

Физический факультет
Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова
кафедра квантовой электроники

На правах рукописи

Рубцов Алексей Николаевич

**Методы реалистического описания систем
с сильными корреляциями и нелокальностью**

01.04.09 – физика низких температур

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Работа выполнена на физическом факультете

Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

Официальные оппоненты:

д.ф.-м.н., профессор

Анисимов Владимир Ильич

д.ф.-м.н., член-корреспондент РАН

Арсеев Петр Иварович

д.ф.-м.н., профессор

Ведяев Анатолий Владимирович

Ведущая организация:

Институт физических проблем им. П.Л. Капицы

Защита состоится 16 апреля 2009 г. в 16 часов на заседании диссертационного совета Д 501.001.70 при Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова, по адресу: Москва, Ленинские горы 1, стр. 35, конференц-зал центра коллективного пользования физического факультета МГУ

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке физического факультета МГУ.

Автореферат разослан _____ 2009 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по адресу: Москва 119991 Ленинские горы 1, физический факультет МГУ, ученому секретарю диссертационного совета Д 501.001.70 Плотникову Г.С..

Ученый секретарь

диссертационного совета,

д.ф.-м.н., профессор

Плотников Г.С.

Общая характеристика работы

Актуальность работы Экспериментальный прогресс в области сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), исследовании фотоэмиссии (включая спектроскопию с угловым разрешением, ARPES) и других спектроскопических методов позволяет получать существенную информацию об электронных и структурных свойствах нанобъектов. Физики научились манипулировать нанобъектами вплоть до уровня отдельных атомов, что открывает принципиальную возможность конструирования наноструктур с наперед заданными свойствами. При этом, особенный интерес представляют исследования свойств систем с сильными электронными корреляциями при низких температурах, необычные свойства которых обусловлены физикой низкоэнергетических многочастичных электронных возбуждений.

Однако, этот прогресс в сильной степени сдерживается отставанием теоретических и расчетных методов: серьезную проблему представляет количественно точное описание электронных свойств многих экспериментально реализованных наносистем, даже имеющих сравнительно простую структуру. В этом контексте можно упомянуть так называемые квантовые кораллы, квантовое изображение магнитного атома, кобальтовые кластеры на углеродных нанотрубках и другие объекты. В частности, СТМ-эксперименты с кластерами из атомов Cr и Co на поверхности Au(111) ¹ демонстрируют сложную связь между числом атомов, их взаимным расположением и наличием Кондо-пика на уровне Ферми системы. Спектр одиночного атома Co содержит такой пик, а спектр атома Cr – нет. Димеры как атомов Cr, так и Co Кондо-резонанса не показывают. Наличие пика в спектре тримеров Cr зависит от геометрии взаимного расположения атомов. Теоретический анализ и числен-

¹T. Jamneala, V. Madhavan, and M.F. Crommie, Phys. Rev. Lett. **87** 256804 (2001).

ные расчеты указанных систем должны принципиальным образом включать в рассмотрение эффекты межэлектронных корреляций. Это сразу означает недостаточность таких методов расчета, как, например, метод функционала плотности.

Учет электронных корреляций необходим также при описании объемных свойств материалов с частично заполненными внутренними оболочками. Можно упомянуть такие системы, как высокотемпературные сверхпроводники ² и магнетики с делокализованными электронами ³.

Некоторые многочастичные эффекты могут быть учтены в рамках простых моделей, таких как модели Андерсона и Кондо, однако, в этом случае модели не содержат конкретной информации о соединениях и, соответственно, расчеты не могут количественно описывать экспериментально наблюдаемые свойства реальных структур.

Цель диссертационной работы Основной задачей диссертации является построение методов реалистического описания систем с сильными электронными корреляциями. Под реалистическим понимается количественно точное описание в диапазоне параметров задачи, соответствующем экспериментальной ситуации (в противоположность модельному описанию, предполагающему выбор вида и параметров модели, допускающий возможность точного решения или построения теории возмущений по тому или иному малому параметру). В соответствии с установившейся терминологией, сильнокоррелированными называют системы, в которых характерная величина кулоновского взаимодействия электронов сравнима с шириной зон. Основные требования к развиваемым аналитическим и численным методам состоят в следующем. Во-первых, существенно необходимым является включение в теорию много-

²D.J. Scalapino, Phys. Rep. **250** 329 (1994)

³T. Moriya, Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism T. – Berlin : Springer, 1985.

