quad K(\tau, \epsilon) = \frac{e^{-\tau\epsilon}}{1 + e^{-\beta\epsilon}} \quad (1.142)$$

Легко видеть, что поведение спектральной функции на частотах $|\epsilon'| > 1/\beta$ слабо влияет на значение интеграла, т.к. его ядро экспоненциально мало в этой области. При низких температурах лишь узкая полоса частот вблизи уровня Ферми (много уже полного спектра) дает существенный вклад в интеграл.

Чтобы восстановить спектр $A_\alpha(\epsilon)$ по $\mathcal{G}_{\alpha\alpha}(\tau)$, нужно решить обратную задачу (обратить близкий к сингулярному интегральный оператор). Результат такого обращения чрезвычайно чувствителен на высоких частотах к малым вариациям $\mathcal{G}_{\alpha\alpha}(\tau)$.

В то же время функция $\mathcal{G}_{\alpha\alpha}(\tau)$, получаемая из монте-карловского счета неизбежно содержит стохастические шумы. Это обстоятельство делает задачу численного аналитического продолжения плохо обусловленной, подобной задаче о численном обращении преобразования Лапласа [97].

При построении алгоритмов численного аналитического продолжения обычно принимают во внимание свойства неотрицательности и нормированности $A_\alpha(\epsilon)$. Однако можно сформулировать задачу более общо и искать продолжение других аналитических в верхней полуплоскости функций, не обладающих указанными свойствами. К таким функциям, представляющим физический интерес, относятся, прежде всего, недиагональные по индексам запаздывающие ФГ $G_{\alpha\beta}^R(\epsilon)$ и функции собственной энергии $\Sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)$.

1.5.2. Аппроксимация Паде

Первым методом, использованным для построения аналитического продолжения функций динамического отклика, был метод аппроксимации Паде [98].

Паде-аппроксимация порядка $[M/N]$ для комплексной функции $F(z)$ есть отношение двух полиномов:

$$R(z) = \frac{P_m(z)}{Q_n(z)} = \frac{p_0 + p_1z + p_2z^2 + \dots + p_mz^m}{1 + q_1z + q_2z^2 + \dots + q_nz^n} \quad (1.143)$$

Если известно значение функции $F(z)$ на $M + N + 1$ мацубаровских частотах, то для каждой частоты можно записать уравнение $R(i\omega_n) = F(i\omega_n)$ и из полученной системы однозначно определить все коэффициенты полиномов $\{p_n\}$ и $\{q_n\}$. Значение $F(\epsilon)$ в любой точке вещественной оси оценивается после этого как $R(\epsilon)$.

Такой подход был использован, например, в работе Д. Тирумалая и Б. Дж. Берна [99]. Они использовали аппроксимацию порядка $[N-1, N]$ (с $N = 3 \dots 7$), чтобы аналитически продолжить спектры поглощения линейного гармонического осциллятора и осциллятора Морса (потенциал $V(q) = D_e(1 - \exp[-\alpha(q - q_e)])^2$). Данные на оси мацубаровских частот получались с помощью предложенного авторами метода Монте-Карло. В результате вычислений были получены положения спектральных линий (совпадение с точными значениями — в пределах 1%) и их интенсивности (точность — не менее 10%).

Аналитическое продолжение с помощью аппроксимации Паде широко используется и по сей день, однако, для достижения удовлетворительных результатов требуются входные данные очень высокой точности [100], недоступной QMC. Поэтому Паде-аппроксимацию обычно применяют в связке с приближенными аналитическими или полуаналитическими методами решения примесных задач.

1.5.3. Метод наименьших квадратов

Естественный шаг, направленный на решение уравнения (1.142), состоит в использовании метода наименьших квадратов (МНК). Процедура, основанная на МНК, была описана Х.-Б. Шуттлером и Д.Дж. Скалапино в работе [101] и развита в [102].

В качестве системы для исследования они выбрали одномерную цепочку

с периодическими граничными условиями и гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{16} [-t(\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} + \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j) + V \hat{n}_j \hat{n}_{j+1}] \quad (1.144)$$

В ходе монтекарловского счета (модифицированный алгоритм Хирша-Фая, $T = 0.2t$) накапливалась статистика как для температурной ФГ $\mathcal{G}(\tau)$, так и для ее производных $\mathcal{G}^{(m)}(\tau)$ (уравнения движения для операторов \hat{c}^\dagger , \hat{c} позволяют связать производные ФГ со средними значениями коммутаторов вида $[\hat{H}, [\hat{H}, \dots \hat{c}]]$). Относительная погрешность результатов на концах отрезка $[0; \beta]$ составляла 0.5 – 1.0% и на два порядка больше в середине отрезка.

Спектральная функция $A_k(\epsilon)$ искалась в форме суперпозиции конечного числа прямоугольников (4 или 8) с равной шириной и варьируемыми высотами $\{a_f\}$.

Функционал среднеквадратичного отклонения брался в виде

$$D(\{a_f\}) = \sum_i \sum_{m=0}^2 \left(\frac{\mathcal{G}^{(m)}(\tau_i) - \mathcal{G}_F^{(m)}(\tau_i; \{a_f\})}{\Delta \mathcal{G}_i^{(m)}} \right)^2 \quad (1.145)$$

$$\mathcal{G}_F^{(m)}(\tau_i; \{a_f\}) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(-\epsilon')^m e^{-\tau \epsilon'}}{1 + e^{-\beta \epsilon'}} A(\epsilon'; \{a_f\}) d\epsilon' \quad (1.146)$$

Здесь τ_i — точки дискретной сетки на оси мнимого времени, $\Delta \mathcal{G}_i^{(m)}$ — стандартное отклонение $\mathcal{G}^{(m)}(\tau_i; \{a_f\})$, оцениваемое алгоритмом QMC. Функционал $D(\{a_f\})$ минимизировался по $\{a_f\}$ с дополнительным условием неотрицательности $A(\epsilon'; \{a_f\}) \geq 0$.

Поскольку вычислительные возможности не позволяли авторам существенно увеличить разрешение искомого спектра (число прямоугольников), можно говорить лишь о качественном совпадении восстановленного спектра с результатами точной диагонализации гамильтониана (1.144). Стоит, однако, отметить, что учет условия неотрицательности радикально стабилизировал метод, подавив большие нефизичные флуктуации решения.

В настоящее время МНК практически не применяется, поскольку не обеспечивает достаточной регуляризации спектра. Тем не менее, идея об использовании априорной информации о виде решения воплощается так или иначе во всех современных методиках.

1.5.4. Динамический метод

Первый подход, воплощающий идею регуляризации (сглаживания) решения, — так называемый динамический метод. Он был предложен М. Джарреллом и О. Бихамом [103].

В нем спектральная функция представляется в виде суммы эквидистантных δ -пиков:

$$A(\epsilon) = \sum_{m=1}^L A_m \delta(\epsilon - \epsilon_m), \quad \epsilon_{m+1} - \epsilon_m \equiv \Delta\epsilon \quad (1.147)$$

Полное число пиков равно числу частот Мацубары, на которых измеряется функция $\mathcal{G}(\omega_n)$. Расстояние между пиками выбирается с таким расчетом, чтобы сетка полностью покрывала спектр. Для систем с электрон-дырочной симметрией $\Re \mathcal{G}(\omega_n) = 0$ и задача (1.141) эквивалентно записывается в виде уравнения

$$\frac{\Im \mathcal{G}(\omega_n)}{\omega_n} = - \sum_{m=1}^L \frac{A_m}{\epsilon_m^2 + \omega_n^2} \quad (1.148)$$

Идея метода состоит в том, чтобы рассматривать A_m в качестве обобщенных координат некоторой классической динамической системы, а последнее уравнение понимать как условие равновесия этой системы. Динамика этой системы (в фиктивном времени t) определяется потенциалом

$$\mathcal{V}_1(\{A_m\}) = \sum_{n=1}^L \frac{\Im \mathcal{G}(\omega_n)}{\omega_n} A_n + \frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^L \frac{A_n A_m}{\epsilon_m^2 + \omega_n^2} \quad (1.149)$$

Минимум этого потенциала при условии неотрицательности A_m отвечает МНК-решению. Чтобы регуляризовать задачу, к потенциалу добавляют еще два сла-

гаемых:

$$\mathcal{V}_2(\{A_m\}) = C_S \left(\sum_{m=1}^L A_m - 1 \right)^p + C_G \sum_{m=1}^L \frac{(A_{m-1} - 2A_m + A_{m+1})^2}{\Delta \epsilon^4} \quad (1.150)$$

Первое слагаемое “подталкивает” систему к выполнению правила сумм $\int_{-\infty}^{+\infty} A(\epsilon) d\epsilon = 1$ (показатель p может быть любым четным числом, но наилучшие результаты получаются с $p = 4$). Второе слагаемое есть разностная аппроксимация сглаживающего функционала $C_G \int_{-\infty}^{+\infty} (A''(\epsilon))^2 d\epsilon$, делающего энергетически невыгодными распределения A_m , быстро меняющиеся от номера к номеру.

Уравнения движения с потенциалом $\mathcal{V} = \mathcal{V}_1 + \mathcal{V}_2$ решались методом Рунге-Кутты 4-го порядка до тех пор, пока амплитуды A_m не приходили к равновесным значениям — остаточные обобщенные силы не превосходили погрешность $\mathcal{G}(\omega_n)$.

Схема показала хорошие результаты (погрешность до 10%) в синтетическом тесте с трехпиковой симметричной спектральной функцией и аддитивным шумом на уровне 10% или ниже. Кроме того, удалось качественно проследить изменения спектра полузаполненной однозонной модели Андерсона для различных значений U и параметра гибридизации $\Delta = \pi\rho(0)V^2$ (примесная задача решалась методом Хирша-Фая).

1.5.5. Теорема Байеса и метод максимальной энтропии

На сегодняшний день стандартом де-факто в области численного аналитического продолжения стал метод максимальной энтропии (MaxEnt, MEM), разработанный Р.Н. Сильвером, Дж. Губернатисом, Д.С. Сивией и М. Джарреллом в серии работ [104–106]. MEM применим не только для определения спектральной плотности по температурной ФГ, но и для решения уравнений типа (1.142) с другими ядрами $K(\tau, \epsilon)$ при условии, что искомая функция $A(\epsilon)$

обладает известной нормой. Исчерпывающий обзор метода и описание некоторых его применений содержится в [107].

Фундаментом метода являются теорема Байеса и статистический принцип максимальной энтропии [108]. Теорема Байеса, одна из основных теорем элементарной теории вероятностей, гласит, что для двух событий a и b выполняется тождество

$$P(a, b) = P(a|b)P(b) = P(b|a)P(a), \quad (1.151)$$

где $P(a, b)$ — совместная вероятность a и b , $P(a)$ и $P(b)$ — вероятности a и b , $P(a|b)$ и $P(b|a)$ — условные вероятности (вероятность a при условии, что произошло b , и наоборот). Вероятности и условные вероятности нормированы на единицу:

$$\sum_a P(a) = \sum_b P(b) = \sum_a P(a|b) = \sum_b P(b|a) = 1 \quad (1.152)$$

Кроме того, имеет место формула полной вероятности:

$$P(a) = \sum_b P(a|b)P(b) \quad (1.153)$$

Применительно к задаче аналитического продолжения под событием a будем понимать наблюдение некоторой конкретной функции $\bar{\mathcal{G}}(\tau)$ в результате QMC-усреднения. Тогда событие b означает, что точным решением (1.142) является определенная функция $A(\epsilon)$. Естественно задать вопрос об условной вероятности $P(A|\bar{\mathcal{G}})$ (апостериорная вероятность). По теореме Байеса

$$P(A|\bar{\mathcal{G}}) = P(\bar{\mathcal{G}}|A)P(A)/P(\bar{\mathcal{G}}) \quad (1.154)$$

Вероятность $P(\bar{\mathcal{G}}|A)$ называется функцией правдоподобия, а $P(A)$ — априорной вероятностью. Теорема Байеса не конкретизирует, как выглядят эти функции; чтобы определить их, требуются дополнительные соображения. $P(\bar{\mathcal{G}})$ играет роль нормировочной константы и для каждого конкретного $\bar{\mathcal{G}}$ выражается по

формуле полной вероятности через функцию правдоподобия и априорную вероятность.

Перед тем, как выбрать $P(\bar{\mathcal{G}}|A)$, необходимо привести исходное интегральное уравнение к дискретному виду. Определим на отрезке $\tau \in [0; \beta]$ равномерную сетку с L точками τ_i , а на вещественной оси частот — сетку с интервалом $\Delta\epsilon$ и N точками ϵ_n . Сеточное представление (1.142) имеет вид

$$\mathcal{G}_i = \sum_{n=1}^N K_{in} A_n \quad (1.155)$$

$$K_{in} \equiv \frac{e^{-\tau_i \epsilon_n}}{1 + e^{-\beta \epsilon_n}}, \quad A_n \equiv A(\epsilon_n) \Delta\epsilon_n \quad (1.156)$$

Если никакой априорной информации о виде решения $A(\epsilon)$ нет или она неважна, то в формуле (1.154) следует положить $P(A)$ константой. Это означает, что $P(A|\bar{\mathcal{G}}) \propto P(\bar{\mathcal{G}}|A)$, т.е. максимум апостериорной вероятности достигается при том же $A(\epsilon)$, что и максимум функции правдоподобия. Разумно потребовать, чтобы в этом случае воспроизводилось решение, полученное методом МНК. Для этого функция правдоподобия выбирается в виде

$$P(\bar{\mathcal{G}}|A) \propto e^{-\chi^2/2} \quad (1.157)$$

$$\chi^2 \equiv \sum_{i,j=1}^L (\bar{\mathcal{G}}_i - \sum_{n=1}^N K_{in} A_n) [\hat{C}^{-1}]_{ij} (\bar{\mathcal{G}}_j - \sum_{n=1}^N K_{jn} A_n)$$

Здесь \hat{C} — матрица ковариаций, которая вместе с $\bar{\mathcal{G}}_i$ оценивается в ходе QMC-счета:

$$\hat{C}_{ij} \equiv \overline{(\mathcal{G}_i - \bar{\mathcal{G}}_i)(\mathcal{G}_j - \bar{\mathcal{G}}_j)} \quad (1.158)$$

Легко видеть, что максимизация $e^{-\chi^2/2}$ равносильна минимизации χ^2 , т.е. критерию МНК. Метод наименьших квадратов имеет условие применимости: значения \mathcal{G}_i должны быть распределены согласно многомерной гауссовой функции. Строго говоря, для реальных выходных данных QMC это условие никогда не выполняется. Однако функцию χ^2 все же можно использовать, предварительно убедившись, что распределение достаточно близко к гауссову.

Как отмечалось в параграфе 1.5.3, МНК не обеспечивает должной регуляризации решения. Поэтому, следующий важный шаг — обеспечение такой регуляризации правильным выбором априорного распределения $P(A)$.

Поскольку функция $A(\epsilon)$ неотрицательна и нормирована на единицу (или, по крайней мере, на известную константу), ее можно интерпретировать как плотность вероятности. Согласно принципу максимальной энтропии, наиболее вероятно распределение $A(\epsilon)$, доставляющее максимум функционалу энтропии

$$S = - \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon A(\epsilon) \ln[A(\epsilon)] \quad (1.159)$$

В отсутствие каких-либо входных данных $P(A|\bar{\mathcal{G}}) \propto P(A)$ и функция $A(\epsilon)$, максимизирующая априорную вероятность, должна максимизировать и апостериорную. Это условие выполняется, если положить

$$P(A) \propto e^{\alpha S}, \quad \alpha > 0 \quad (1.160)$$

Обычно функционал энтропии записывают в несколько иной форме, нежели в (1.159):

$$S = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon (A(\epsilon) - m(\epsilon) - A(\epsilon) \ln[A(\epsilon)/m(\epsilon)]) \quad (1.161)$$

$$S = \sum_{n=1}^N (A_n - m_n - A_n \ln[A_n/m_n]) \quad (1.162)$$

Функция $m(\epsilon)$ называется моделью по умолчанию. Определенная таким образом энтропия максимальна и равна нулю при $A(\epsilon) = m(\epsilon)$. Поэтому, чтобы в терминах энтропии предпочтение отдавалось сглаженным спектральным функциям, в качестве модели по умолчанию, как правило, выбирают кривую Гаусса или прямоугольник.

Итак, собирая вместе все части, получаем финальное выражение для апо-

стерииорной вероятности в методе максимальной энтропии:

$$P(A|\bar{\mathcal{G}}) \propto e^Q, \quad Q \equiv \alpha S - \chi^2/2 \quad (1.163)$$

Искомый спектр $\hat{A}(\epsilon)$ определяется из условия максимума вероятности:

$$\left. \frac{\delta Q}{\delta A} \right|_{A=\hat{A}} = 0 \quad (1.164)$$

Однако одного этого условия недостаточно, поскольку функционал Q содержит произвольный внешний параметр α , величина которого определяет вклад энтропийного слагаемого и, как следствие, степень сглаживания.

Было предложено три способа обходиться с этим параметром. В связи с этим говорят о трех разновидностях метода максимальной энтропии.