электронных эффектов в низкоэнергетической области спектра, соответствующей случаю низких температур. Во-вторых, поскольку коррелированные оболочки являются многоорбитальными, теория должна быть пригодной для описания термовых эффектов для таких оболочек. В-третьих, поскольку во многих экспериментально важных системах существенны корреляции электронов, находящихся на различных узлах решетки, теория должна описывать такие нелокальные эффекты. Наконец, точность развиваемых методов должна быть достаточной, чтобы рассматривать (хотя бы в перспективе) возможность прямого сравнения результатов первопринципных расчетов с экспериментальными данными. Представленные в диссертации подходы решают эти задачи, открывая, таким образом, новое научное направление – реалистическое описание нелокальных эффектов в системах с сильными корреляциями.

Научная новизна

В работе представлено два новых взаимодополняющих метода – метод дуальных переменных и квантовый метод Монте-Карло в непрерывном времени. Эти методы в совокупности позволяют количественно точно определять свойства решеточных моделей с кулоновским взаимодействием на узле.

Хотя решеточные модели являются базовыми для описания систем с коррелированными электронами, задача анализа их свойств до сих пор представляет существенные трудности. Это связано, с одной стороны, с неприменимостью асимптотических разложений, построенных вблизи пределов сильной и слабой связи и, с другой стороны, с невозможностью прямых численных расчетов на решетке из-за проблемы экспоненциальной сложности известных алгоритмов. Автору представляется, что в этой ситуации следует использовать приближения, позволяющие непрерывным образом интерполировать между предельными случаями, допускающими явный анализ.

Такие интерполирующие теории действительно известны. Они представ-

ляют собой комбинированные схемы, в рамках которых решеточная задача приближенно сводится к проблеме одного коррелированного узла, помещенного в эффективное окружение с гауссовой статистикой (так называемая примесная задача). Предполагается, что задача определения свойств примесной задачи гораздо проще расчетов для решетки. Корректное поведение таких схем в предельных случаях гарантируется их построением.

Поскольку наиболее интересные и важные эффекты в спектрах квазичастиц связаны со спиновыми и орбитальными флуктуациями, требуется использование приближений, в которых собственная энергия зависит от частоты. Включение в рассмотрение эффектов временной дисперсии приводит к динамическому приближению среднего поля (DMFT)⁴. Физически, основное приближение DMFT заключается в предположении о том, что корреляции в системе локализованы в пространстве (то есть, на узле решетки), но нелокальны во времени.

Применительно к методу DMFT можно поставить два вопроса. Во-первых, необходимо указать, каким именно образом решать примесную задачу. Во-вторых, необходимо определить, в какой мере оправданным является предположение о пространственной локализации корреляций и рассмотреть возможные обобщения. Решению этих вопросов и посвящена диссертация.

Предложенный в диссертации квантовый метод Монте-Карло в непрерывном времени (СТ-QMC) – новый метод численного решения примесной задачи, основанный на случайных блужданиях в пространстве членов ряда теории возмущений по степеням взаимодействия. В отличие от использовавшегося ранее алгоритма Хирша-Фая, предложенный метод не содержит искусственной дискретизации времени и вводимых посредством преобразования

⁴A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M.J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68** 13 (1996); V. I. Anisimov, A. I. Poteryaev, M. A. Korotin, A. O. Anokhin, and G. Kotliar, J. Phys.: Condens. Matter. **9** 7359 (1997).

Хаббарда — Стратоновича классических полей. Это позволяет избавиться от систематической ошибки в полученном результате и рассматривать системы со взаимодействием, нелокальным в пространстве спиновых и орбитальных индексов. Последнее является принципиальным для корректного учета вращательной симметрии коррелированных оболочек. Алгоритм был предложен в 2004 году; в последующие годы появились и другие родственные методы, в частности использующие случайные блуждания по степеням гибридизации⁵. В настоящее время алгоритмы семейства *st-qmc* стали стандартным методом решения примесных задач.