1. Исторический MEM. Значение α подбирается, исходя из условия $\chi^2 = L$ (L — число входных значений $\bar{\mathcal{G}}_i$). Если входные данные распределены по Гауссу, это условие должно выполняться строго. В противном случае его следует рассматривать как допущение *ad hoc*. Вариационную задачу $P(A|\bar{\mathcal{G}}) = \max_A$ с дополнительным условием на α можно решать стандартными численными методами оптимизации.
2. Классический MEM. Вопрос об определении α включается в общую байесову логику рассмотрения задачи. Допустим, что выбор некоторого α также является событием. Верна следующая цепочка равенств:

$$\begin{aligned} P(A, \alpha|\bar{\mathcal{G}}) &= P(\bar{\mathcal{G}}|A, \alpha)P(A, \alpha)/P(\bar{\mathcal{G}}) = \\ &= P(\bar{\mathcal{G}}|A, \alpha)P(A|\alpha)P(\alpha)/P(\bar{\mathcal{G}}) = P(\bar{\mathcal{G}}|A)P(A|\alpha)P(\alpha)/P(\bar{\mathcal{G}}) \end{aligned} \quad (1.165)$$

Нормировочный фактор $P(\bar{\mathcal{G}})$ равен $Z_L Z_S(\alpha)$, где множители Z_L и $Z_S(\alpha)$ нормируют функцию правдоподобия и априорную вероятность $P(A|\alpha)$

соответственно. Вероятность $P(\alpha)$ обычно выбирается равной $1/\alpha$ (априорная вероятность Джефффри) или константе.

$$P(A, \alpha|\bar{\mathcal{G}}) = P(\alpha) \frac{e^Q}{Z_L Z_S(\alpha)}, \quad P(\alpha|\bar{\mathcal{G}}) = P(\alpha) \sum_A \frac{e^Q}{Z_L Z_S} \quad (1.166)$$

Используя это совместное распределение, можно далее записать

$$P(A|\bar{\mathcal{G}}) = \sum_{\alpha} P(A|\bar{\mathcal{G}}, \alpha) P(\alpha, \bar{\mathcal{G}}) = \sum_{\alpha} P(A|\bar{\mathcal{G}}, \alpha) P(\alpha) \sum_A \frac{e^Q}{Z_L Z_S} \quad (1.167)$$

Если количество точек $\bar{\mathcal{G}}_i$ велико, распределение $P(\alpha|\bar{\mathcal{G}})$ часто представляет собой узкий пик при $\alpha = \hat{\alpha}$. Тогда с хорошей точностью можно считать $P(A|\bar{\mathcal{G}}) \propto P(A|\bar{\mathcal{G}}, \hat{\alpha})$, чем и решается вопрос о выборе α .

3. Метод Р. Брайана [109]. В этом методе итоговая спектральная функция есть результат усреднения функций $\hat{A}^{(\alpha)}$, полученных при фиксированном α , по всем значениям α .

$$\hat{A}(\epsilon) = \int_0^{+\infty} \hat{A}^{(\alpha)}(\epsilon) P(\alpha|\bar{\mathcal{G}}) d\alpha \quad (1.168)$$

Вес $P(\alpha|\bar{\mathcal{G}})$, с которым производится усреднение, берется из уравнения (1.166). Сейчас данная разновидность MEM наиболее актуальна.

В целом, MEM является установившейся методикой с надежным теоретическим фундаментом и 20-ти летней историей практического применения. Несмотря на это, она не лишена недостатков. В частности, она годится только для прямого восстановления знакоопределенных функций с известной нормой. Еще один недостаток состоит в том, что энтропийная форма $P(A)$ зачастую ведет к излишнему сглаживанию, искажениям спектра и потере узких спектральных особенностей. Это обстоятельство подталкивает к поиску альтернативных методов, не основанных на принципе максимума энтропии.

1.5.6. Стохастический метод Сэндвика

В 1998 году А. Сэндвик предложил метод, так же, как и MEM, основанный на рассуждениях с использованием теоремы Байеса, но призванный решить проблему искажений, вносимых энтропийным слагаемым [110]. Было предложено полностью отказаться от энтропийной формы $P(A) \propto e^{\alpha S}$ и считать равновероятными все спектры, отвечающие одному и тому же значению χ^2 . Вместо того, чтобы максимизировать апостериорную вероятность (в отсутствие энтропийного слагаемого это соответствовало бы решению в смысле МНК), нужно усреднять $A(\epsilon)$ по ансамблю всех неотрицательных нормированных спектров с весом

$$P(A|\bar{\mathcal{G}}) \propto \exp(-\chi^2[A]/\Theta) \quad (1.169)$$

По сути, это каноническое распределение Гиббса для фиктивного статистического ансамбля с энергией χ^2 при температуре Θ . Температура Θ задает характерный масштаб флуктуаций вокруг наиболее вероятного решения. В частности, в пределе $\Theta \rightarrow 0$ вес $P(A|\bar{\mathcal{G}})$ локализован в узкой окрестности МНК-решения. Такое решение содержит нефизические структуры, наведенные шумом входных данных. Если же температура слишком высока, усреднение эффективно охватывает множество совершенно различных спектров, в том числе и плохо согласующихся с $\bar{\mathcal{G}}$. Это приводит к полному смазыванию решения.

Впоследствии было разработано несколько методик выбора оптимального Θ . Сам Сэндвик использовал алгоритм имитации отжига — случайные блуждания в пространстве возможных спектров $A(\epsilon)$ (согласно критерию Метрополиса) с постепенным понижением температуры. Если начальная температура достаточно высока (больше, чем среднее расстояние между локальными минимумами χ^2) и опускается достаточно медленно (квазистационарно), то алгоритм с хорошей точностью сходится к глобальному минимуму $\chi^2[A]$. При

каждом значении Θ помимо $\langle A(\epsilon) \rangle_{\Theta}$ вычислялась средняя энтропия $\langle S[A] \rangle_{\Theta}$ (см. (1.159)). Оптимальное значение $\Theta = \Theta^*$, по предложению автора, соответствует последнему локальному максимуму на графике $\langle S[A] \rangle (\ln 1/\Theta)$, после которого следует резкое падение средней энтропии. Это падение связано с появлением в спектре шумовых структур.

О.Ф. Сильюасен в работе [111] высказал точку зрения, согласно которой всегда нужно полагать $\Theta^* = 2$; вес отдельного спектра при усреднении должен диктоваться исключительно входными данными. С одной стороны, это условие, как правило, означает более высокие требования к алгоритму QMC, но с другой стороны, лучше работает для спектральных функций с низкой энтропией, например, содержащих несколько острых пиков.

Связь между методом Сэндвика и MEM была прояснена в статье К. Бича [112]. Он ввел в теорию Сэндвика модель по умолчанию $m(\epsilon)$, определив гладкое отображение ϕ оси реальных частот на отрезок $[0; 1]$:

$$\phi(\epsilon) \equiv \int_{-\infty}^{\epsilon} d\epsilon' m(\epsilon') \quad (1.170)$$

Легко видеть, что если модель по умолчанию нормирована на единицу, то $\phi(-\infty) = 0$ и $\phi(+\infty) = 1$. Спектральная функция $A(\epsilon)$ заменяется на безразмерную функцию $n(x)$:

$$n(x) \equiv \frac{A(\phi^{-1}(x))}{m(\phi^{-1}(x))}, \quad \int_0^1 dx n(x) = \int_0^1 d\phi(\epsilon) \frac{A(\epsilon)}{m(\epsilon)} = 1 \quad (1.171)$$

Функционал χ^2 (до дискретизации) в новых переменных имеет вид:

$$\chi^2[n(x)] \equiv \int_0^{\beta} \frac{d\tau}{\sigma^2(\tau)} \left| \int_0^1 dx K(\tau, \phi^{-1}(x)) n(x) - \bar{\mathcal{G}}(\tau) \right|^2 \quad (1.172)$$

(без ограничения общности предполагается, что для разных моментов времени τ корреляций между $\bar{\mathcal{G}}(\tau)$ нет, а $\sigma^2(\tau)$ — соответствующие дисперсии).

Метод Сэндвика состоит в вычислении среднего значения $n(x)$ с учетом условия нормировки:

$$\langle n(x) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[n(x)] n(x) \exp(-\chi^2[n(x)]/\Theta)}{\int \mathcal{D}[n(x)] \exp(-\chi^2[n(x)]/\Theta)} \quad (1.173)$$

$$\mathcal{D}[n(x)] \equiv \int_0^{+\infty} \left(\prod_x dn(x) \right) \delta \left(\int_0^1 dx n(x) - 1 \right) \quad (1.174)$$

Искомая плотность состояний линейно связана с усредненным $n(x)$:

$$\langle A(\epsilon) \rangle = \langle n(\phi(\epsilon)) \rangle m(\epsilon) \quad (1.175)$$

Бич показал, что вычисление интегралов в (1.173) методом перевала (среднеполевое решение) эквивалентно методу максимальной энтропии. Кроме этого, он оценил $\ln(1/\Theta^*)$ как точку излома на зависимости $\ln \chi^2$ от $\ln(1/\Theta)$. Эта точка соответствует “кристаллизации” — фазовому переходу, при котором корреляции $\langle n(x)n(y) \rangle - \langle n(x) \rangle \langle n(y) \rangle$ становятся короткодействующими.

На рисунке 1.6 представлены результаты сравнения различных версий MEM и стохастического метода Сэндвика. В целях тестирования была взята спектральная плотность сверхпроводника в теории БКШ с затравочной шириной зоны $W = 6$ и полушириной щели $\Delta = 0.25$:

$$A(\epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{W} \frac{|\epsilon|}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}}, & \Delta < |\epsilon| < W/2 \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (1.176)$$

Эта функция была подставлена в исходное интегральное уравнение (1.142), после чего к полученной $\bar{\mathcal{G}}(\tau)$ был добавлен аддитивный шум и применен каждый из сравниваемых алгоритмов. Спектральная плотность БКШ содержит резкие края зоны и корневую расходимость на границах щели, благодаря чему ее восстановление является хорошим тестом для алгоритмов аналитического продолжения.

Описанные вариации метода Сэндвика можно сравнить с историческим MEM, т.к. и там и там фиксируется значение регуляризационного параметра

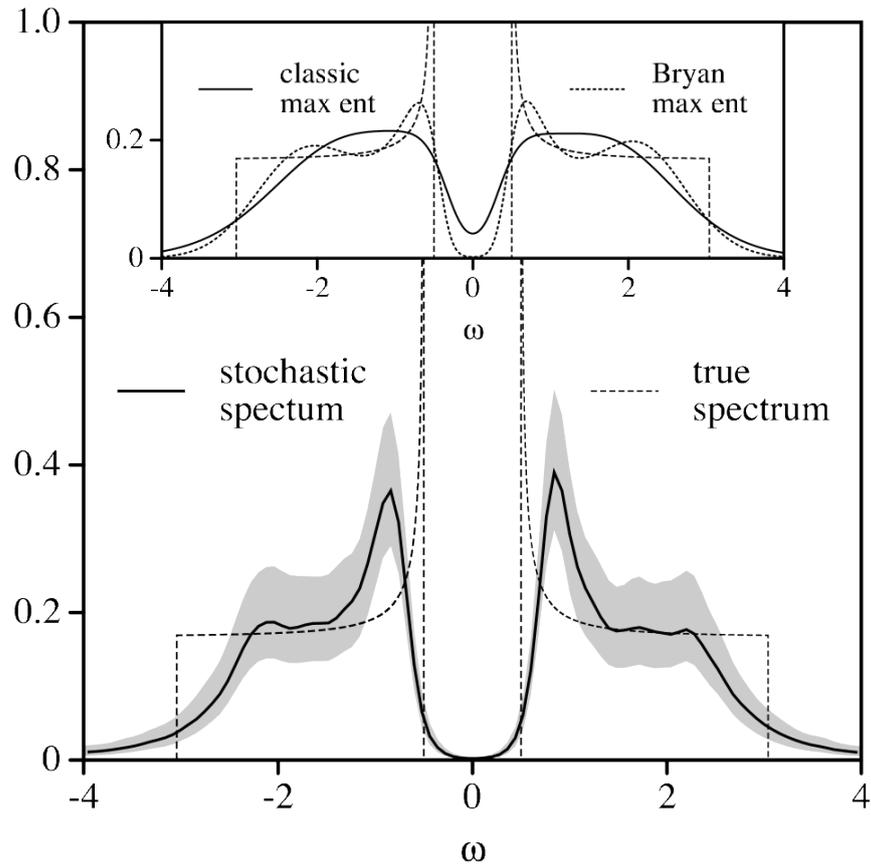


Рис. 1.6. Результаты аналитического продолжения спектральной плотности БКШ. Сплошная кривая — метод Сэндвика (серым обозначен статистический разброс около среднего), пунктир — точное решение (1.176). На вставке: сплошная линия — классический MEM, точки — MEM Брайана, пунктир — точное решение (1.176). Рисунок взят из статьи [112].

(Θ^* и α соответственно). Можно применить прием из классического MEM к вопросу выбора Θ^* . Это было сделано в недавней работе [113]. Значения $n(x)$, полученные при фиксированных Θ , усреднялись с весом

$$P(\Theta|\bar{\mathcal{G}}) \propto P(\Theta)\Theta^{-L/2} \int \mathcal{D}[n(x)] \exp(-\chi^2[n(x)]/\Theta) \quad (1.177)$$

Однако это усложнение процедуры привело лишь к небольшим изменениям спектров.

1.5.7. Метод Мищенко

В 2000 году А.С. Мищенко с соавторами опубликовал работу, посвященную исследованию полярона Фрелиха с помощью квантового метода Монте-Карло [114]. Аналитическое продолжение в этой работе выполнялось с помощью оригинальной схемы, стоящей особняком от двух предыдущих групп методов. В качестве мотивации, помимо обычных претензии к МЕМ (искажение спектра, чрезмерное сглаживание) был высказан аргумент, касающийся процедуры дискретизации спектра. Использование фиксированной сетки по энергии ведет к невозможности воспроизвести достаточно узкие резонансы, попадающие между узлами сетки. Но именно такая возможность была важна в рамках изучаемой физической задачи.

В разработанной схеме результирующая спектральная функция получается как среднее арифметическое M выборочных спектров:

$$A(\epsilon) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \tilde{A}^{(j)}(\epsilon) \quad (1.178)$$

Сами выборочные спектры генерируются в ходе следующей процедуры. Выборочный спектр представляется в виде суммы K прямоугольников с меняющимися в известных пределах ширинами, высотами и положениями центров:

$$\tilde{A}(\epsilon) = \sum_{t=1}^K \chi_{\{h_t, w_t, c_t\}}(\epsilon) \quad (1.179)$$

$$\chi_{\{h_t, w_t, c_t\}}(\epsilon) = h_t \theta(w_t/2 - |\epsilon - c_t|) \quad (1.180)$$

Ширины и высоты прямоугольников связаны правилом сумм $\sum_{t=1}^K h_t w_t = 1$.

Работа алгоритма начинается со случайной конфигурации прямоугольников $S(0)$. На каждом шаге случайным образом предлагается одно из следующих элементарных обновлений конфигурации (любое обновление сохраняет полный спектральный вес):

- смещение центра одного прямоугольника;
- изменение ширины одного прямоугольника без изменения его веса;
- изменение высот двух прямоугольников без изменения суммарного веса;
- вставка прямоугольника + уменьшение веса другого прямоугольника;
- удаление прямоугольника + увеличение веса другого прямоугольника;
- разделение прямоугольника на два равных;
- слияние двух прямоугольников.

Обновление $C(r) \rightarrow C(r + 1)$ принимается с вероятностью, контролируемой критерием

$$P(r \rightarrow r + 1) = \begin{cases} 1, & D[C(r + 1)] < D[C(r)], \\ f(D[C(r)]/D[C(r + 1)]), & D[C(r + 1)] \geq D[C(r)]. \end{cases} \quad (1.181)$$

Здесь $D[C(r)]$ — функция относительной невязки при подстановке спектра $\tilde{A}(\epsilon)$ в уравнение (1.142):

$$D[\tilde{A}(\epsilon)] \equiv \int_0^\beta \left| \bar{\mathcal{G}}(\tau) - \int_{-\infty}^{+\infty} K(\tau, \epsilon') \tilde{A}(\epsilon') d\epsilon' \right| \bar{\mathcal{G}}^{-1}(\tau) d\tau \quad (1.182)$$

Вероятность $f(x)$ может быть любой монотонной функцией, удовлетворяющей граничным условиям $f(0) = 0$ и $f(1) = 1$. Мищенко использовал степенные зависимости $f(x) = x^{1+d}$ с $d > 0$. После определенного числа принятых обновлений делается “снимок” выборочного спектра, отвечающего текущей конфигурации.

В ходе организованных случайных блужданий большая часть конфигураций $C(r)$ будет лежать вблизи локальных минимумов невязки D . При этом существует вероятность перехода от одного минимума к другому, что важно для получения существенно различающихся выборочных спектров.

Очевидно, варьирование всех параметров прямоугольников позволяет решить проблему статической сетки. Практические тесты показали, что метод обладает очень хорошим разрешением и позволяет одновременно восстанавливать как крупные спектральные зоны, так и очень узкие резонансы (разница в спектральном весе может достигать сотен раз). Платой за это являются ресурсоемкость и высокие требования к объему накапливаемой статистики.

Глава 2

Аналитическое продолжение зашумленных численных данных по методу оптимальной стохастической регуляризации

2.1. Оптимальный регуляризационный функционал

Чтобы построить аналитическое продолжение функции $F(\omega)$ с мнимой на вещественную ось, требуется решить линейное интегральное уравнение относительно неизвестной комплексной функции $F(\epsilon)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{F(\epsilon)}{\epsilon - i\omega_n} \frac{d\epsilon}{2\pi i} = F(i\omega_n), \quad \hat{K}F(\epsilon) \equiv F(i\omega_n), \quad (2.1)$$

используя некоторую априорную информацию (предполагается, что $F(\omega)$ не имеет особенностей в верхней полуплоскости и спадает при $\omega \rightarrow \infty$, $\Im\omega > 0$). Уравнение (1.142) является переформулированной, но эквивалентной задачей. Здесь \hat{K} — плохо обусловленный линейный интегральный оператор, который, действуя на функцию, аналитически продолжает ее с вещественной оси на мнимую ось, а функция $F(i\omega_n)$ известна из QMC-расчета с некоторой погрешностью.

В случае функций Грина $F(\epsilon) \equiv G^R(\epsilon)$ и $F(i\omega_n) \equiv \mathcal{G}(\omega_n)$.

Если мы введем пару ортогональных базисов и разложим функции $F(\epsilon)$ и $F(i\omega)$ по ним, то интегральное уравнение станет системой линейных алгебраических уравнений

$$Kx = y, \quad (2.2)$$

где K — плохо обусловленная матрица, а правая часть y известна с некоторым уровнем погрешности. Формально эта система включает бесконечное число

уравнений, однако, можно ожидать, что при правильном выборе базисов возможно эффективно свести ее к конечной системе. Один из возможных выборов базисов, пригодный для практических расчетов описан в разделе 2.2.

Отправная точка предложенного метода — регуляризация некорректной задачи по Тихонову [115]. Будем искать вектор \mathbf{x} , минимизирующий функционал Тихонова:

$$\mathcal{F}[\mathbf{x}; R] = \|K\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + (\mathbf{x}, R\mathbf{x}) \quad (2.3)$$

Здесь R — регуляризирующая эрмитова матрица. Вектор \mathbf{y} известен приблизительно: $\mathbf{y} = \bar{\mathbf{y}} + \delta\mathbf{y}$, где $\bar{\mathbf{y}}$ — математическое ожидание вектора \mathbf{y} , а отклонение $\delta\mathbf{y}$ — случайная величина, распределенная с нулевым средним и характеризуемая матрицей ковариаций \hat{C}_y . Матрица \hat{C}_y определена как

$$\hat{C}_y = \overline{\delta\mathbf{y} \otimes \delta\mathbf{y}^\dagger}, \quad \overline{\delta\mathbf{y}} = 0 \quad (2.4)$$

(здесь и далее горизонтальная черта над выражением означает его матожидание, к которому сходится QMC-счет).