Далее, в настоящее время наиболее распространенным методом описания пространственной нелокальности является использование так называемых кластерных методов, подразумевающих решение примесной задачи для состоящего из нескольких атомов решетки кластера. Кластерные методы страдают рядом недостатков; в частности, потерянной оказывается дальнедействующая часть корреляций, отвечающая, например, за такие эффекты, как перенормировку электронного спектра в окрестности сингулярностей ван Хофа или формирование латтинжеровской жидкости в низкоразмерных системах. В диссертации предложен новый подход к проблеме пространственной нелокальности корреляций — метод дуальных фермионов, свободный от указанного недостатка. Этот метод представляет собой диаграммную технику специального вида, в которой результат метода DMFT является нулевым приближением теории. Последующие диаграммные поправки позволяют строить регулярное разложение, включающее одновременно близко- и дальнедействующую часть корреляций

Развитые методы позволили также получить ряд новых результатов, относящихся к анализу конкретных моделей. В частности, объяснено появле-

⁵P. Werner, A. Comanac, L. de' Medici, M. Troyer, and A. J. Millis, Phys. Rev. Lett. **97**, 076405 (2006).

ние/исчезновение Кондо-пика в плотности состояний тримеров магнитных атомов на металлической подложке в зависимости от геометрии тримера. Рассмотрены свойства изоляторной фазы V_2O_3 ; описан феномен анизотропного разрушения поверхности Ферми ВТСП-керамиках; исследована и объяснена фазовая диаграмма дискретной ϕ^4 модели.

Практическая значимость Развитые в диссертации методы имеют хорошую перспективу применения для задач квантовой химии и физики коррелированных наноструктур, поскольку позволяют говорить об имеющих предсказательную силу расчетах электронных свойств таких объектов.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. Разработан новый алгоритм численного моделирования систем сильно-коррелированных фермионов – квантовый метод Монте-Карло в непрерывном времени (СТ-QMC). В программе используется случайное блуждание по членам ряда теории возмущений в представлении взаимодействия. Метод не включает вспомогательных бозонных полей и не использует дискретизации времени.
2. Программа, реализующая алгоритм СТ-QMC, позволяет проводить расчеты для негамильтоновых систем с несколькими электронными орбиталями и оператора взаимодействия, нелокального в пространстве координатных, спиновых и орбитальных индексов. В проведенных расчетах функции Грина на частотах Мацубары была достигнута точность на уровне 10^{-3} и выше, что позволяет разрешать особенности электронного спектра с точностью около 5-10% для положения и 20-30% для амплитуды пиков для систем с температурой 100-300 К.
3. По результатам тестовых расчетов для систем с диагональным оператором

ром взаимодействия, СТ-QМС по сравнению с использовавшимся ранее алгоритмом Хирша-Фая ⁶, обеспечивает уменьшение требуемого числа операций в 3-5 раз, и улучшение показателя спадания среднего знака на 20 %, что позволяет моделировать системы при температурах 100 К и ниже.

4. С использованием метода СТ-QМС проведено моделирование коррелированного тримера на поверхности металла; получены графики плотности состояний. Показано, что для объяснения подавления Кондо-резонанса, экспериментально наблюдаемого в кластерах Cr на поверхности Au , необходимым условием является учет недиагональных матричных элементов гейзенберговского оператора обмена.
5. Развита новый подход – метод дуальных переменных – позволяющий регулярным образом учитывать эффекты пространственной нелокальности сильных электронных корреляций. Метод основан на переходе к ансамблю новых переменных, при этом локальная часть корреляций учитывается непосредственно в процедуре замены переменных. В предельных случаях слабой и сильной связи теория содержит явный малый параметр, а в промежуточной области может быть описана как диаграммная техника, описывающая нелокальные поправки к результату динамического приближения среднего поля.
6. Рассмотрены эффекты пространственной нелокальности корреляций в модели Хаббарда без допирования. Показано, что эти эффекты играют наибольшую роль на начальных стадиях формирования антиферромагнитной псевдощели. По сравнению с расчетом в пренебрежении нелокальными корреляциями, учет первых членов лестничного ряда ду-

⁶J. E. Hirsch and R. M. Fye, Phys. Rev. Lett. **56** 2521 (1986).

альных диаграмм для модели Хаббарда с параметрами $U = 1.0$, $t = 0.25$, $\beta = 20$ позволил улучшить точность определения локальной плотности состояний в 3-4 раза (приблизительно, от 20 до 5%).