Варьируя функционал $\mathcal{F}[\mathbf{x}; R]$ по \mathbf{x} , можно получить условие на вектор \mathbf{x} , который доставляет ему минимум при заданных \mathbf{y} и R :

$$\mathbf{x} = XK^\dagger \mathbf{y}, \quad \text{где } X \equiv (K^\dagger K + R)^{-1} \quad (2.5)$$

Предположим, что вектор $\bar{\mathbf{x}}$ — точное решение системы (2.2) с точно известной правой частью: $K\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{y}}$. Мы усредняем среднеквадратичное отклонение \mathbf{x} от $\bar{\mathbf{x}}$ по всем возможным значениям случайного вектора $\delta\mathbf{y}$, чтобы получить следующее:

$$\overline{\|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}\|^2} = \text{Tr}\{XAX - 2XB\} + \text{Tr}\{\bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^\dagger\} \quad (2.6)$$

$$A \equiv K^\dagger K \bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^\dagger K^\dagger K + K^\dagger C_y K \quad (2.7)$$

$$B \equiv K^\dagger K \bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^\dagger \quad (2.8)$$

Очевидно, необходимо правильно подобрать регуляризующую матрицу R для того, чтобы обеспечить достаточно малое значение $\overline{\|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}\|^2}$. С другой стороны, ожидаемый вид решения $\bar{\mathbf{x}}$ не может быть определен или даже надежно оценен на основании лишь результатов QMC. Поэтому построение регуляризующего алгоритма подразумевает использование дополнительной информации о свойствах решения, известной *a priori*.

Вообще говоря, использование априорной информации означает, что ожидаемое решение $\bar{\mathbf{x}}$ не произвольно, а попадает в определенный класс возможных решений. Например, можно предположить, что результирующая функция меняется не слишком быстро, принимает значения известного порядка величины и т.п. Иными словами, существует априорное распределение $\bar{\mathbf{x}}$, “локализованное” вокруг этого класса. Мы вводим средние по этому распределению и обозначаем соответствующее усреднение угловыми скобками $\langle \dots \rangle$. Разумно потребовать, чтобы регуляризующий функционал с матрицей R доставлял минимум отклонению $\overline{\|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}\|^2}$, усредненному по выбранному распределению возможных решений:

$$\langle \overline{\|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}\|^2} \rangle = \text{Tr}(X\langle A \rangle X - 2X\langle B \rangle) + \text{Tr}\langle \bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^\dagger \rangle = \min_R \quad (2.9)$$

Основная идея предложенного метода состоит в том, чтобы решить эту вариационную задачу на R , а после этого получить \mathbf{x} по формуле (2.5). Одно из возможных распределений, которое используется далее в практических расчетах, обсуждается в разделе 2.3. Однако уже сейчас ясно: все, что необходимо знать о возможных решениях, — это первый и второй моменты априорного распределения \mathbf{x} , т.к. только эти величины появляются в (2.9) (учитывая выражения (2.7) и (2.8) для A и B).

Решая вариационную задачу (2.9) и учитывая дополнительное условие $\delta R = \delta R^\dagger$, можно получить уравнение на матрицу X :

$$\langle A \rangle X + X\langle A \rangle = \langle B \rangle + \langle B^\dagger \rangle \quad (2.10)$$

Таким образом мы формально приходим к системе $L(L + 1)/2$ линейных уравнений для определения всех элементов матрицы X (если $\langle A \rangle$ и $\langle B \rangle$ — квадратные матрицы размером $L \times L$). Однако существует более эффективный способ решить систему (2.10).

Обозначим собственные значения эрмитовой матрицы $\langle A \rangle$ через λ_i и произведем унитарное преобразование в базис ее собственных векторов. В этом базисе решение уравнения (2.10) можно выразить явно (штрихами помечены матричные элементы в собственном базисе):

$$X'_{ij} = \frac{B'_{ij} + (B^*_{ji})'}{\lambda_i + \lambda_j}, \quad 1 \leq i, j \leq L \quad (2.11)$$

Такая замена базиса позволяет организовать численное решение системы эффективным образом. Процедура диагонализации для матрицы $\langle A \rangle$ достаточно устойчива, т.к. эта матрица эрмитова. Преимущество такого подхода по сравнению с прямым решением (2.10) состоит в том, что вместо решения системы $L(L + 1)/2$ уравнений ($\propto L^6$ операций) достаточно диагонализировать матрицу размером $L \times L$ ($\propto L^3$ операций), после чего воспользоваться формулой (2.11) ($\propto L^2$ операций).

Следует отметить, что формула (2.11) однозначно дает конечные выражения для всех матричных элементов X'_{ij} , т.к. знаменатель в ней всегда положителен. Действительно, матрица $K^\dagger K$ неотрицательно определена, ибо $\sum_j K^\dagger_{ij} K_{ji} = \sum_j |K_{ji}|^2 \geq 0$. Матрица $\langle \bar{x} \bar{x}^\dagger \rangle$ — корреляционная матрица, обладающая тем же свойством в силу определения. Наконец, матрица C_y также положительно определена при условии, что вектор y обладает ненулевой погрешностью (все компоненты имеют ненулевую дисперсию). Таким образом мы убеждаемся, что $\langle A \rangle$ — положительно определенная матрица, а, следовательно, все ее собственные значения положительны.

Тем не менее, программная реализация метода встретилась с трудностями, т.к. численное решение сильно подвержено ошибкам округления, воз-

никающим в процессе диагонализации. Численное сингулярное разложение (SVD), применяемое в таких случаях, не помогло существенно улучшить ситуацию. Чтобы подавить ошибки округления, была использована программная библиотека MPFR (Multiple-Precision Floating-point computations with correct Rounding) для языка C, реализующая арифметику с числами произвольной точности.

2.2. Выбор представления. Корреляционная матрица

Теперь мы применим абстрактные результаты предыдущего раздела непосредственно к задаче аналитического продолжения функции $F(\omega)$ с мнимой оси на вещественную, предполагая, что $F(\omega)$ аналитична в верхней комплексной полуплоскости. Квантовый метод Монте-Карло дает значения функции F на мацубаровских частотах $i\omega_n$:

$$F_n \equiv F(i\omega_n), \quad n = \overline{1, N} \quad (2.12)$$

Пусть ω_0 — характерный энергетический масштаб задачи (другими словами, естественная единица частоты). Введем конформное отображение верхней полуплоскости частоты на круг единичного радиуса с центром в начале координат:

$$\omega \leftrightarrow z : \quad z = \frac{\omega - i\omega_0}{\omega + i\omega_0}, \quad \omega = i\omega_0 \frac{1+z}{1-z} \quad (2.13)$$

Отображение проиллюстрировано на рисунке 2.1. Все мнимые (мацубаровские) частоты отображаются на отрезок $z \in [-1; 1]$; вещественные частоты соответствуют окружности радиуса 1.

Если F аналитична в верхней полуплоскости как функция комплексной частоты, она обладает тем же свойством внутри единичного круга на плоскости переменной z и, следовательно, может быть разложена в ряд Тейлора

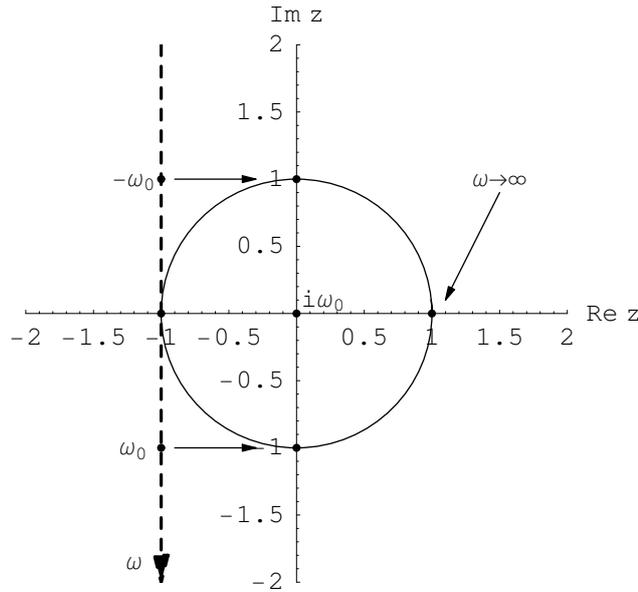


Рис. 2.1. Схематическая иллюстрация конформного отображения верхней полуплоскости частоты на круг единичного радиуса.

вокруг точки $z = 0$:

$$F(\omega(z)) = \sum_{m=0}^{\infty} f_m z^m, \quad f_m = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|z|=1} \frac{F(\omega(z))}{z^{m+1}} dz \quad (2.14)$$

Поскольку $F(\omega(z))$ — гладкая функция, мы можем учесть конечное число членов в этом разложении. Достаточное число M сохраняемых слагаемых может быть оценено из тестовых запусков алгоритма для известной модельной функции F . Как только коэффициенты разложения f_m определены, мы можем просуммировать ряд в любой точке окружности $|z| = 1$ и восстановить таким образом значения $F(\omega)$ на вещественной оси.

В выбранном представлении матрица K из уравнения (2.2) имеет размер $N \times M$ и матричные элементы, даваемые формулой

$$K_{nm} = \left(\frac{\omega_n - \omega_0}{\omega_n + \omega_0} \right)^m - \frac{1}{2} \quad (2.15)$$

Знание априорной информации об ожидаемых решениях $F(\omega \in \mathbb{R})$ позволяет нам выбрать корреляционную матрицу $\langle F(\omega)F^*(\omega') \rangle_{\omega, \omega' \in \mathbb{R}}$ ($\langle \bar{\mathbf{x}} \mathbf{x}^\dagger \rangle$) в тер-

минах предыдущего раздела). Эту корреляционную матрицу можно разложить в двойной ряд Тейлора вокруг нуля подобно тому, как это сделано в (2.14):

$$\langle F(\omega)F^*(\omega') \rangle |_{\omega, \omega' \in \mathbb{R}} \approx \sum_{m, m'=0}^{M-1} \langle f_m f_{m'}^* \rangle z^m (z')^{-m'} \quad (2.16)$$

$$\langle f_m f_{m'}^* \rangle = \frac{1}{(2\pi i)^2} \oint_{|z|, |z'|=1} \langle F(\omega(z))F^*(\omega(z')) \rangle z^{-(m+1)} z'^{(m'-1)} dz dz' \quad (2.17)$$

Практически было установлено, что $M \approx 30 - 50$ слагаемых достаточно для любого расчета. Выбор значения ω_0 не играет существенной роли; достаточно лишь взять его правильного порядка величины. По этой причине до конца главы мы считаем $\omega_0 = 1$.

2.3. Корреляционная матрица лоренцевых пиков

Явную форму коррелятора $\langle F(\omega)F^*(\omega') \rangle$, приводящую к удовлетворительным результатам, можно получить, исходя из простой модели, описывающей априорное распределение возможных решений $F(\omega)$.

Предположим, что функция $F(\omega)$ — суперпозиция нескольких лоренцевых пиков, имеющих одинаковую ширину γ :

$$F(\omega) = \sum_{j=1}^J \frac{Z_j}{\omega - \Omega_j + i\gamma}, \quad (2.18)$$

где положения пиков Ω_j и их вычеты Z_j являются случайными величинами с известными статистическими распределениями.

$$\langle F(\omega_1)F^*(\omega_2) \rangle = \sum_{j, j'=1}^J \left\langle \frac{Z_j}{\omega_1 - \Omega_j + i\gamma} \frac{Z_{j'}}{\omega_2 - \Omega_{j'} - i\gamma} \right\rangle_{z, \Omega} \quad (2.19)$$

(усреднение $\langle \dots \rangle$ здесь имеет тот же смысл, что и в разделе 2.1). Мы предполагаем, что все вычеты Z_j распределены одинаково и независимо друг от друга,

а, следовательно, нужно всего два модельных параметра $\langle Z^2 \rangle$ и $\langle Z \rangle$, чтобы полностью описать участие величин Z_j в рассматриваемой корреляционной функции:

$$\begin{aligned} \langle F(\omega_1)F^*(\omega_2) \rangle = \langle Z^2 \rangle \sum_{j=1}^J \left\langle \frac{1}{\omega_1 - \Omega_j + i\gamma} \frac{1}{\omega_2 - \Omega_j - i\gamma} \right\rangle_{\Omega} + \\ + \langle Z \rangle^2 \sum_{j \neq j'}^J \left\langle \frac{1}{\omega_1 - \Omega_j + i\gamma} \frac{1}{\omega_2 - \Omega_{j'} - i\gamma} \right\rangle_{\Omega} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Если у нас нет информации о знаках $\Re F(\omega)$ и $\Im F(\omega)$, нам следует положить $\langle Z \rangle$ равным нулю. Если для рассматриваемой функции F имеются правила сумм, то $\langle Z \rangle$ и $\langle Z^2 \rangle$ можно использовать для их выражения, поскольку правила сумм есть не что иное, как соотношение между Z_j . Например, для запаздывающей функции Грина $\sum_{j=1}^J Z_j = 1$ и $\langle Z \rangle = 1/J$.

Наконец, мы предполагаем, что положения полюсов Ω_j распределены независимо и согласно некоторому модельному распределению. Одна из простейших возможностей — распределение Лоренца с нулевым матожиданием:

$$P(\Omega_j) = \frac{1}{\pi \Omega_M} \frac{1}{1 + (\Omega_j/\Omega_M)^2}, \quad (2.21)$$

где Ω_M — оценочная полуширина спектра. Например, если речь идет о функциях Грина для полузаполненной модели Хаббарда, обсуждаемой в разделе 2.4, хорошей оценкой для Ω_M является граница верхней хаббардовской зоны.

Комбинация формул (2.17), (2.20) и (2.21) дает результат пригодный для практических расчетов:

$$\begin{aligned} \langle f_m f_{m'}^* \rangle = J \langle Z^2 \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} P(\Omega) I(m, \gamma, \Omega) I^*(m', \gamma, \Omega) d\Omega + \\ + J(J-1) \langle Z \rangle^2 \int_{-\infty}^{+\infty} P(\Omega_1) I(m, \gamma, \Omega_1) d\Omega_1 \int_{-\infty}^{+\infty} P(\Omega_2) I(m', \gamma, \Omega_2) d\Omega_2 \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$I(m, \gamma, \Omega) \equiv \begin{cases} \frac{1}{i\gamma - \Omega + i}, & n = 0 \\ -2i \frac{(i\gamma - \Omega - i)^{m-1}}{(i\gamma - \Omega + i)^{m+1}}, & m \neq 0 \end{cases} \quad (2.23)$$

Хотя эти интегралы берутся аналитически для лоренцевой формы $P(\Omega)$, в общем случае практичнее брать интегралы (2.22) численно.

2.4. Переход Хаббарда-Мотта: практический расчет плотности состояний

Предложенный метод был использован для восстановления локальной плотности электронных состояний в однозонной полузаполненной модели Хаббарда на решетке Бете. Целью было восстановить плотности состояний, меняющиеся в зависимости от величины константы Хаббарда U (проследить фазовый переход Мотта-Хаббарда).

Поиск пиковой структуры хаббардовских подзон (смотри параграф 1.4.3) квантовым методом Монте-Карло с последующим аналитическим продолжением данных на вещественную ось является хорошим способом сравнить возможности предложенного метода и существующих методик аналитического продолжения.

Система уравнений DMFT для случая однозонной полузаполненной модели Хаббарда на решетке Бете приведена в параграфе 1.4.2. Для решения уравнений был использован программный комплекс TRIQS (Toolkit for Research in Interacting Quantum Systems) [116], использующий библиотеку ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulations) [117, 118]. Примесная задача решалась методом разложения по функции гибридизации [74] с накоплением статистики в представлении ортогональных полиномов [119].

Программная реализация предложенного метода была написана на языке C++ с использованием библиотеки матричной алгебры Eigen 3, а также биб-

лиотек для работы с вещественными числами произвольной точности MPFR и MPFR C++.

Во всех расчетах постоянная хоппинга была выбрана равной $t = 0.5$ (безразмерные единицы), что соответствует полуширине затравочной зоны $D = 1$, а обратная температура $-\beta = 100$. Мы рассматривали 3 значения хаббардовской константы U : $U = 2.0$ (коррелированный металл), $U = 2.4$ (окрестность фазового перехода Мотта) и $U = 3.0$ (моттовский диэлектрик с выраженной щелью в спектре).

Как было отмечено ранее, наш алгоритм может быть применен не только к температурной функции Грина, но также и к собственно-энергетической функции или любой другой динамической величине, обладающей теми же свойствами аналитичности.

Было использовано две различные вариации метода для изоляторного случая большого U и для случаев, в которых присутствует квазичастичный пик на $\epsilon = 0$.

1. Для значений $U = 2.0$ и $U = 2.4$ мы рассчитывали спектральную плотность $A(\epsilon)$ в соответствии со следующей схемой:

$$\mathcal{G}(\omega_n) \mapsto \Sigma(\omega_n) \mapsto (\text{стох. регуляризация}) \mapsto \Sigma(\epsilon) \mapsto G^R(\epsilon) \mapsto A(\epsilon),$$

где $\Sigma(\omega_n)$ — вспомогательная собственная энергия, определенная как $\Sigma(\omega_n) = i\omega_n - \mathcal{G}^{-1}(\omega_n)$ (аналогично для вещественных частот). Эта величина имеет более удобные асимптотические свойства, чем $\mathcal{G}(\omega_n)$ (спадает быстрее $1/i\omega_n$) и, следовательно, требует меньшего числа слагаемых в разложении (2.14) при заданной точности аппроксимации. Очевидно, такая замена положительно сказывается на устойчивости алгоритма.

2. Для $U = 3.0$ использовался более простой способ аналитического про-

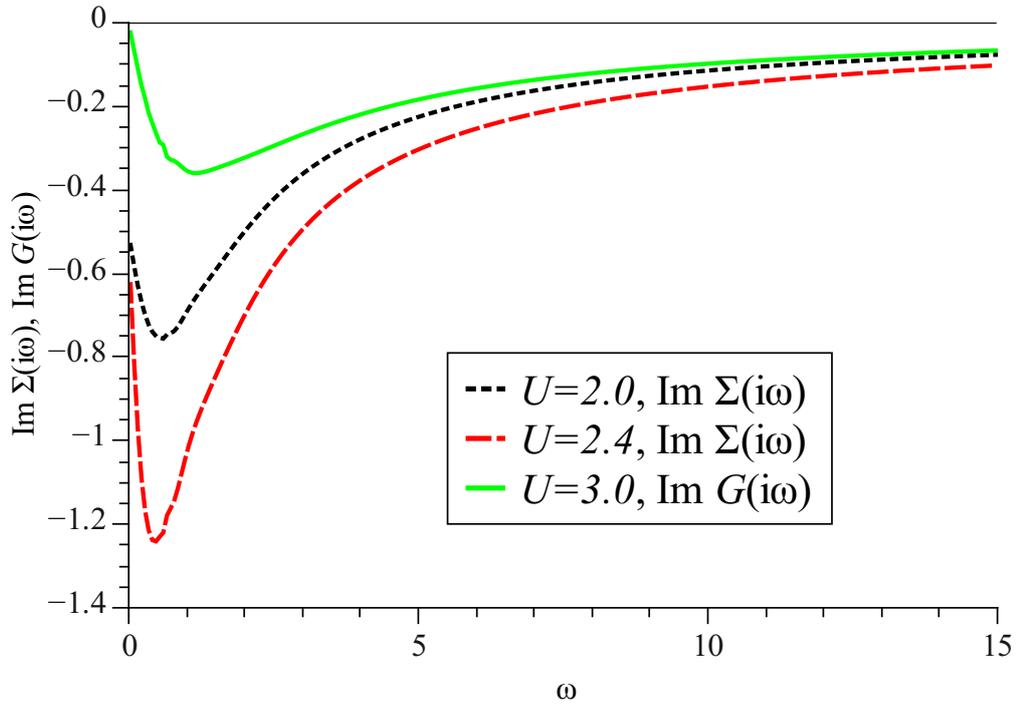


Рис. 2.2. Входные данные для алгоритма стохастической регуляризации: $\Im \Sigma(\omega_n)$ для $U = 2.0$, $U = 2.4$ и $\Im G(\omega_n)$ для $U = 3.0$; $t = 0.5$, $\beta = 100$. Вещественные части представленных функций тождественно равны нулю в силу электрон-дырочной симметрии модели.

должения:

$$G(\omega_n) \mapsto (\text{стох. регуляризация}) \mapsto G^R(\epsilon) \mapsto A(\epsilon)$$

Несмотря на аргументы предыдущего пункта, мы вынуждены использовать температурную функцию Грина, поскольку $\Sigma(\omega_n)$ уже не является хорошо определенной функцией. Она обращается в бесконечность в каждой точке диэлектрической щели, поэтому невозможно построить ее корректное представление как функции переменной z .

Входные данные для алгоритма стохастической регуляризации приведены на рисунке 2.2.

Чтобы получить наиболее физические плотности состояний, нужно подобрать значения некоторых параметров алгоритма. Разумеется, это вносит

определенную зависимость от “человеческого фактора”, поэтому значения, приведенные ниже, являются лишь более или менее оптимальными. Однако, как будет показано ниже, качественно особенности в спектре устойчивы даже по отношению к значительным изменениям подстраиваемых параметров.

Матрица ковариаций C_y (2.4) была выбрана диагональной с элементами равными $C_0 = 10^{-5}$. Это означает, что, по предположению, значения $G(\omega_n)$ (или $\Sigma(\omega_n)$) статистически независимы для разных мацубаровских частот и распределены с дисперсией C_0 .

Мы использовали коррелятор $\langle F(\omega)F^*(\omega') \rangle$, описанный в разделе 2.3 с $\gamma = 0.1$ и $\Omega_M = (U + D)/2$ (высокочастотная граница верхней хаббардовской зоны). Другие параметры коррелятора: $J = 2, \langle Z \rangle = 0, \langle Z^2 \rangle = 1$; выбор этих значений значительно на результат не влиял. В z -разложении мы сохранили первые 40 слагаемых (результаты не меняются при дальнейшем увеличении их числа).

Итоговые плотности состояний изображены на рисунке 2.3. Для сравнения мы также приводим результаты, полученные из тех же входных данных с помощью простой программы, реализующей стохастический метод Сэндвика, родственной методу максимальной энтропии [110]. Наборы данных для стохастической регуляризации содержали значения на первый 1000 мацубаровских частотах; алгоритм Сэндвика работал с 256 значениями $G(\tau)$ на оси мнимого времени (максимально допустимое число для этой программы).

Хотелось бы подчеркнуть наличие дополнительных особенностей (“плечей”) вблизи $\epsilon = \pm 1$ на рисунке 2.3, б, которые выявлены методом стохастической регуляризации, но полностью отсутствуют в результатах метода Сэндвика. Эти пики напоминают особенности, найденные авторами работ [95, 96] методом DMFT(D-DMRG) при нулевой температуре. В то же время имеются области, в которых стохастическая регуляризация дает нефизичный отрицательный спектральный вес. Эта проблема — прямое следствие линейности

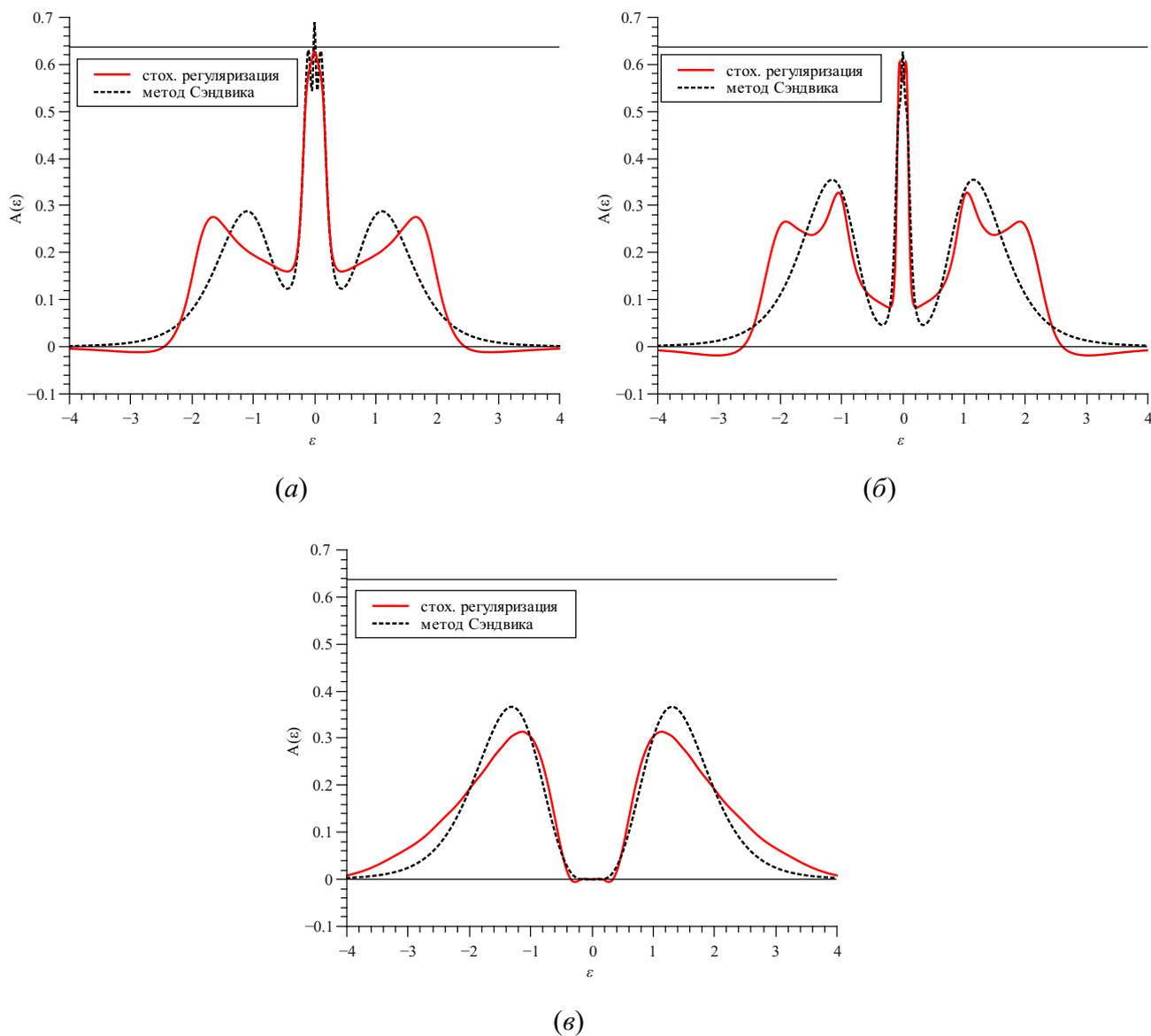


Рис. 2.3. Восстановленные плотности состояний для а) $U = 2.0$, б) $U = 2.4$ и в) $U = 3.0$. Сплошные линии — результаты стохастической регуляризации, точки — результаты метода Сэндвика. Тонкая горизонтальная линия на уровне $2/\pi$ показывает значение $A(0)$, диктуемое следствием из теоремы Латтинжера [93].

нашего подхода: положительность не требуется явно. Однако эти отклонения от положительности не обширны и могут быть минимизированы правильным выбором подстраиваемых параметров.

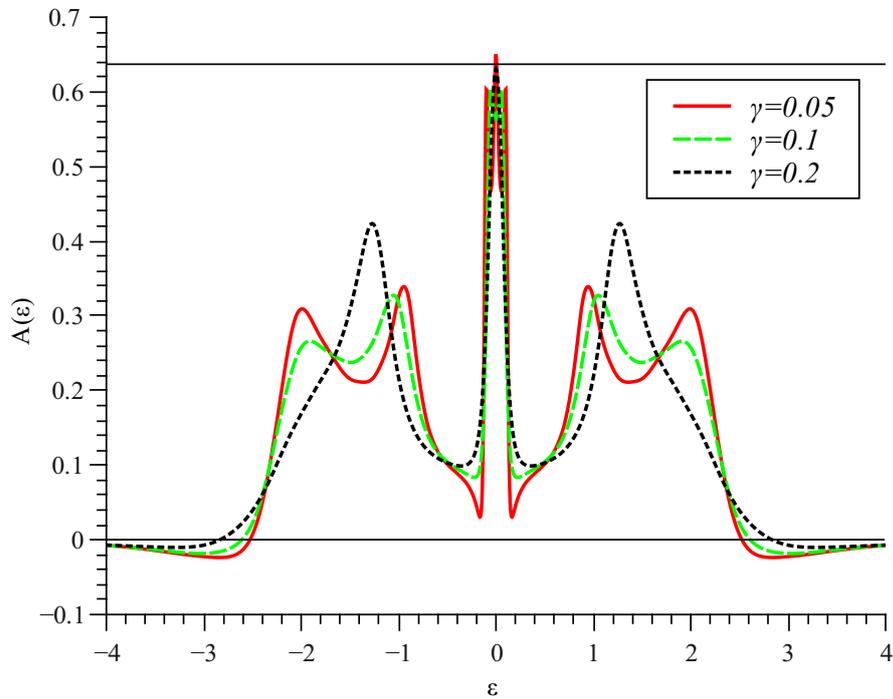


Рис. 2.4. Восстановленные плотности состояний для $U = 2.4$, $\Omega_M = 1.7$, $C_0 = 10^{-5}$ и различных значений γ . Значение $\gamma = 0.2$ переоценено и заставляет два пика в хаббардовских зонах слиться.

В заключение мы демонстрируем, что плотности состояний, воспроизводимые нашим методом, в самом деле зависят от выбора параметров, но качественные характеристики спектра при этом остаются неизменными. В целом, имеется 3 чувствительных параметра: C_0 , Ω_M и γ . Ω_M определяет предполагаемую границу спектра и в большинстве ситуаций может быть надежно оценен. C_0 говорит алгоритму о требуемом уровне доверия к входному набору данных. Переоцененное значение C_0 может привести к потере пиков в спектре, в то время, как слишком маленькое значение жестко привязывает результат к входным данным (и их шуму), результатом чего может стать “мусор” на выходе. γ играет роль уширения спектральных пиков или, иначе говоря, контролирует

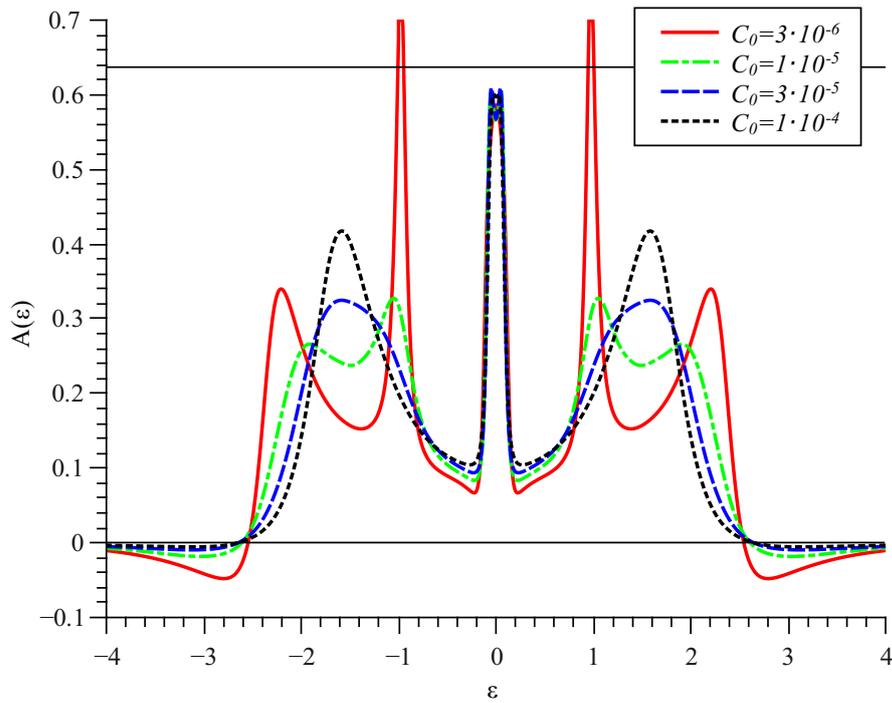


Рис. 2.5. Восстановленные плотности состояний для $U = 2.4$, $\Omega_M = 1.7$, $\gamma = 0.1$ и различных значений C_0 . При слишком большой величине ($C_0 \geq 3 \cdot 10^{-5}$) оценочного уровня шума двухпиковая структура хаббардовских зон теряется. Для противоположного случая слишком маленького значения ($C_0 = 3 \cdot 10^{-6}$) эти структуры чрезмерно выражены.

количество мелких осцилляций в результирующей функции $F(\omega)$. Если уширение слишком велико, мелкие спектральные особенности снова могут быть потеряны. Примерные зависимости $A(\epsilon)$ от γ и C_0 показаны на рисунках 2.4 и 2.5 соответственно.

2.5. Исследование природы пиковой структуры хаббардовских подзон

Возможность воспроизвести пиковую структуру хаббардовских подзон, исходя из результатов QMC-расчетов, позволила простым образом изучить вопрос о связи центрального “кондовского” пика и пиков на краях подзон Хаббарда.

Для $U = 2.4$, $\beta = 100$ (спектр с выраженной пиковой структурой, представленный на рис. 2.6), был проведен дополнительный QMC-расчет для искусственно сгенерированной гибридизационной функции, соответствовавшей спектральной функции без центрального пика. Технически, после достижения самосогласования, была построена спектральная функция, приведенная на рисунке 2.6 и рисунке 2.7 (тонкий пунктир). Центральный пик на последней был замещен сглаженным участком (2.7, жирная пунктирная линия). Из этой модифицированной спектральной функции по формулам (1.141) и (1.140) была вычислена новая гибридизационная функция $\tilde{\Delta}(\omega_n)$. Для примесной задачи (1.136) с $\tilde{\Delta}(\omega_n)$ при помощи QMC была рассчитана функция Грина $\tilde{\mathcal{G}}(\omega_n)$, а из нее восстановлена модифицированная плотность состояний $\tilde{A}(\epsilon)$, показанная на рисунке 2.7 сплошной линией.

Заметим, что процедура удаления центрального пика, вообще говоря, сопровождается потерей небольшой части спектрального веса. Восстановить спектральный вес можно, домножив $\tilde{\Delta}(\omega_n)$ на соответствующий нормировочный фактор. Однако, как было проверено, такая перенормировка практически не меняет результат для $\tilde{A}(\epsilon)$.

Видно, что центральный пик практически отсутствует не только в спектральной функции, соответствующей гибридизации $\tilde{\Delta}(\omega_n)$, но и в итоговом спектре $\tilde{A}(\epsilon)$. Таким образом, связанные с переворотом спина эффекты (Кондо-процессы), ответственные за формирование центрального квазичастичного пика, из системы полностью удалены. Тем не менее, пиковая структура подзон сохраняется, только частоты пиков несколько уменьшены, и из-за этого сами пики оказываются более выражены. Мы приходим к выводу, что вопреки высказанным ранее предположениям, пиковая структура подзон не связана напрямую с квазичастичным пиком на уровне Ферми.