7. Показано, что феномен анизотропного разрушения поверхности Ферми в купратах связан с эффектами пространственной нелокальности корреляций. Учет первой нелокальной поправки к динамическому приближению среднего поля для $t - t'$ модели Хаббарда с допированием 14% позволяет качественно экспериментально наблюдаемую картину частичного разрушения поверхности Ферми в антинодальном направлении при параметрах модели $U = 4.0$, $t = 0.25$, $t' = -0.075$, $\beta = 80$ (что соответствует температуре около 140 K).
8. Развита метод описания моделей решеточных степеней свободы, основанный на перенормировке теории в терминах восприимчивостей одноузельной задачи. Метод применим для переходов типа 'порядок-беспорядок', 'мягкая мода' и в промежуточной области. Нулевой порядок теории воспроизводит результат приближения среднего поля. Учет первой поправки позволяет улучшить точность вычисления критической температуры (в случае температурных флуктуаций) и критической массы (в случае нулевых квантовых флуктуаций) дискретной ϕ^4 модели с примерно 30% до 0-7 % (в зависимости от типа перехода).
9. Развита аналогия метода дуальных фермионов для классических решеточных моделей с локализованной нелинейностью. На его основе построен метод ренормализационной группы, включающий переход к новым переменным на каждом шаге ренормгруппового преобразования. В случае трехмерной модели Изинга, нулевое (гауссово) приближение метода оказывается совместимым с гипотезой подобия и воспроизводит значения

критических индексов с точностью около 1%.

Структура и объем диссертации Текст диссертации включает вступление, четыре главы и заключительные разделы. Общий объем диссертации — 179 страниц, без учета 26 рисунков, вынесенных на отдельные листы. Список цитированной литературы включает 101 наименование.

Содержание работы

Глава 1 представляет собой введение в проблемы теории систем с сильными электронными корреляциями и обзор работ, имеющих наибольшее значение для темы диссертации. Основной упор делается на вопросе реалистичности теоретического описания. Под реалистическим понимается количественно точное описание в диапазоне параметров задачи, соответствующем экспериментальной ситуации (в противоположность модельному описанию, предполагающему выбор параметров модели, допускающий возможность построения теории возмущений по тому или иному малому параметру). В соответствии с выбранной парадигмой, важность представляет метод динамического среднего поля (DMFT) — приближение, позволяющее свести исходную задачу на решетке к задаче об одном коррелированном узле в эффективном окружении. Это приближение за последние 15 лет стало основным методом анализа систем с сильными электронными корреляциями. В работе проанализирована физическая природа, достоинства и недостатки метода, и поставлено два основных вопроса — вопрос улучшения алгоритмов решения примесной задачи и вопрос построения теории возмущений, стартующей с DMFT и учитывающей нелокальность корреляций в системе.

Глава 2 посвящена формулировке и практическому применению нового типа алгоритмов для решения примесной задачи — квантовому методу

Монте-Карло в непрерывном времени (СТ-QMC). В отличие от использовавшихся ранее алгоритмов, предложенный метод не содержит искусственной дискретизации времени и вводимых посредством преобразования Хаббарда — Стратоновича классических полей. Это позволяет избавиться от систематической ошибки в полученном результате и рассматривать системы со взаимодействием, нелокальным в пространстве спиновых и орбитальных индексов. Последнее является принципиальным для корректного учета вращательной симметрии моделируемых систем.

Рассмотрим ансамбль фермионов с парным взаимодействием. В случае лагранжевой системы, статистическая сумма можно представить в виде:

$$Z = \text{Tr} T e^{-S}, \quad (1)$$

$$S = \int \int t_r^{r'} c_{r'}^\dagger c^r dr dr' + \int \int \int \int w_{r_1 r_2}^{r'_1 r'_2} c_{r'_1}^\dagger c^{r_1} c_{r'_2}^\dagger c^{r_2} dr_1 dr'_1 dr_2 dr'_2.$$