Ненулевая плотность состояний вблизи уровня Ферми все же важна для образования пиковой структуры подзон, поскольку при формировании щели

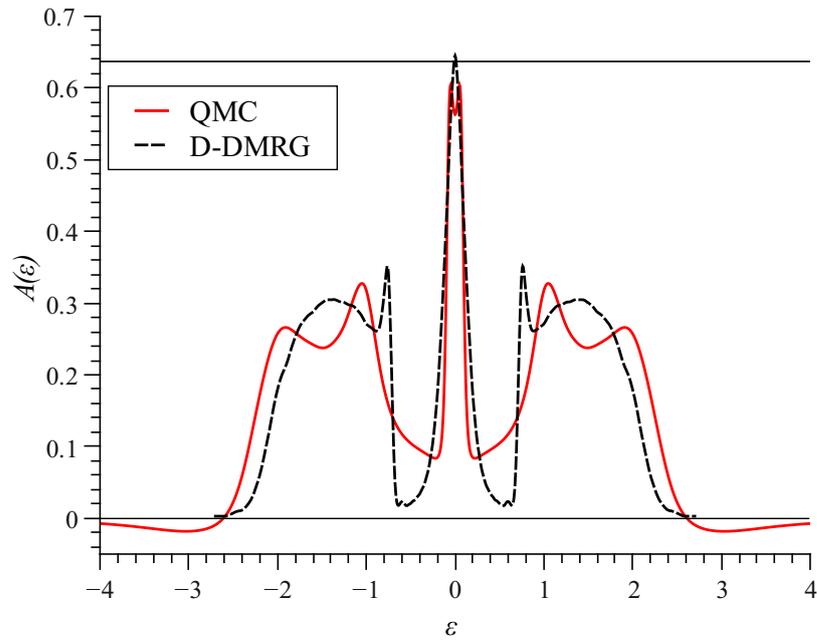


Рис. 2.6. Плотности состояний однозонной модели Хаббарда с половинным заполнением на бесконечномерной решетке Бете при $U = 2.4, t = 0.5$. Сплошная линия — результат DMFT + СТQMC + оптимальной регуляризации (температура $T = 0.01$). Пунктир — результат D-DMRG для нулевой температуры, полученный в работе [95]. Тонкая горизонтальная линия на уровне $2/\pi$ показывает значение $A(0)$, диктуемое следствием из теоремы Латтинжера.

эта структура пропадает. По-видимому, важным является не собственно квази-частичный пик, а общее число состояний в достаточно широкой области вблизи уровня Ферми (то есть, в области порядка ширины псевдощели). Для исследованного нами случая конечной температуры спектральный вес в области псевдощели существенно отличен от нуля, поэтому удаление центрального пика приводит только к сравнительно небольшому уменьшению количества этих состояний, и, соответственно, уменьшению частот пиковой структуры. В реальных материалах такая ситуация характерна для плазмонных возбуждений, на частоты которых Кондо-процессы заметного влияния не оказывают. Таким образом, наш результат свидетельствует в пользу того, что за формирование пиковой структуры хаббардовских подзон ответственны зарядовые, а не спиновые возбуждения.

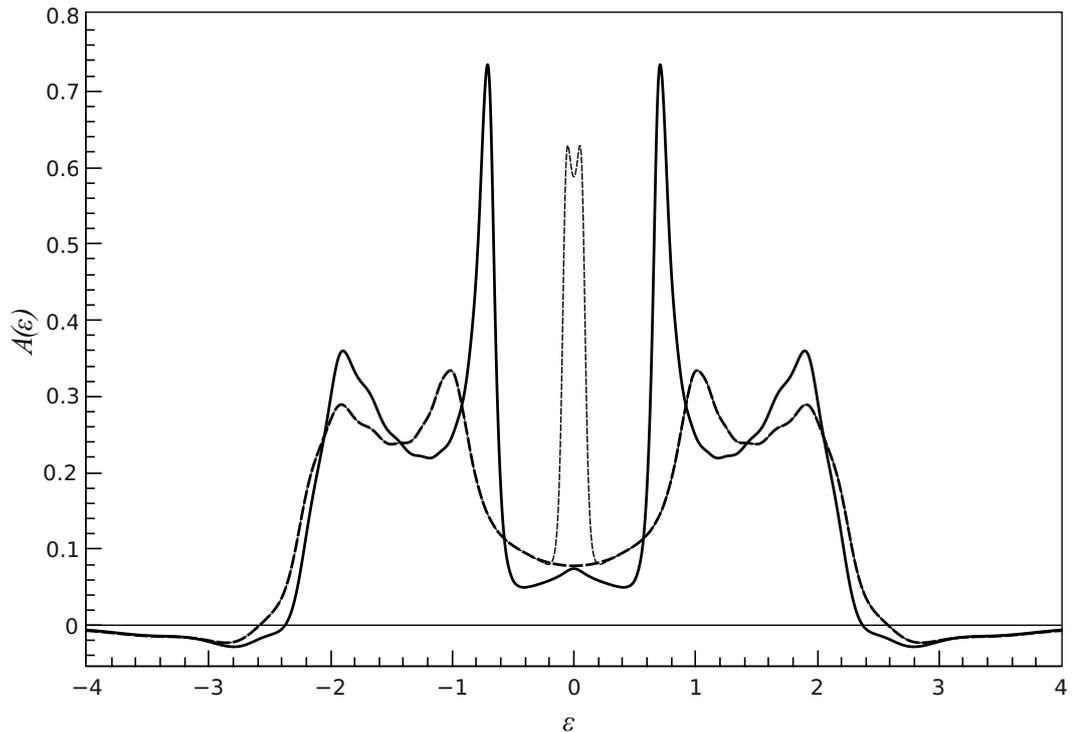


Рис. 2.7. Плотности состояний однозонной модели Хаббарда с половинным заполнением на бесконечномерной решетке Бете при $U = 2.4$, $t = 0.5$. Тонкий пунктир — то же, что и сплошная линия на рисунке 2.6, жирный пунктир — плотность состояний $A(\epsilon)$ после удаления центрального пика, сплошная линия — плотность состояний $\tilde{A}(\epsilon)$.

2.6. Заключение

Мы разработали новый регуляризационный метод (стохастическая регуляризация) для задачи об аналитическом продолжении численных данных с мацубаровских частот на вещественную ось. Метод является наилучшей возможной регуляризацией в смысле определения (2.9), т.е. мы строим оптимальную регуляризационную матрицу для заданного класса возможных решений и заданного уровня шума входных данных.

Мы применили предложенный метод для восстановления локальных плотностей состояний полузаполненной однозонной модели Хаббарда на решетке Бете при низкой температуре ($\beta = 100$). В отличие от стохастического мето-

да Сэндвика, наш алгоритм выявил пики на внутренних краях зон Хаббарда при значении $U = 2.4$, соответствующем фазовому переходу Мотта-Хаббарда. При нулевой температуре подобные структуры ранее наблюдались в работах Карски [95, 96] (метод DMFT+D-DMRG) и Жанга [94] (итеративная теория возмущений по U).

Благодаря универсальности метода QMC, оказалось возможным посредством варьирования гибридизации определить, какие именно особенности гибридизационной функции ответственны за формирование структуры хаббардовских подзон. Показано, что прямая связь между пиковой структурой подзон и центральным Кондо-пиком отсутствует. Полученный результат свидетельствует в пользу зарядовой природы ответственных за формирование пиковой структуры резонансов.

Дальнейшее развитие метода оптимальной стохастической регуляризации следует вести с использованием его важного свойства — линейности по входным данным, т.к. оно делает возможным аналитическое продолжение собственной энергии и недиагональных (в пространстве орбитальных индексов) компонент функций Грина. В принципе, мы могли бы следовать парадигме MaxEnt и заложить дополнительные требования, такие как $A(\epsilon) \geq 0$. Однако это сделало бы схему нелинейной и серьезно уменьшило бы ее гибкость.

Существуют также и негативные последствия линейности нашего подхода: могут появляться нефизичные области с отрицательной плотностью состояний. Еще одна проблема схемы связана с ее свободными параметрами: по сравнению с MEM и родственными методами, требуется больше внимания со стороны пользователя для получения физически корректных результатов.

В силу указанных проблем предложенная методика, вероятно, не может служить полной заменой методу максимальной энтропии. Тем не менее, мы считаем, что она может оказаться полезной для качественного обнаружения спектральных особенностей, не воспроизводимых в MEM.

Глава 3

Дуальная теория возмущений для однозонной примесной модели Андерсона

3.1. Постановка задачи

Мы рассматриваем полузаполненную однозонную примесную модель Андерсона при нулевой температуре, задаваемую следующим действием:

$$S = S_{at} - \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \bar{c}_{\sigma t} \Delta(t - t') c_{\sigma t'} \quad (3.1)$$

$$S_{at} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left(\sum_{\sigma} i \bar{c}_{\sigma t} \frac{\partial}{\partial t} c_{\sigma t} - U \tilde{n}_{\uparrow t} \tilde{n}_{\downarrow t} \right) \quad (3.2)$$

Здесь введено обозначение $\tilde{n}_{\sigma t} \equiv \frac{1}{2}(\bar{c}_{\sigma t-0} c_{\sigma t} + \bar{c}_{\sigma t+0} c_{\sigma t})$. Действие S_{at} обладает электрон-дырочной симметрией и соответствует гамильтониану взаимодействия $U(n_{\uparrow} - 1/2)(n_{\downarrow} - 1/2)$ (о сопоставлении действия гамильтониану системы фермионов см., например, раздел 7.11 книги [27]).

Мы предполагаем, что гибридизация адиабатически медленно включается (выключается) на больших временах в прошлом (будущем). Формально это означает, что гибридизационная функция $\Delta(t - t')$ домножена на функцию с медленно меняющимся профилем $\Delta^{\text{prof}}(t)$ такую, что $\Delta^{\text{prof}}(\pm\infty) = 0$ и $\Delta^{\text{prof}}(t) = 1$ на конечных временах. В этом случае эволюция системы начинается и заканчивается изолированным атомом с одним электроном на нем.

Полный оператор эволюции $\mathcal{S}(-\infty, \infty)$ сохраняет ориентацию спина. Поэтому его можно разделить на две части, ответственные за эволюцию, старту-

ющую и заканчивающуюся с определенной проекцией спина:

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}_{\uparrow\uparrow} + \mathcal{S}_{\downarrow\downarrow}, \quad (3.3)$$

где $\mathcal{S}_{\uparrow\uparrow}$ и $\mathcal{S}_{\downarrow\downarrow}$ описывают эволюцию по траекториям $|\uparrow\rangle_{-\infty} \rightarrow |\uparrow\rangle_{+\infty}$ и $|\downarrow\rangle_{-\infty} \rightarrow |\downarrow\rangle_{+\infty}$ соответственно.

Формально оператор $\mathcal{S}_{\sigma\sigma}$ может быть определен в форме интеграла по путям

$$\mathcal{S}_{\sigma\sigma} = \int_{|\sigma\rangle}^{|\sigma\rangle} e^{i\mathcal{S}} \mathcal{D}[\bar{c}c], \quad (3.4)$$

где выражение $\int_{|\sigma\rangle}^{|\sigma\rangle} \mathcal{D}[\bar{c}c]$ означает интегрирование по траекториям, стартующим и заканчивающимся с проекцией спина σ . Этот трюк необходим, т.к. основное состояние гамильтониана изолированного атома вырождено ($|gs\rangle = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$; $E_{gs} = -U/2$). В случае обычной диаграммной техники (см., например, главу 2 учебника [20]) основное состояние системы всегда невырождено и, следовательно, всегда переходит само в себя за бесконечное время.

Для решения задачи достаточно рассмотреть только одну часть оператора эволюции, например, $\mathcal{S}_{\uparrow\uparrow}$. Учет второй части эквивалентен усреднению полученных результатов по проекции спина.

3.2. Предварительный анализ задачи

Преобразование к дуальным фермионам [35] требует разделения действия на две части. Первая часть должна быть точно решаемой, а вторая — квадратичной. Наиболее очевидное деление — выбрать S_{at} в качестве точно решаемой части и гибридизацию — в качестве гауссовой. Основанная на таком делении теория будет развита в следующих разделах. Будет показано, что она хорошо описывает низкоэнергетическую физику модели Андерсона. Однако

корректное описание во всем частотном диапазоне требует более изощренного подхода, включающего особую процедуру перенормировки.

Расцепление слагаемого с гибридизацией с помощью преобразования (1.75) и последующее интегрирование по \bar{c} , c в операторе эволюции приводит к дуальному действию следующего вида:

$$S^d[\bar{f}, f] = \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \left(\Delta^{-1}(\epsilon) g_{\sigma\sigma}^{-2}(\epsilon) - g_{\sigma\sigma}^{-1}(\epsilon) \right) \bar{f}_{\sigma\epsilon} f_{\sigma\epsilon} + V^d[\bar{f}, f], \quad (3.5)$$

где $g_{\sigma\sigma}(\epsilon)$ — атомная функция Грина, $g_{12} = -i\langle c_1 \bar{c}_2 \rangle$, а коэффициенты ряда Тейлора для нелинейной части $V^d[\bar{f}, f]$ являются неприводимыми вершинами атомной задачи.

Моменты атомной задачи можно вычислить во временном домене, используя представление мировых линий. Части (а) и (б) рисунка 3.1 показывают ненулевые мировые линии, описывающие вычисление атомной функции Грина.

Из рисунка видно, что вклад дает только один определенный порядок операторов рождения и уничтожения: если эволюция начинается и заканчивается в состоянии с одним электроном со спином вверх, оператор уничтожения должен предшествовать оператору рождения; для состояния со спином вниз порядок обратный. В полузаполненном случае получаем $g_{\uparrow\uparrow}(t) = i\theta(-t)e^{i(U/2)t}$ и $g_{\downarrow\downarrow}(t) = -i\theta(t)e^{-i(U/2)t}$ (θ — ступенчатая функция Хэвисайда). Преобразование Фурье дает:

$$g_{\uparrow\uparrow}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon + U/2 - i0}, \quad g_{\downarrow\downarrow}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - U/2 + i0}. \quad (3.6)$$

Этих формул достаточно, чтобы построить среднеполевое приближение (Хаббард-I [83]), т.к. высшие моменты не входят в теорию в этом случае. Следуя работе [35], определим следующие функции Грина:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\sigma\sigma}(\epsilon) &= \left(g_{\sigma\sigma}^{-1}(\epsilon) - \Delta(\epsilon) \right)^{-1} \\ \mathcal{G}_{\sigma\sigma}^{\text{dual}}(\epsilon) &= \mathcal{G}_{\sigma\sigma}(\epsilon) - g_{\sigma\sigma}(\epsilon) \end{aligned} \quad (3.7)$$

(далее в тексте величины, относящиеся к среднеполевому приближению, обозначены каллиграфическими буквами).

Чтобы получить конечный ответ, нужно усреднить выражение для $\mathcal{G}_{\sigma\sigma}(\epsilon)$ по спиновому индексу с равными весами:

$$\mathcal{G}(\epsilon) = \frac{1/2}{\epsilon + U/2 - \Delta(\epsilon) - i0} + \frac{1/2}{\epsilon - U/2 - \Delta(\epsilon) + i0} \quad (3.8)$$

В нашей нотации величины до и после спинового усреднения обозначены одними и теми же буквами, однако, чтобы избежать путаницы, неусредненные величины всегда снабжены индексами.

В основном мы будем интересоваться задачей в пределе Кондо, когда атомные резонансы $\pm U/2$ лежат вне затравочной зоны проводимости.

Очевидно, среднеполевая плотность состояний такой задачи состоит из несколько искаженной плотности зоны проводимости и двух δ -пиков в точках $\pm U/2$. Основной недостаток этого приближения состоит в том, что вблизи уровня Ферми не возникает резонанс Абрикосова-Сула, хотя высокоэнергетическая часть спектра и воспроизводится качественно верно.

3.3. Низкоэнергетические свойства: общее рассмотрение.

Вычисление поправок к приближению Хаббард-I требует знания высших моментов атомной задачи. Двухчастичную функцию Грина $g_{1234}^{(2)} = \langle c_1 c_2 \bar{c}_3 \bar{c}_4 \rangle$ можно вычислить по аналогии с g_{12} (сокращенные индексы имеют смысл комбинаций энергии и спина, например, обозначение c_1 раскрывается в $c_{\sigma_1 \epsilon_1}$). Выражение для $g^{(2)}$ содержит $4! = 24$ слагаемых, каждое из которых отвечает определенному порядку временных аргументов операторов \bar{c}, c . Оказывается, однако, что только четыре из них дают вклад в неприводимую часть коррелятора $\Gamma_{1234} = g_{1234}^{(2)} - g_{13}g_{24} + g_{14}g_{23}$. Мирские линии, соответствующие этим слагаемым, изображены в части (с) рисунка 3.1. Сделав преобразование

Фурье и отбросив δ -функцию, выражающую закон сохранения энергии, мы получаем простую формулу для неприводимой вершины четвертого порядка $\gamma_{1234}^{(4)} = -ig_{11}^{-1}g_{22}^{-1}g_{33}^{-1}g_{44}^{-1}\Gamma_{1234}$. Неприводимая вершина тождественно равна нулю для совпадающих спиновых индексов, а для различных индексов имеет следующую простую форму:

$$\gamma_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{(4)}(\epsilon_1, \epsilon_2; \epsilon_3, \epsilon_4) = U + \frac{U^2}{\epsilon_3 - \epsilon_2 - 0i} \quad (3.9)$$

Первый член в этом выражении полностью локализован, а второй пропорционален $\Theta(t_3 - t_1)\delta(t_4 - t_1)\delta(t_3 - t_2)$ во временном представлении. Физический смысл появляющейся здесь функции Хэвисайда связан с фактом вырождения основного состояния: временной интервал между парами t_1, t_4 и t_2, t_3 может быть произвольно большим — система может пребывать в основном состоянии сколь угодно долго (с.м. рисунок 3.1, (с)).

Дуальная теория возмущений — это диаграммное разложение по $\gamma^{(4)}$. Полезно заметить, что для системы без нарушения симметрии (без разбиения оператора эволюции на две части) $\gamma^{(4)}$ стремится к бесконечности [80] в пределе нулевой температуры, делая такое разложение невозможным. Следовательно, нарушение симметрии существенно необходимо, чтобы построить теорию при нулевой температуре.

Мы ограничиваемся наиболее простым приближением за рамками среднего поля, т.е. первой диаграммной поправкой к дуальной собственной энергии:

$$\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(\epsilon) = \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{(4)}(\epsilon, \epsilon'; \epsilon, \epsilon') \mathcal{G}_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(\epsilon') d\epsilon' \quad (3.10)$$

$$\Sigma_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(\epsilon) = \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{(4)}(\epsilon, \epsilon'; \epsilon, \epsilon') \mathcal{G}_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(\epsilon') d\epsilon' \quad (3.11)$$

$$(3.12)$$

Более точным было бы использовать в подынтегральном выражении одетую

функцию Грина $G_{\sigma\sigma}^{\text{dual}}$ и понимать эти формулы как интегральные уравнения относительно нее, но ради простоты мы все же остановимся на варианте с затравочной функцией $\mathcal{G}_{\sigma\sigma}^{\text{dual}}$.

Чтобы получить выражение для функции Грина реальных электронов на примеси, удобно использовать формулу, полученную комбинированием тождества 1.81 и уравнения Дайсона для дуальных фермионов [35]:

$$G_{\sigma\sigma}(\epsilon) = \frac{1}{g_{\sigma\sigma}^{-1}(\epsilon) - \Delta(\epsilon) - \left(g_{\sigma\sigma}(\epsilon) + \left(\Sigma_{\sigma\sigma}^{\text{dual}}(\epsilon)\right)^{-1}\right)^{-1}} \quad (3.13)$$

Важное свойство этих формул состоит в том, что $\Sigma_{\sigma\sigma}^{\text{dual}}$ содержит кондовский логарифм. В самом деле, подставляя (3.9) в (3.10) и учитывая, что $\Im\mathcal{G}^{\text{dual}}$ меняет знак при переходе через уровень Ферми, находим, что $\Re\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}$ содержит логарифмическую расходимость:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{U^2}{\epsilon - \epsilon' - i0} \Im\mathcal{G}_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(\epsilon') d\epsilon' \approx \frac{U^2}{\pi} \ln(-\Omega/\epsilon) \Im\mathcal{G}_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(-0), \quad (3.14)$$

где энергия обрезания Ω — порядка полуширины зоны проводимости. Далее, подстановка выражения (3.7) дает оценку $\Re\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}} \approx 2\pi^{-1} \ln(-\Omega/\epsilon) \Delta(-0)$ для случая больших U . Такое логарифмическое поведение отражается и на спектральной функции.

Дуальная теория возмущений применима, когда поправки к результатам Хаббард-I достаточно малы. Это означает, что в соответствии с формулой (3.13) область применимости определяется неравенством $g_{\uparrow\uparrow}\Sigma_{\uparrow\uparrow} \ll 1$. Заметим, что при энергии равной температуре Кондо [38] левая часть этого неравенства равняется $1/2$, поэтому формально наша теория применима только на энергетических масштабах больших температуры Кондо. Важно, однако, отметить, что некоторые низкоэнергетические свойства также воспроизводятся. Выполнено правило сумм Фриделя: как это видно из (3.13), расходимость $\Sigma_{\sigma\sigma}^{\text{dual}}$ в нуле соответствует $G_{\sigma\sigma}(0) = -\Delta^{-1}(0)$ [120].

Интересно, что оценка применимости теории остается справедливой для диаграмм высших порядков. Диаграмма n -ого порядка для $\Sigma_{\sigma\sigma}^{\text{dual}}$ содержит n вершин и $2n - 1$ внутренних линий. Выше кондовского масштаба энергии вершины пропорциональны U^2 (см. (3.9)), а каждая внутренняя линия $\mathcal{G}_{\sigma\sigma}^{\text{dual}}$ пропорциональна U^{-2} в пределе $U \rightarrow \infty$ (см. (3.7)). Таким образом, теория возмущений хорошо себя ведет в любом порядке по $\gamma^{(4)}$ на масштабах энергии выше кондовского.

Чтобы протестировать предложенную теорию возмущений, нужно провести вычисления для конкретной функции гибридизации. В следующем разделе представлены аналитические результаты и графики для полузаполненной примеси и зоны проводимости с полукруглой формой спектра.

3.4. Низкоэнергетические свойства: аналитические результаты для полукруглой зоны проводимости.

Явное вычисление диаграммы первого порядка в дуальных переменных — простая, хотя и не полностью тривиальная задача. У затравочной дуальной функции Грина $\mathcal{G}_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(\epsilon)$ имеется атомный полюс в точке $-U/2$ (или в $U/2$ для $\mathcal{G}_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(\epsilon)$), а также разрез, возникающий из-за того, что $\Delta(\epsilon)$ описывает систему с непрерывным зонным спектром.

В наших расчетах мы будем использовать полукруглую $\Delta(\epsilon)$:

$$\Delta(\epsilon) = \frac{1}{2} \left(\frac{2V}{D} \right)^2 \left(\epsilon - \text{sgn}(\epsilon) \sqrt{\epsilon^2 - D^2} \right) \quad (3.15)$$

Здесь D — полуширина зоны, которая во всех вычислениях ниже для простоты выбрана равной единице. Константа хоппинга V имеет смысл вероятности перескока электрона между атомом примеси и его ближайшим соседом.

Разумеется, вычисление первой диаграммы возможно и при произвольном виде $\Delta(\epsilon)$, но требует численного интегрирования. В предыдущем разделе

было показано (3.14), что качественно результаты будут теми же для любой $\Delta(\epsilon)$, гладкой в точке $\epsilon = 0$ и имеющей конечную ширину спектра.

Диаграмма, которую мы собираемся вычислять, — это интеграл по вещественной оси:

$$\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(\epsilon) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon'}{2\pi} \left(U + \frac{U^2}{\epsilon - \epsilon' - i0} \right) \mathcal{G}_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(\epsilon') \quad (3.16)$$

$$\Sigma_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(\epsilon) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon'}{2\pi} \left(U + \frac{U^2}{\epsilon' - \epsilon - i0} \right) \mathcal{G}_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(\epsilon') \quad (3.17)$$

Изучим полюсную структуру части, пропорциональной U (константная часть) в выражении для $\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(\epsilon)$; обозначим эту часть как Σ_U^{dual} :

$$\Sigma_U^{\text{dual}} = -i \frac{U}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta(\epsilon') d\epsilon'}{(\epsilon' - U/2 + i0)(\epsilon' - U/2 + i0 - \Delta(\epsilon'))} \quad (3.18)$$

Имеется один полюс $\epsilon' = U/2 - i0$, унаследованный от атомной задачи, и, в дополнение к нему, максимум два полюса, являющихся решением уравнения $\epsilon - U/2 = \Delta(\epsilon)$. С нашим специальным выбором $\Delta(\epsilon)$ это уравнение сводится к следующей системе:

$$\begin{cases} \Re\Delta(\epsilon) = \epsilon - U/2 \\ \Im\Delta(\epsilon) = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \epsilon^2(1 - 4V^2) + \epsilon U(2V^2 - 1) + ((2V^2)^2 + (U/2)^2) = 0 \\ |\epsilon| > 1 \end{cases} \quad (3.19)$$

В случае $V = 1/2$ это квадратное уравнение относительно ϵ превращается в линейное, а его корень $\epsilon_0 = \frac{1}{2} \left(U + \frac{1}{U} \right)$ всегда не меньше 1. Если V не равно $1/2$, возможны два вещественных корня ϵ_+ and ϵ_- . В этом проявляется дополнительное расщепление атомного уровня, обусловленное влиянием зоны проводимости. Однако в пределе $U \gg 2V$ единственным релевантным корнем остается ϵ_+ . Чтобы понять это утверждение, полезно представить уравнение $\Re\Delta(\epsilon) = \epsilon - U/2$ в графическом виде (рисунок 3.2).

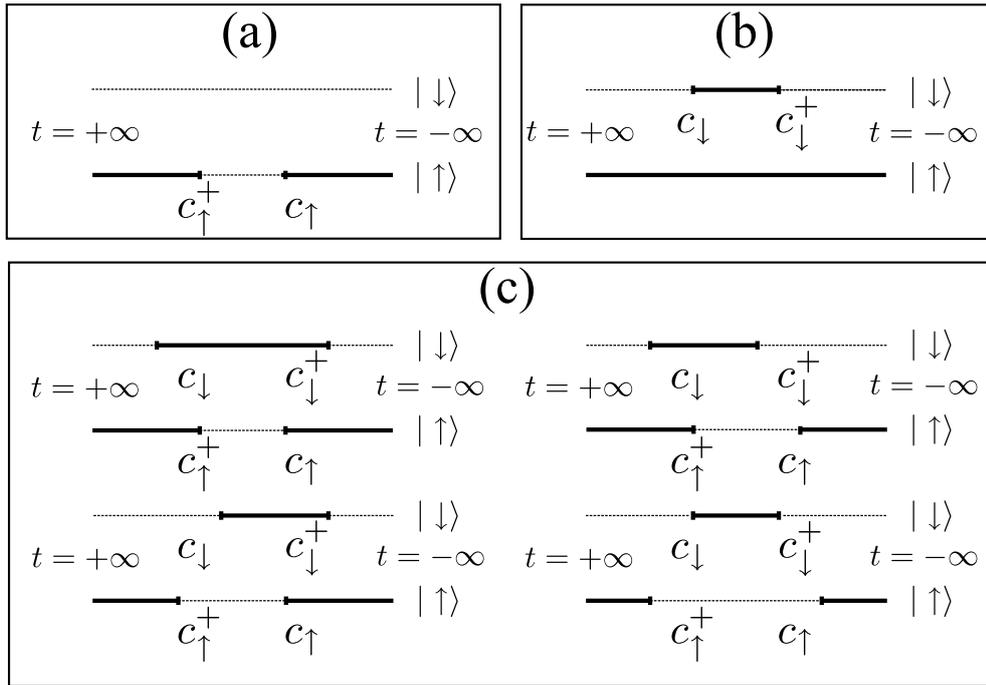


Рис. 3.1. Мировые линии, дающие вклад в $g_{\sigma\sigma}$ (a,b) и $\gamma_{\uparrow\downarrow\downarrow}^{(4)}$ (c).

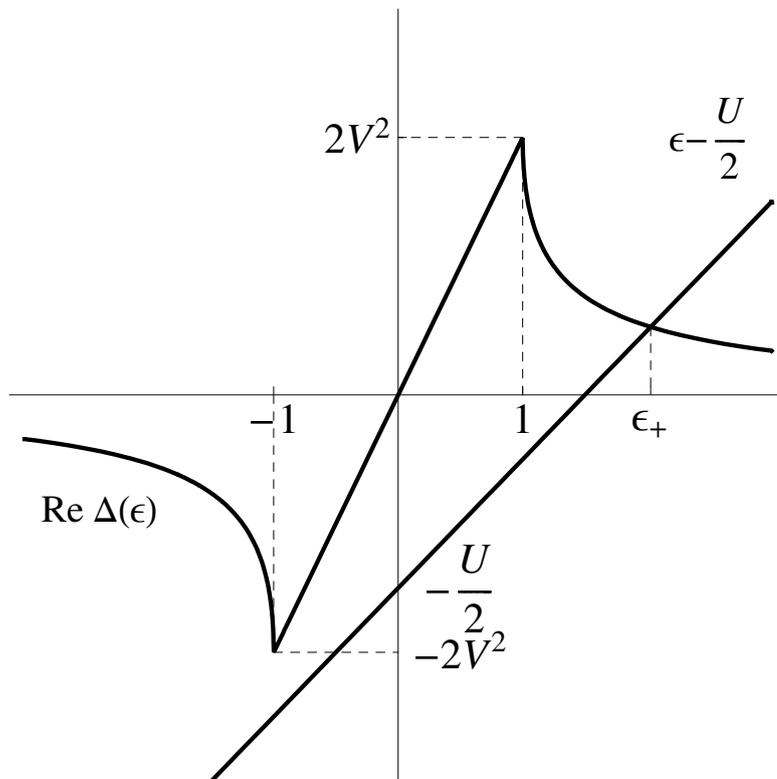


Рис. 3.2. Графическое решение уравнения $\Re \Delta(\epsilon) = \epsilon - U/2$.

Как видно из рисунка, величина V определяет высоту “плечей”, в то время, как $U/2$ — вертикальное смещение прямой $\epsilon - U/2$. При U достаточно большом по сравнению с $2V^2$ существует только одна точка пересечения кривых на положительной полуоси, а именно ϵ_+ . Результаты полного анализа уравнения приведены в таблице:

V, U	Корни
$V = 1/2$	$\epsilon = \frac{1}{2} \left(U + \frac{1}{U} \right)$
$V \neq 1/2, 2V^2 < 1, U/2 < 1 - 2V^2$	нет вещественных корней
$V \neq 1/2, U/2 > 1 - 2V^2 $	$\epsilon = \epsilon_+$
$2V^2 \geq 1, U/2 \leq 2V^2 - 1$	$\epsilon = \epsilon_+, \epsilon_-$

$$\epsilon_{\pm} = \frac{(U/2)(4V^2 - 2) \pm 4V^2 \sqrt{4V^2 + (U/2)^2 - 1}}{2(4V^2 - 1)}$$

Оба полюса $U/2 - i0$ и $\epsilon_+ - i0$ лежат в четвертом квадранте, а $\Delta(\epsilon)$ имеет разрез на отрезке $[-1; 1]$. Чтобы выполнялось условие причинности, полюса и разрез нужно сдвинуть инфинитезимальным образом вверх при $\epsilon < 0$ и вниз при $\epsilon > 0$.

Такое расположение полюсов позволяет нам выбрать контур интегрирования в верхней полуплоскости (подынтегральное выражение спадает на бесконечности по закону ϵ^{-3}), а затем деформировать его в малый контур C , как показано на рисунке 3.3.

Далее, подынтегральное выражение в (3.18) разбивается на две части следующим образом:

$$\Sigma_U^{\text{dual}} = -i \frac{U}{2\pi} \oint_C d\epsilon' \left(\frac{1}{\epsilon' - U/2 + i0 - \Delta(\epsilon')} - \frac{1}{\epsilon' - U/2 + i0} \right) \quad (3.20)$$

Можно заметить, что второе слагаемое не дает вклада в интеграл, т.к. не содержит особых точек, лежащих внутри контура. Чтобы вычислить вклад

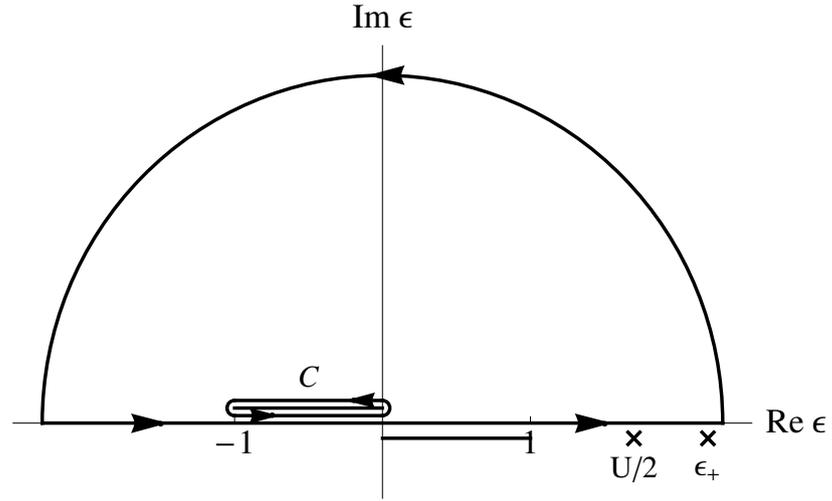


Рис. 3.3. Контур интегрирования для константной части $\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(\epsilon)$

первого слагаемого, мы подставляем выражения для вещественной и мнимой частей $\Delta(\epsilon)$ и учитываем, что мнимая часть меняет знак при переходе с одного берега разреза на другой. В результате некоторых преобразований над первым слагаемым получаем:

$$\Sigma_U^{\text{dual}} = \frac{U}{2\pi} \frac{4V^2}{1 - 4V^2} \int_{-1}^0 \frac{\sqrt{1 - \epsilon'^2} d\epsilon'}{(\epsilon' - \epsilon_+)(\epsilon' - \epsilon_-)} \quad (3.21)$$

Этот интеграл берется тригонометрической подстановкой $\epsilon' = \sin \phi$. Конечный результат:

$$\Sigma_U^{\text{dual}} = \frac{U}{2\pi} \frac{4V^2}{1 - 4V^2} \left(-\frac{\pi}{2} + \frac{L(\epsilon_+) - L(\epsilon_-)}{\epsilon_+ - \epsilon_-} \right) \quad (3.22)$$

$$L(x) \equiv \sqrt{1 - x^2} \ln \left(\frac{\sqrt{1 - x^2} + x - 1}{\sqrt{1 - x^2} - x + 1} \right) \quad (3.23)$$

Нет необходимости повторять все вычисления для второй части неприводимой вершины (пропорциональной U^2) (3.16). Дополнительный множитель $(\epsilon - \epsilon' - i0)^{-1}$ создает еще один полюс ниже вещественной оси (на плоскости ϵ'), поэтому контур интегрирования можно оставить прежним. Это означает,

что последний интеграл в (3.21) следует заменить на

$$\int_{-1}^0 \frac{d\epsilon' \sqrt{1 - \epsilon'^2}}{(\epsilon - \epsilon' - i0)(\epsilon' - \epsilon_+)(\epsilon' - \epsilon_-)} = \frac{1}{\epsilon_+ - \epsilon_-} \int_{-1}^0 \frac{d\epsilon' \sqrt{1 - \epsilon'^2}}{\epsilon - \epsilon' - i0} \left(\frac{1}{\epsilon' - \epsilon_+} - \frac{1}{\epsilon' - \epsilon_-} \right) \quad (3.24)$$

Таким образом мы свели часть с U^2 к известному результату. Финальное выражение для $\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(\epsilon)$ имеет вид:

$$\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(\epsilon) = \frac{U}{2\pi} \frac{4V^2}{1 - 4V^2} \left[-\frac{\pi}{2} + \frac{L(\epsilon_-) - L(\epsilon_+)}{\epsilon_- - \epsilon_+} + \frac{U}{\epsilon_+ - \epsilon_-} \left(\frac{L(\epsilon - i0) - L(\epsilon_-)}{\epsilon - \epsilon_-} - \frac{L(\epsilon - i0) - L(\epsilon_+)}{\epsilon - \epsilon_+} \right) \right] \quad (3.25)$$

Бесконечно малая мнимая часть в $L(\epsilon - i0)$ указывает на то, какой из берегов разреза нужно выбрать. Такая мнимая добавка не требуется в точках ϵ_{\pm} , т.к. они не лежат на разрезе ни при каких положительных V и U .

Расчет $\Sigma_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(\epsilon)$ повторяет предыдущие выкладки с небольшими отличиями:

- Полюса подынтегральных выражений лежат в точках $-U/2 + i0$ и $-\epsilon_+ + i0$.
- Контур интегрирования проходится в обратном направлении и окружает отрезок $[0; 1]$.
- Полюс $(\epsilon' - \epsilon - i0)^{-1}$ лежит выше действительной оси.