Разделим действие на гауссову часть S_0 и взаимодействие W следующим образом

$$Z = \text{Tr} T e^{-(S_0+W)}, \quad (2)$$

$$S_0 = \int \int \left(t_r^{r'} + \int \int \alpha_{r'_2}^{r_2} (w_{rr_2}^{r'_2} + w_{r_2 r}^{r'_2}) dr_2 dr'_2 \right) c_{r'}^\dagger c^r dr dr',$$

$$W = \int \int \int \int w_{r_1 r_2}^{r'_1 r'_2} (c_{r'_1}^\dagger c^{r_1} - \alpha_{r'_1}^{r_1}) (c_{r'_2}^\dagger c^{r_2} - \alpha_{r'_2}^{r_2}) dr_1 dr'_1 dr_2 dr'_2.$$

Здесь обобщенная координата $r = \{\tau, \sigma, j\}$ представляет собой комбинацию непрерывного аргумента - мнимого времени τ - и дискретных индексов σ, j , нумерующих, соответственно, проекцию спина и узлы решетки. Интегрирование по r определено естественным образом: $\int dr \equiv \sum_i \sum_\sigma \int_0^\beta d\tau$. Величины α_r^r представляют собой, в общем случае, функции обобщенных координат. Их значения не входят в полное выражение для действия $S_0 + W$, однако надлежащий выбор в дальнейшем позволяет оптимизировать структуру рядов теории.

Рассмотрим W в качестве возмущения и запишем разложение Z по степеням W в представлении взаимодействия:

$$Z = \sum_{k=0}^{\infty} Z_k = \sum_{k=0}^{\infty} \int dr_1 \int dr'_1 \dots \int dr_{2k} \int dr'_{2k} \Omega_k(r_1, r'_1, \dots, r_{2k}, r'_{2k}), \quad (3)$$

$$\Omega_k = Z_0 \frac{(-1)^k}{k!} w_{r_1 r'_1}^{r'_1 r'_2} \cdot \dots \cdot w_{r_{2k-1} r'_{2k-1}}^{r'_{2k-1} r'_{2k}} D_{r'_1 r'_2 \dots r'_{2k}}^{r_1 r_2 \dots r_{2k}}.$$

Здесь $Z_0 = \text{Tr} T e^{-S_0}$ — стат. сумма гауссовой системы, а величины D определены как средние следующего вида:

$$D_{r'_1 \dots r'_{2k}}^{r_1 \dots r_{2k}} = \langle T (c_{r'_1}^\dagger c^{r_1} - \alpha_{r'_1}^{r_1}) \cdot \dots \cdot (c_{r'_{2k}}^\dagger c^{r_{2k}} - \alpha_{r'_{2k}}^{r_{2k}}) \rangle_0. \quad (4)$$

Здесь символ $\langle \dots \rangle_0$ означает усреднение по гауссовому ансамблю, то есть $\langle \dots \rangle = Z_0^{-1} \text{Tr} T \dots e^{-S_0}$. Заметим сразу, что гауссов характер S_0 позволяет выписать явные формулы для величины D ; технически, вычисление D сводится к расчету детерминанта матрицы $2k \times 2k$.

Выписанные формулы можно представить в более компактной форме. Заметим, что порядок аргументов в подынтегральных выражениях не важен, то есть величины Ω_K остаются неизменными при перестановках аргументов вида $r_i, r'_i, r_{i+1}, r'_{i+1} \leftrightarrow r_j, r'_j, r_{j+1}, r'_{j+1}$. Это означает возможность ввести величину K , которую мы будем называть состоянием системы, и которая представляет собой комбинацию порядка разложения k и *неупорядоченный* набор из k четверок координат операторов. В этой нотации можно записать

$$Z = \int \Omega_K D[K], \quad \Omega_K = k! \Omega_k$$

где $\int D[K]$ подразумевает интегрирование по всем возможным реализациям неупорядоченного набора четверок координат для каждого заданного порядка разложения k , и последующее суммирование по всем k .

Полностью аналогично можно записать и формулы для средних, в част-

ности для функции Грина:

$$G_{r'}^r = Z^{-1} \int \mathcal{G}_K \Omega_K D[K]. \quad (5)$$

Несмотря на то, что выражение (5) выглядит довольно формально, оно может быть непосредственно использовано для организации вычислений методом Монте-Карло. Идея алгоритма состоит в организации марковских случайных блужданий в пространстве всех возможных K . Обратим внимание на некоторую необычность ситуации, состоящую в том, что K представляет собой множество с переменным числом элементов. Тем не менее, в работе показано, что это обстоятельство не препятствует организации марковского процесса по аналогии с алгоритмом Метрополиса — то есть, с выполнением условия детального равновесия и плотностью вероятности $P_K \propto |\Omega_K|$. Элементарный шаг этого случайного процесса состоит в уменьшении или увеличении текущего порядка разложения на 1. В первом случае из системы удаляется случайно выбранная четверка координат, во втором — добавляется новая. Шаги принимаются или отвергаются в соответствии с критерием Метрополиса.

С точки зрения организации вычислений, необходимыми условиями являются сходимость рядов и практическое знакопостоянство Ω_K (то есть, среднее по марковским блужданиям значение знака Ω_K должно существенно отличаться от нуля). В диссертации показано, что ряды вида (5) действительно сходятся. Величина же среднего знака Ω_K может быть оптимизирована выбором параметров α_K . В работе на практических примерах показано, что при правильном выборе α_K средний знак Ω_K в развитом методе оказывается во всяком случае не хуже, чем в ранее использовавшихся алгоритмах с дискретизацией времени. Разобран ряд модельных задач, показавший работоспособность написанного на основе алгоритма программного кода.

Практическая реализация алгоритма позволила получить новые важные результаты, относящиеся к свойствам кластеров магнитных атомов вблизи подложки, а также к описанию изоляторной фазы оксидов переходных металлов (на примере V_2O_3). Полученные для этих систем результаты приведены на рисунках 1 и 2.

Глава 3 посвящена диаграммной технике специального вида (диаграммной технике в дуальных переменных), предназначенной для описания нелокальных эффектов в системах сильнокоррелированных фермионов. Этот новый метод основан на переходе к специальному набору переменных, такому что локальная часть корреляций учитывается непосредственно в процедуре замены переменных, а нелокальная — посредством разложения в диаграммный ряд. Формальным малым параметром разложения оказывается вершинная часть примесной задачи DMFT. Теория непрерывным образом интерполирует между атомным пределом и пределом слабой связи; в предельных случаях малый параметр разложения может быть указан явно.

Сформулируем основные идеи вывода применительно к модели Хаббарда

$$H = \sum_{jj'\sigma} t_{r=j-j'} c_j^\dagger c_{j'} + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} - \mu \sum_j (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}). \quad (6)$$

Здесь величины U и t определяют, соответственно, кулоновское отталкивание на узле и переходы электронов между различными узлами решетки из-за перекрытия орбиталей, μ - химический потенциал, индекс j пробегает узлы решетки, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ - величина проекции спина на выбранную ось.

Нас будут интересовать равновесные свойства системы при заданной обратной температуре β . Соответствующее действие в представлении Мацубары имеет вид

$$S[c, c^*] = \sum_{\omega k \sigma} (\epsilon_k - \mu - i\omega) c_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma} + U \sum_i \int_0^\beta n_{i\uparrow\tau} n_{i\downarrow\tau} d\tau. \quad (7)$$