Ответ получается очень похожим:

$$\Sigma_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(\epsilon) = -\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(-\epsilon) \quad (3.26)$$

Взяв предел $V \rightarrow 1/2$ в формуле (3.25), мы получаем еще более простое выражение для этого случая:

$$\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(\epsilon)|_{V=1/2} = -\Sigma_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(-\epsilon)|_{V=1/2} = \frac{\epsilon_0 - U}{2} - \frac{1}{\pi} \left(1 + L(\epsilon_0) - U \frac{L(\epsilon_0) - L(\epsilon - i0)}{\epsilon_0 - \epsilon} \right) \quad (3.27)$$

$$\epsilon_0 = \frac{1}{2}(U + 1/U)$$

Эти выражения нужно подставить в формулу для физической функции Грина (3.13). Было установлено, что простейшая теория возмущений первого порядка в том виде, в котором она изложена выше, испытывает серьезные трудности на более высоких частотах. Эта проблема обсуждается в следующем разделе.

3.5. Процедура перенормировки.

Недостатки представленного формализма, упомянутые в конце предыдущего раздела, связаны с полюсами функции $g_{\sigma\sigma}(\epsilon)$. Во-первых, как это следует из уравнения (3.13), функция Грина $G_{\sigma\sigma}(\epsilon)$ принимает фиксированное значение $-1/\Delta(\epsilon)$ в точке, где $g_{\sigma\sigma}(\epsilon)$ имеет полюс. Исключение составляет тот случай, когда $\Sigma_{\sigma\sigma}^{\text{dual}}(\epsilon)$ зануляется в точке полюса, но, вероятно, этому условию не удовлетворяет никакой конечный порядок дуальной теории возмущений. Пиннинг значения $G_{\sigma\sigma}(\epsilon)$ нефизичен, поскольку полюса атомной задачи не являются выделенными энергетическими точками для системы с полным действием (3.1); нет правил сумм, которые предписывали бы такой пиннинг.

Дальнейший анализ показывает, что теория возмущений дает сбой не только в точке полюса, но и в его окрестности. Как следует из уравнения (3.7), затравочная дуальная функция Грина (для определенности, $\mathcal{G}_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(\epsilon)$) имеет два близких полюса: $U/2$ и $\epsilon_+ \approx U/2 + \Delta(U/2)$.

$$\mathcal{G}_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - U/2 - \Delta(\epsilon) + i0} - \frac{1}{\epsilon - U/2 + i0} = \frac{\Delta(\epsilon)}{(\epsilon - U/2 + i0)(\epsilon - U/2 - \Delta(\epsilon) + i0)} \quad (3.28)$$

Вычеты в полюсах имеют противоположные знаки, что ставит под сомнение результаты дуальной теории возмущений в этой области. Малая поправка к собственной энергии (порядка $\Delta(U/2)$) может привести к радикальной перестройке спектра — слиянию и взаимной компенсации полюсов.

Мы предлагаем процедуру перенормировки для решения проблемы пиннинга. Поскольку пиннинг отсутствует, только если дуальная собственная энергия обращается в нуль в точке полюса

$$G_{\sigma\sigma}(\epsilon_{\text{pole}}) = 0; \quad g_{\sigma\sigma}^{-1}(\epsilon_{\text{pole}}) = 0, \quad (3.29)$$

разумно *потребовать* выполнения этого условия. Введение дополнительного условия требует, чтобы в теории был свободный параметр перенормировки. Чтобы ввести такой параметр, мы модифицируем разбиение действия на квадратичную и точно решаемую части. Для этого мы переписываем действие (3.1) следующим тождественным образом:

$$\begin{aligned} S &= S'_{at} - \iint_{-\infty}^{+\infty} dt dt' \bar{c}_{\sigma t} (\Delta(t-t') + i\lambda\delta'(t-t')) c_{\sigma t'} \\ S'_{at} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left(i(1-\lambda)\bar{c}_{\sigma t} \frac{\partial}{\partial t} c_{\sigma t} - U\tilde{n}_{\uparrow t}\tilde{n}_{\downarrow t} + \mu\tilde{n}_{\sigma t} \right) \end{aligned} \quad (3.30)$$

Параметр λ на данном этапе не определен, но в дальнейшем он выбирается так, чтобы выполнялось условие (3.29). Этот трюк имеет некоторое сходство с процедурой перенормировки в квантовой теории поля, когда для решения проблем расходимости переопределяются некоторые физические константы, например, массы частиц и константы взаимодействия.

Все вычисления очень похожи на рассмотренный выше случай $\lambda = 0$. С помощью масштабного преобразования $\bar{c}_{\sigma t} = (1-\lambda)^{-1/2}\bar{c}'_{\sigma t}$, $c_{\sigma t} = (1-\lambda)^{-1/2}c'_{\sigma t}$ новая атомная задача сводится к рассмотренной, но с перенормированным значением $U' \equiv (1-\lambda)^{-1}U$. Помимо этого, множитель $(1-\lambda)^{-1}$ возникает при вычислении $g_{\sigma\sigma}$, т.к. в определении среднего стоят исходные операторы $\bar{c}_{\sigma t}, c_{\sigma t}$, а атомное действие записано в терминах новых — $\bar{c}'_{\sigma t}, c'_{\sigma t}$ (аналогично и для коррелятора Γ_{1234}):

$$g_{\sigma\sigma}(\epsilon) = \frac{1}{(1-\lambda)\epsilon \pm U'/2 \mp 0i} \quad (3.31)$$

$$\gamma_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{(4)}(\epsilon_1, \epsilon_2; \epsilon_3, \epsilon_4) = U + \frac{U'^2}{\epsilon_3 - \epsilon_2 - 0i} \quad (3.32)$$

Результат перенормированного среднеполевого приближения для локальной функции Грина электронов:

$$\mathcal{G}_{\sigma\sigma}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon \pm U' - \Delta(\epsilon) \mp 0i}, \quad (3.33)$$

т.е. перенормировка приводит лишь к сдвигу атомных резонансов. Заметим, что хотя высокочастотная асимптотика атомной функции Грина нефизична — $((1 - \lambda)\epsilon)^{-1}$ вместо $1/\epsilon$, в итоговой функции Грина этой проблемы нет. Дело в том, что добавка $-\lambda\epsilon$ к $g_{\sigma\sigma}(\epsilon)^{-1}$ компенсируется членом $i\lambda\delta'(t - t')$, добавляемым к функции гибридизации $\Delta(t - t')$.

Практические вычисления показали, что условие (3.29) выполняется при небольшом положительном значении λ , причем это значение убывает с ростом U (врезка на рисунке (3.4)).

Аналогично вычисляется поправка первого порядка в перенормированной схеме. Единственное отличие состоит в том, что $\mathcal{G}_{\sigma\sigma}^{\text{dual}}(\epsilon)$ имеет асимптотику $\frac{\lambda}{1-\lambda}\epsilon^{-1}$ для ненулевых λ и, следовательно, возникает дополнительный вклад в интеграл по контуру от вычета на бесконечности.

Окончательная формула для дуальной собственной энергии приобретает вид:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{dual}}(\epsilon; \lambda) = -\Sigma_{\downarrow\downarrow}^{\text{dual}}(-\epsilon; \lambda) = & \frac{U}{2\pi} \frac{4V^2}{1 - 4V^2} \left(-\frac{\pi}{2} + \frac{L(\epsilon'_-) - L(\epsilon'_+)}{\epsilon'_- - \epsilon'_+} \right) + \\ & + \frac{U'^2}{2\pi} \frac{4V^2}{1 - 4V^2} \frac{1}{\epsilon'_+ - \epsilon'_-} \left(\frac{L(\epsilon - i0) - L(\epsilon'_-)}{\epsilon - \epsilon'_-} - \frac{L(\epsilon - i0) - L(\epsilon'_+)}{\epsilon - \epsilon'_+} \right) + \lambda \frac{U'}{2} \end{aligned} \quad (3.34)$$

$$\epsilon'_\pm = \frac{(U'/2)(4V^2 - 2) \pm 4V^2 \sqrt{4V^2 + (U'/2)^2 - 1}}{2(4V^2 - 1)} \quad (3.35)$$

Чтобы получить графики локальных плотностей состояний, мы подставили эти формулы в уравнение (3.13). Величина λ , удовлетворяющая (3.29),

подбиралась численно (методом деления отрезка пополам). Итоговые графики плотности состояний на примеси представлены на рисунке (3.5). Кроме модифицированной зоны проводимости на графике показаны δ -пики, соответствующие изолированным резонансам. Зависимость положения пика от U построена сплошной линией на графике (3.4). Для сравнения на том же графике построены зависимости положения полюса в перенормированном (3.33) и перенормированном (3.7) приближении Хаббард-I, а также для изолированного атома.

Из уравнения (3.13) следует, что дуальная теория обладает важным свойством — удовлетворяет правилу сумм Фриделя $G_{\sigma\sigma}(0) = -1/\Delta(0)$ [120].

3.6. Заключение

Мы разработали аналитическую схему, позволяющую в первом порядке теории возмущений воспроизвести физику однозонной примесной модели Андерсона, включая появление логарифмической особенности на уровне Ферми и сдвиг изолированных атомных резонансов за счет гибридизации локализованных электронов примеси с электронами зоны проводимости.

Построенное нами разложение вблизи атомного предела для атома с вырожденным основным состоянием требует ввести процедуры нарушения симметрии и перенормировки; эти процедуры являются необходимой и неотъемлемой частью теории.

В завершение, хотелось бы сравнить представленную схему с подходом Д. Логана [121], поскольку метод локализованного момента, описанный в его работе, в некоторых моментах схож с нашей теорией. Похожая форма затраченной функции Грина используется, чтобы построить диаграммное разложение. Однако в подходе локализованного момента функции Грина определяются самосогласованным образом, т.е. включают полюса атома, частично

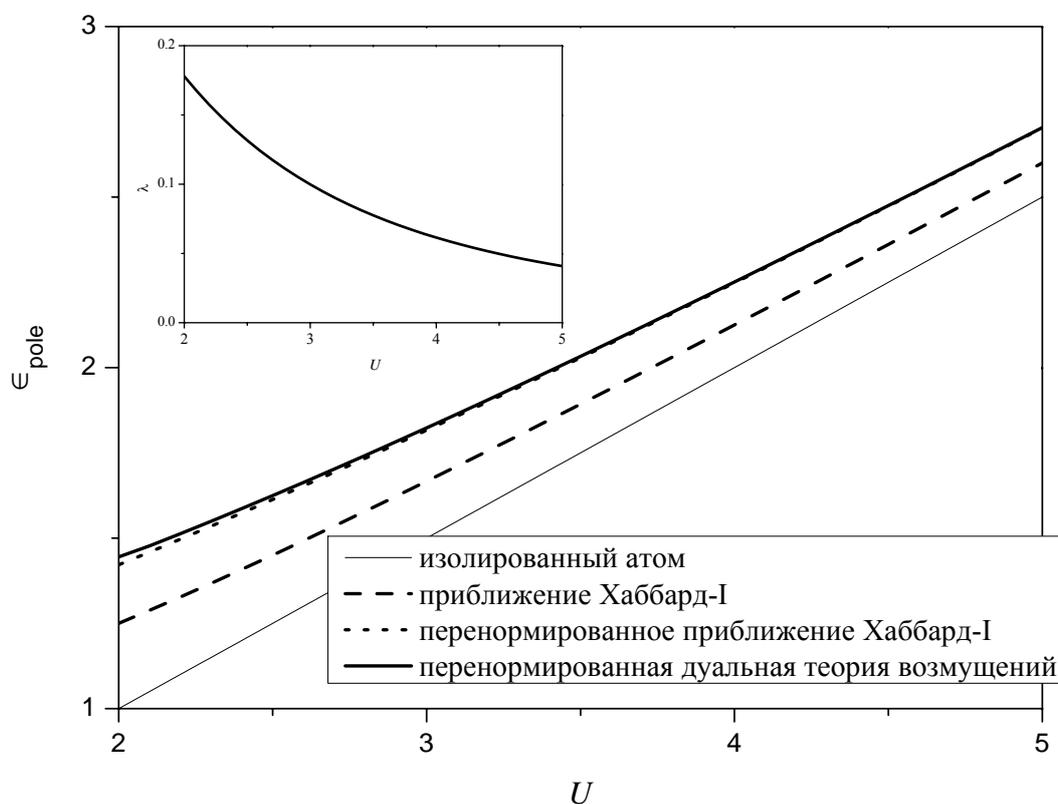


Рис. 3.4. Положение атомного резонанса однозонной симметричной модели Андерсона с $V = D/2$ в различных приближениях в зависимости от величины U . Для сравнения показан резонанс изолированного атома (т.е., $\epsilon_{\text{pole}} = U/2$). Перенормированное приближение Хаббард-I (с нарушенной симметрией) дает в два раза больший сдвиг резонанса, чем неперенормированное. Для перенормированной теории возмущений $\Sigma(\epsilon)$ обращается в ноль вблизи резонанса по построению, поэтому резонанс практически не сдвигается при учете дуальной поправки. На врезке представлена зависимость параметра перенормировки λ от U .

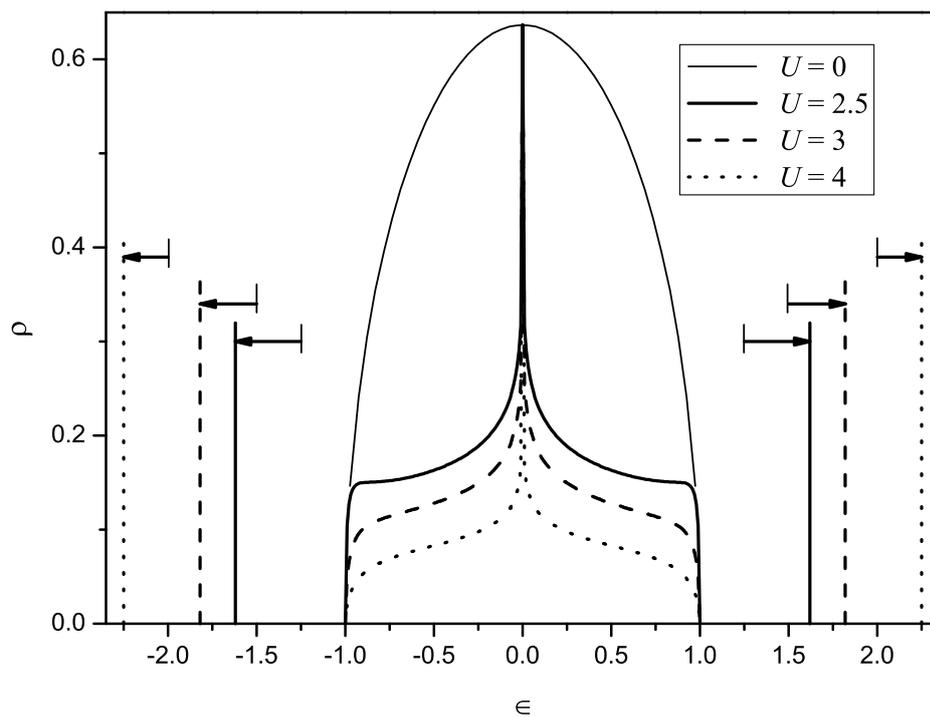


Рис. 3.5. Локальная плотность состояний $\rho(\epsilon) = -\frac{\text{sgn}(\epsilon)}{\pi} \Im G(\epsilon)$, вычисленная в первом порядке перенормированной дуальной теории возмущений. Положения атомных резонансов отмечены вертикальными линиями; высота каждой линии определяется спектральным весом резонанса. Стрелки показывают сдвиг по сравнению с резонансами изолированного атома.

“одетого” электронами проводимости. Подобным образом требуется суммирование лестничных диаграмм, чтобы получить частотно-зависимую вершину с особенностью вблизи нуля по частоте. Все это означает, что подход, предложенный Д. Логаном, является в значительной степени численным. В то же время, наша схема — почти полностью аналитическая (за исключением процедуры перенормировки). Она позволяет при необходимости учесть высшие диаграммы без существенных затрат на численный счет.

Дальнейшие перспективы развития теории связаны с ее применением к многоорбитальным системам. Насколько нам известно, подход Д. Логана встретил серьезные трудности при обобщении на случай многих зон, хотя имеются и интересные результаты [122]. Многоорбитальное обобщение представленной схемы кажется достаточно простым.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

- При помощи связки динамической теории среднего поля, квантового метода Монте-Карло в непрерывном времени и метода оптимальной стохастической регуляризации получен спектр одночастичных возбуждений в полузаполненной однозонной модели Хаббарда на решетке Бете. При температуре $T = 0.02t$ и значении константы взаимодействия $U = 4.8t$, соответствующем фазовому переходу Мотта-Хаббарда, воспроизведены спектральные особенности на внутренних краях хаббардовских подзон.
- Показано, что искусственное удаление пика на уровне Ферми из функции гибридизации не приводит к исчезновению пиков на краях хаббардовских подзон в локальной электронной плотности состояний. Этот результат свидетельствует в пользу того, что за формирование пиковой структуры на краях хаббардовских подзон отвечают зарядовые, а не спиновые возбуждения.
- Методом дуальной теории возмущений с явным нарушением симметрии основного состояния аналитически описана спектральная функция магнитной примеси с использованием полузаполненной однозонной модели Андерсона в Кондо-пределе $U \gg D$ при нулевой температуре. Логарифмическая особенность на уровне Ферми воспроизводится в первом порядке теории возмущений.
- Предложена процедура перенормировки дуальной теории возмущений, позволяющая корректно описывать высокочастотную часть спектра однозонной андерсоновской примеси. С использованием этой процедуры построены спектры при $U = 5.0 \dots 8.0t$. Вклад в сдвиг атомных резонансов за счет процедуры перенормировки сравним с вкладом, даваемым дуальной теорией возмущений.

Литература

1. Anderson P. W. Localized magnetic states in metals // Phys. Rev. 1961. Т. 124, № 1. С. 41–53.
2. Вонсовский С. В. Об обменном взаимодействии s- и d- электронов в ферромагнетиках // ЖЭТФ. 1946. Т. 16. С. 981–989.
3. Zener C. Interaction Between the *d* Shells in the Transition Metals // Phys. Rev. 1951. Т. 81. С. 440–444.
4. Изюмов Ю. А. Модель Хаббарда в режиме сильных корреляций // УФН. 1995. Т. 165, № 4. С. 403–427.
5. Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M. J. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions // Rev. Mod. Phys. 1996. Т. 68, № 1. С. 13.
6. Anderson P. W. The Theory of Superconductivity in the High- T_c Cuprate Superconductors. Princeton University Press.
7. Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N. и др. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // J. Chem. Phys. 1953. Т. 21, № 6. С. 1087–1092.
8. Hastings W. K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications // Biometrika. 1970. Т. 57, № 1. С. 97–109.
9. Troyer M., Wiese U.-J. Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations // Phys. Rev. Lett. 2005. Т. 94, № 17. С. 170201.