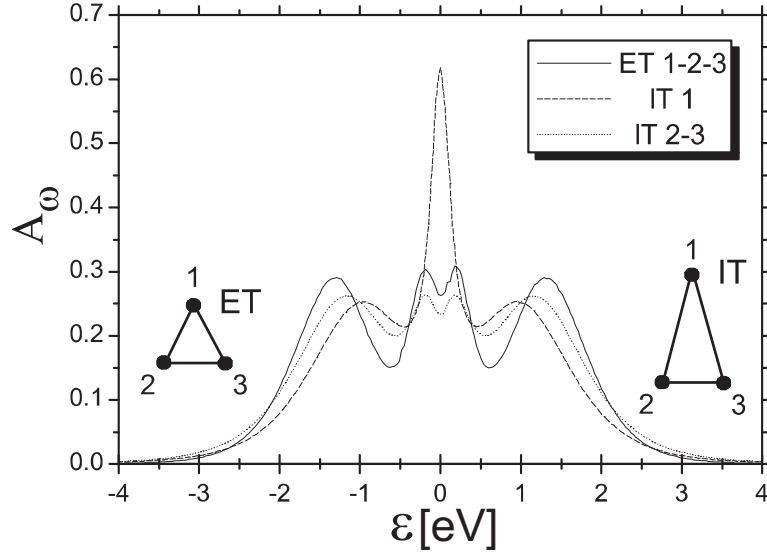


Рис. 1. Результаты СТ-QMC расчета плотности состояний коррелированного кластера в форме равностороннего (обозначены на графиках ET, equilateral triangle) и равнобедренного (обозначены IT, isosceles triangle) треугольников на поверхности подложки, для антиферромагнитного характера обменного взаимодействия. В случае равнобедренного треугольника, вершины неэквивалентны, поэтому на графиках приведено по две зависимости – для атомов основания 2,3 и для вершины 1. Кондо-пик в плотности состояний проявляется для вершины 1 и полностью подавлен в случае равностороннего треугольника (кривая 1-2-3). Работа мотивирована результатами экспериментов по СТМ-исследований кластеров магнитных атомов на поверхности немагнитных металлов. В частности, в работе ? показано, что свойства кластеров атомов Cr на поверхности Au существенно зависят от геометрии кластера: Кондо-пик отсутствует в плотности состояний кластера, если атомы расположены в вершинах равностороннего треугольника, но появляется для равнобедренного кластера со стороной, не равной основанию. На момент опубликования результатов данной работы (2005 г.), это было первое исследование данной модели, учитывающее полную матрицу оператора взаимодействия (что было невозможно для предыдущего поколения алгоритмов). Правильный учет вращательной симметрии задачи оказался принципиальным для описания эффекта. Расчет выполнен в соавторстве с В.В.Савкиным.

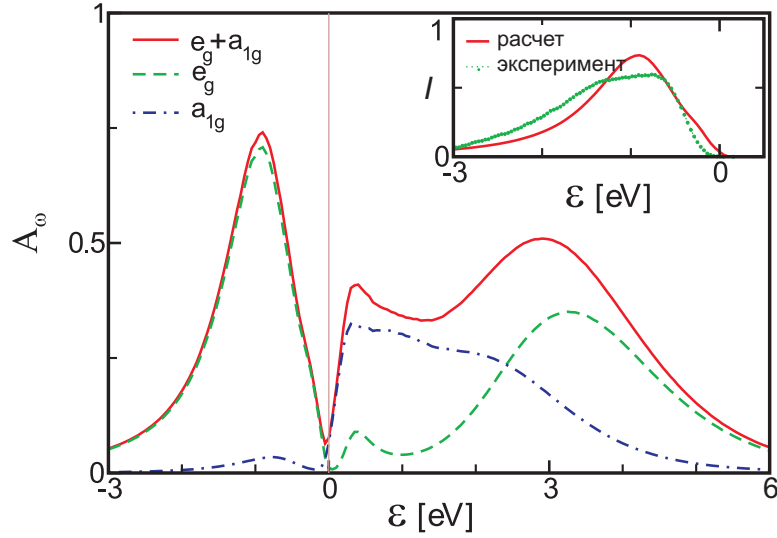


Рис. 2. Плотность состояний $(V_{0.962}Cr_{0.038})_2O_3$ для $T=580$ К ($\beta = 20$ eV^{-1}). Кристалл находится в фазе моттовского изолятора. Результаты расчетов методом DMFT с использованием СТ-QMC для значений параметров $U=4.2$ eV, $J=0.7$ eV, и t_{2g} функций Ванье, рассчитанных методом LDA. На вставке приведено сравнение известными данными по спектроскопии фотоэмиссии (теоретическая кривая получена сверткой плотности состояний с фермиевской функцией для заданной температуры, после чего была уширена на величину разрешения оборудования, использовавшегося в эксперименте (90 meV), $U=4.2$ eV, и $J=0.7$ eV. Сложность моделирования этой системы состояла в необходимости учета нарушения вырождения t_{2g} орбиталей в сочетании со сложной структурой пространства состояний системы (наличия неэквивалентных изолированных минимумов). Проблема была решена введением шагов специального типа (одновременная перестановка всех орбитальных индексов). Расчет выполнен в соавторстве с А.И. Потеряевым.

$\omega = (2j + 1)\pi/\beta$, ($j = 0, \pm 1, \dots$) – частоты Мацубары, τ – ‘мнимое время’, k – волновое число.