10. Matsubara T. A New Approach to Quantum-Statistical Mechanics // Prog. Theor. Phys. 1955. T. 14, № 4. C. 351–378.
11. Bulla R., Costi T. A., Pruschke T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems // Rev. Mod. Phys. 2008. T. 80, № 2. C. 395–450.
12. Hallberg K. A. Density-matrix algorithm for the calculation of dynamical properties of low-dimensional systems // Phys. Rev. B. 1995. T. 52. C. R9827–R9830.
13. Caffarel M., Krauth W. Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity // Phys. Rev. Lett. 1994. T. 72. C. 1545–1548.
14. Kuramoto Y. Self-consistent perturbation theory for dynamics of valence fluctuations // Z. Phys. B. 1983. T. 53. C. 37–52.
15. Bickers N. E. Review of techniques in the large- N expansion for dilute magnetic alloys // Rev. Mod. Phys. 1987. T. 59. C. 845–939.
16. Кривенко И. С., Рубцов А. Н. Анализ природы пиковой структуры подзон Хаббарда с помощью квантового метода Монте-Карло // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 94. С. 832–837.
17. Krivenko I., Rubtsov A., Katsnelson M., Lichtenstein A. Analytical approximation for single-impurity Anderson model // JETP Letters. 2010. T. 91. C. 319–325.
18. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. О применении методов квантовой теории к задачам квантовой статистики при конечных температурах // ЖЭТФ. 1959. Т. 36, № 3. С. 900–908.

19. Абрикосов А. А., Горьков Л., Дзялошинский И. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Физматгиз, 1962.
20. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния. М.: Физматлит, 2004.
21. Kramers H. A. La diffusion de la lumiere par les atomes // Atti Cong. Intern. Fisica, (Transactions of Volta Centenary Congress) Como 2. 1927. С. 545–557.
22. Kronig R. On the theory of dispersion of X-rays. // J. Opt. Soc. Am. 1926. Т. 12, № 6. С. 547–556.
23. Lehmann H. Über Eigenschaften von Ausbreitungsfunktionen und Renormierungskonstanten quantisierter Felder // Nuovo Cim. 1954. Т. 11, № 4. С. 342–357.
24. Dirac P. A. M. The Lagrangian in Quantum Mechanics // Z. Phys USSR. 1933. Т. 3. С. 64–72.
25. Feynman R. P. Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics // Rev. Mod. Phys. 1948. Т. 20. С. 367–387.
26. Фейнман Р. Ф., Хиббс А. Р. Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир, 1968.
27. Kleinert H. Path integrals in quantum mechanics, statistics, polymer physics, and financial markets. World Scientific, 2004.
28. Chaichian M., Demichev A. P. Path Integrals in Physics: Volume I. Stochastic Processes and Quantum Mechanics. Institute of Physics, 2001. Т. 1.

29. Chaichian M., Demichev A. P. Path Integrals in Physics: Volume II. Quantum field theory, statistical physics and other modern applications. Institute of Physics, 2001. Т. 2.
30. Martin J. L. The Feynman Principle for a Fermi System // Proc. Roy. Soc. A. 1959. Т. 251, № 1267. С. 543–549.
31. Березин Ф. А., Поливанов М. К. Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1986.
32. Coleman P. Introduction to Many Body Physics. Cambridge University Press, 2008.
33. Rubtsov A. N. Small parameter for lattice models with strong interaction. arXiv:cond-mat/0601333.
34. Rubtsov A. N., Katsnelson M. I., Lichtenstein A. I. Dual fermion approach to nonlocal correlations in the Hubbard model // Phys. Rev. B. 2008. Т. 77, № 3. С. 033101.
35. Rubtsov A. N., Katsnelson M. I., Lichtenstein A. I., Georges A. Dual fermion approach to the two-dimensional Hubbard model: Antiferromagnetic fluctuations and Fermi arcs // Phys. Rev. B. 2009. Т. 79, № 4. С. 045133.
36. Hafermann H. Numerical Approaches to Spatial Correlations in Strongly Interacting Fermion Systems. Cuvillier Verlag, Göttingen, 2009.
37. Абрикосов А. А. Магнитные примеси в немагнитных металлах // УФН. 1969. Т. 97, № 3. С. 403–427.
38. Hewson A. C. The Kondo Problem to Heavy Fermions. Cambridge University Press, 1993.

39. Ruderman M. A., Kittel C. Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons // *Phys. Rev.* 1954. T. 96, № 1. C. 99.
40. Kasuya T. A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener's Model // *Prog. Theor. Phys.* 1956. T. 16, № 1. C. 45–57.
41. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // *Phys. Rev.* 1964. T. 136, № 3B. C. B864–B871.
42. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Phys. Rev.* 1965. T. 140, № 4A. C. A1133–A1138.
43. Wannier G. H. The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals // *Phys. Rev.* 1937. T. 52, № 3. C. 191–197.
44. Herbst J. F., Watson R. E., Wilkins J. W. Relativistic calculations of $4f$ excitation energies in the rare-earth metals: Further results // *Phys. Rev. B.* 1978. T. 17, № 8. C. 3089–3098.
45. Schrieffer J. R., Wolff P. A. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians // *Phys. Rev.* 1966. T. 149. C. 491–492.
46. Kondo J. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys // *Prog. Theor. Phys.* 1964. T. 32, № 1. C. 37–49.
47. van Dam J. E., Gubbens P. C. M., Van Den Berg G. J. Magnetic susceptibility of some Au-V alloys // *Physica.* 1972. T. 61, № 3. C. 389–420.
48. Lederer P., Mills D. L. Intra-Atomic Coulomb Interactions and Local Exchange-Enhancement Effects in Dilute Transition-Metal Alloys // *Phys. Rev. Lett.* 1968. T. 20. C. 1036–1040.
49. Suhl H. Formation of Local Magnetic Moments in Metals // *Phys. Rev. Lett.* 1967. T. 19. C. 442–446.

50. Nozières P., De Dominicis C. T. Singularities in the X-Ray Absorption and Emission of Metals. III. One-Body Theory Exact Solution // *Phys. Rev.* 1969. T. 178. C. 1097–1107.
51. Hamann D. R. Path Integral Theory of Magnetic Alloys // *Phys. Rev. B.* 1970. T. 2. C. 1373–1392.
52. Стратонович Р. Л. Об одном методе вычисления квантовых функций распределения // *ДАН СССР.* 1957. Т. 115. С. 1097–1100.
53. Hubbard J. Calculation of Partition Functions // *Phys. Rev. Lett.* 1959. Т. 3. С. 77–78.
54. Wilson K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem // *Rev. Mod. Phys.* 1975. Т. 47. С. 773–840.
55. Krishna-murthy H. R., Wilkins J. W., Wilson K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. I. Static properties for the symmetric case // *Phys. Rev. B.* 1980. Т. 21. С. 1003–1043.
56. Krishna-murthy H. R., Wilkins J. W., Wilson K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. II. Static properties for the asymmetric case // *Phys. Rev. B.* 1980. Т. 21. С. 1044–1083.
57. Costi T. A., Hewson A. C. A new approach to the calculation of spectra for strongly correlated systems // *Physica B.* 1990. Т. 163. С. 179–181.
58. Costi T. A., Hewson A. C. Resistivity cross-over for the non-degenerate Anderson model // *Phil. Mag. B.* 1992. Т. 65, № 6. С. 1165–1170.
59. Andrei N. Diagonalization of the Kondo Hamiltonian // *Phys. Rev. Lett.* 1980. Т. 45. С. 379–382.

60. Вигман П. Б. Точное решение s-d обменной модели при $T = 0$ // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 31. С. 392–398.
61. Wiegmann P. B. Towards an exact solution of the Anderson model // Phys. Lett. A. 1980. Т. 80, № 2–3. С. 163–167.
62. Kawakami N., Okiji A. Exact expression of the ground-state energy for the symmetric Anderson model // Phys. Lett. A. 1981. Т. 86, № 9. С. 483–486.
63. Horvatić B., Sokcević D., Zlatić V. Finite-temperature spectral density for the Anderson model // Phys. Rev. B. 1987. Т. 36. С. 675–683.
64. Grewe N. Perturbation expansions for systems with strong local correlation // Z. Phys. B. 1983. Т. 52. С. 193–210.
65. Müller-Hartmann E. Self-consistent perturbation theory of the Anderson model: Ground state properties // Z. Phys. B. 1984. Т. 57. С. 281–287.
66. Coleman P. New approach to the mixed-valence problem // Phys. Rev. B. 1984. Т. 29. С. 3035–3044.
67. Florens S., Georges A. Quantum impurity solvers using a slave rotor representation // Phys. Rev. B. 2002. Т. 66. С. 165111.
68. Kirchner S., Kroha J., Wölfle P. Dynamical properties of the Anderson impurity model within a diagrammatic pseudoparticle approach // Phys. Rev. B. 2004. Т. 70, № 16. С. 165102.
69. Hedden R., Meden V., Pruschke T., Schönhammer K. A functional renormalization group approach to zero-dimensional interacting systems // J. Phys. Cond. Mat. 2004. Т. 16, № 29. С. 5279.

70. Bartosch L., Freire H., Cardenas J. J. R., Kopietz P. A functional renormalization group approach to the Anderson impurity model // *J. Phys. Cond. Mat.* 2009. T. 21, № 30. C. 305602.
71. Hirsch J. E., Fye R. M. Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals // *Phys. Rev. Lett.* 1986. T. 56. C. 2521–2524.
72. Gull E., Millis A. J., Lichtenstein A. I. и др. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models // *Rev. Mod. Phys.* 2011. T. 83. C. 349–404.
73. Rubtsov A. N., Savkin V. V., Lichtenstein A. I. Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions // *Phys. Rev. B.* 2005. T. 72, № 3. C. 035122.
74. Werner P., Comanac A., de’Medici L. и др. Continuous-Time Solver for Quantum Impurity Models // *Phys. Rev. Lett.* 2006. T. 97, № 7. C. 076405.
75. Gull E., Werner P., Parcollet O., Troyer M. Continuous-time auxiliary-field Monte Carlo for quantum impurity models // *EPL.* 2008. T. 82, № 5. C. 57003.
76. Otsuki J., Kusunose H., Werner P., Kuramoto Y. Continuous-Time Quantum Monte Carlo Method for the Coqblin-Schrieffer Model // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2007. T. 76. C. 114707.
77. Gull E., Werner P., Millis A., Troyer M. Performance analysis of continuous-time solvers for quantum impurity models // *Phys. Rev. B.* 2007. T. 76. C. 235123.
78. White S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups // *Phys. Rev. Lett.* 1992. T. 69. C. 2863–2866.

79. Schollwöck U. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states // *Ann. Physics*. 2011. Т. 326, № 1. С. 96–192.
80. Hafermann H., Jung C., Brenner S. и др. Superperturbation solver for quantum impurity models // *EPL*. 2009. Т. 85, № 2. С. 27007.
81. Jung C., Wilhelm A., Hafermann H. и др. Superperturbation theory on the real axis // *Ann. der Physik*. 2011. Т. 523, № 8–9. С. 706–714.
82. Jung C., Lieder A., Brenner S. и др. Dual-fermion approach to non-equilibrium strongly correlated problems. принято к публикации в *Ann. der Physik*.
83. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands // *Proc. Roy. Soc.* 1963. Т. 276, № 1365. С. 238–257.
84. Gutzwiller M. C. Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals // *Phys. Rev. Lett.* 1963. Т. 10. С. 159–162.
85. Kanamori J. Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals // *Prog. Theor. Phys.* 1963. Т. 30, № 3. С. 275–289.
86. Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. III. An Improved Solution // *Proc. Roy. Soc.* 1964. Т. 281, № 1386. С. 401–419.
87. Lieb E. H., Wu F. Y. Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension // *Phys. Rev. Lett.* 1968. Т. 20. С. 1445–1448.
88. Georges A., Kotliar G. Hubbard model in infinite dimensions // *Phys. Rev. B*. 1992. Т. 45. С. 6479–6483.
89. Jarrell M. Hubbard model in infinite dimensions: A quantum Monte Carlo study // *Phys. Rev. Lett.* 1992. Т. 69. С. 168–171.

90. Kotliar G., Savrasov S. Y., Haule K. и др. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory // *Rev. Mod. Phys.* 2006. Т. 78. С. 865–951.
91. Maier T., Jarrell M., Pruschke T., Hettler M. H. Quantum cluster theories // *Rev. Mod. Phys.* 2005. Т. 77. С. 1027–1080.
92. Antipov A. E., Rubtsov A. N., Katsnelson M. I., Lichtenstein A. I. Electron energy spectrum of the spin-liquid state in a frustrated Hubbard model // *Phys. Rev. B.* 2011. Т. 83. С. 115126.
93. Luttinger J. M. Fermi Surface and Some Simple Equilibrium Properties of a System of Interacting Fermions // *Phys. Rev.* 1960. Т. 119. С. 1153–1163.
94. Zhang X. Y., Rozenberg M. J., Kotliar G. Mott transition in the $d = \infty$ Hubbard model at zero temperature // *Phys. Rev. Lett.* 1993. Т. 70, № 11. С. 1666–1669.
95. Karski M., Raas C., Uhrig G. Electron spectra close to a metal-to-insulator transition // *Phys. Rev. B.* 2005. Т. 72, № 11. С. 113110.
96. Karski M., Raas C., Uhrig G. Single-particle dynamics in the vicinity of the Mott-Hubbard metal-to-insulator transition // *Phys. Rev. B.* 2008. Т. 77. С. 075116.
97. Davies B., Martin B. Numerical inversion of the Laplace transform: a survey and comparison of methods // *J. Comp. Phys.* 1979. Т. 33, № 1. С. 1–32.
98. Бейкер Д., Грейвс-Моррис П. Аппроксимации Паде. М.: Мир, 1986.
99. Thirumalai D., Berne B. J. On the calculation of time correlation functions in quantum systems: Path integral techniques // *J. Chem. Phys.* 1983. Т. 79, № 10. С. 5029–5033.

100. Beach K. S. D., Gooding R. J., Marsiglio F. Reliable Padé analytical continuation method based on a high-accuracy symbolic computation algorithm // *Phys. Rev. B.* 2000. T. 61. C. 5147–5157.
101. Schüttler H.-B., Scalapino D. J. Monte Carlo Studies of the Dynamics of Quantum Many-Body Systems // *Phys. Rev. Lett.* 1985. T. 55, № 11. C. 1204–1207.
102. Schüttler H.-B., Scalapino D. J. Monte Carlo studies of the dynamical response of quantum many-body systems // *Phys. Rev. B.* 1986. T. 34, № 7. C. 4744–4756.
103. Jarrell M., Biham O. Dynamical approach to analytic continuation of quantum Monte Carlo data // *Phys. Rev. Lett.* 1989. T. 63, № 22. C. 2504–2507.
104. Silver R. N., Sivia D. S., Gubernatis J. E. Maximum-entropy method for analytic continuation of quantum Monte Carlo data // *Phys. Rev. B.* 1990. T. 41, № 4. C. 2380–2389.
105. Silver R. N., Gubernatis J. E., Sivia D. S., Jarrell M. Spectral densities of the symmetric Anderson model // *Phys. Rev. Lett.* 1990. T. 65, № 4. C. 496–499.
106. Gubernatis J. E., Jarrell M., Silver R. N., Sivia D. S. Quantum Monte Carlo simulations and maximum entropy: Dynamics from imaginary-time data // *Phys. Rev. B.* 1991. T. 44, № 12. C. 6011–6029.
107. Jarrell M., Gubernatis J. E. Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data // *Phys. Rep.* 1996. T. 269, № 3. C. 133–195.
108. Вентцель Е. С. Теория вероятностей. М.: Наука, 1964.

109. Bryan R. Maximum entropy analysis of oversampled data problems // Eur. Biophys. J. 1990. T. 18. С. 165–174.
110. Sandvik A. W. Stochastic method for analytic continuation of quantum Monte Carlo data // Phys. Rev. B. 1998. T. 57, № 17. С. 10287–10290.
111. Syljuåsen O. F. Using the average spectrum method to extract dynamics from quantum Monte Carlo simulations // Phys. Rev. B. 2008. T. 78. С. 174429.
112. Beach K. S. D. Identifying the maximum entropy method as a special limit of stochastic analytic continuation. arXiv:cond-mat/0403055.
113. Fuchs S., Pruschke T., Jarrell M. Analytic continuation of quantum Monte Carlo data by stochastic analytical inference // Phys. Rev. E. 2010. T. 81, № 5. С. 056701.
114. Mishchenko A. S., Prokof'ev N. V., Sakamoto A., Svistunov B. V. Diagrammatic quantum Monte Carlo study of the Fröhlich polaron // Phys. Rev. B. 2000. T. 62, № 10. С. 6317–6336.
115. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. 2 изд. М.: Наука, 1979.
116. Ferrero M., Parcollet O. TRIQS, A toolkit for Research in Interacting Quantum Systems. (*готовится к публикации*).
117. Albuquerque A. F., Alet F., Corboz P. и др. The ALPS project release 1.3: open source software for strongly correlated systems // J. Magn. Mag. Mater. 2007. T. 310, № 2, часть 2. С. 1187–1193.
118. Bauer B., Carr L. D., Evertz H. G. и др. The ALPS project release 2.0: open source software for strongly correlated systems // J. Stat. Mech. 2011. T. 2011, № 05. С. P05001.

119. Boehnke L., Hafermann H., Ferrero M. и др. Orthogonal polynomial representation of imaginary-time Green's functions // Phys. Rev. B. 2011. T. 84, № 7. С. 075145.
120. Langreth D. C. Friedel Sum Rule for Anderson's Model of Localized Impurity States // Phys. Rev. 1966. T. 150, № 2. С. 516–518.
121. Logan D. E., Eastwood M. P., Tusch M. A. A local moment approach to the Anderson model // J. Phys.: Condens. Matter. 1998. T. 10, № 12. С. 2673.
122. Kauch A., Byczuk K. Local Moment Approach to Multi-orbital Anderson and Hubbard Models // Quantum Magnetism / Под ред. В. Barbara, Y. Imry, G. Sawatzky, P. C. E. Stamp. Springer, 2008. С. 85.