Следуя парадигме DMFT, введем вспомогательную одноузельную примесную задачу

$$S_{imp} = \sum_{\omega, \sigma} (\Delta_{\omega} - \mu - i\omega) c_{\omega, \sigma}^* c_{\omega, \sigma} + U \int_0^{\beta} n_{\uparrow \tau} n_{\downarrow \tau} d\tau, \quad (8)$$

где (пока не определенная) функция гибридизации Δ_{ω} описывает взаимодействие выбранного узла с эффективным гауссовым окружением. Обозначим одночастичную функцию Грина примесной задачи и ее вершинные части высших порядков, соответственно, как g_{ω} и $\gamma^{(4)}, \gamma^{(6)}, \dots$. Определение этих величин гораздо проще расчетов для исходной системы (7); в частности, их несложно вычислить численно с использованием алгоритмов семейства СТ-QMC.

Задачей теории является определение свойств системы (7), а именно функции Грина $G_{\omega k}$ и вершинных частей $\Gamma^{(n)}$, через свойства примесной задачи, которые мы будем считать известными.

Поскольку величина Δ является локальной (то есть, не зависит от k), действие (7) можно представить в следующем виде

$$S[c, c^*] = \sum_i S_{imp}[c_i, c_i^*] - \sum_{\omega k \sigma} (\Delta_{\omega} - \epsilon_k) c_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma}. \quad (9)$$

Последующие выкладки определяют переход к новому ансамблю грассмановых переменных f, f^* . Поскольку этот переход не содержит приближений, мы называем новые переменные дуальными.

Отправной точкой является тождество

$$e^{A^2 c_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma}} = \left(\frac{A}{\alpha}\right)^2 \int e^{-\alpha(c_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma} + f_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma}) - \alpha^2 A^{-2} f_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma}} df_{\omega k \sigma}^* df_{\omega k \sigma}, \quad (10)$$

которое выполняется для произвольных комплексных коэффициентов A и α . Выберем $A^2 = \Delta_\omega - \epsilon_k$, $\alpha = g_\omega^{-1}$ для каждой фермионной моды.

Подставляя указанное тождество в выражение $Z = \int e^{-S[c, c^*]} \mathcal{D}c^* \mathcal{D}c$ для статистической суммы модели (6), получим выражение для действия, включающее как исходные, так и новые переменные: $Z = \int \int e^{-S[c, c^*, f, f^*]} \mathcal{D}f^* \mathcal{D}f \mathcal{D}c^* \mathcal{D}c$,

$$S[c, c^*, f, f^*] = - \sum_{\omega k} \ln (g_\omega^2 (\Delta_\omega - \epsilon_k)) + \sum_i S_{imp}[c_i, c_i^*] + \\ + \sum_{\omega k \sigma} [g_\omega^{-1} (f_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma} + c_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma}) + g_\omega^{-1} (\Delta_\omega - \epsilon_k)^{-1} g_\omega^{-1} f_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma}] . \quad (11)$$

Смысл перехода к действию $S[c, c^*, f, f^*]$ заключается в том, что, поскольку $\sum_k g_\omega^{-1} (f_{\omega k \sigma}^* c_{\omega k \sigma} + c_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma}) = \sum_j g_\omega^{-1} (f_{\omega j \sigma}^* c_{\omega j \sigma} + c_{\omega j \sigma}^* f_{\omega j \sigma})$, выражение (11) не содержит нелокальных членов по отношению к переменным c, c^* . Поэтому интегрирование по этим переменным в стат. сумме с действием (11) сводится к решению одноузловой задачи. Формально, результат такого интегрирования можно представить в виде выражения

$$S[f, f^*] = - \sum_{\omega k} \ln (g_\omega^2 (\Delta_\omega - \epsilon_k)) - \sum_i \ln z_i^{imp} + \\ + \sum_{\omega k \sigma} g_\omega^{-1} ((\Delta_\omega - \epsilon_k)^{-1} + g_\omega) g_\omega^{-1} f_{\omega k \sigma}^* f_{\omega k \sigma} + \sum_i V_i, \quad (12)$$

в котором $z_i^{imp} = \int e^{-S_{imp}[c_i^*, c_i]} \mathcal{D}c_i^* \mathcal{D}c_i$ представляет собой статистическую сумму примесной задачи, а “дуальный потенциал” $V_i \equiv V[f_i^*, f_i]$ определяется выражением, включающим интегрирование по переменным, относящимся только к одному узлу. Коэффициенты Тейлора для $V[f_i, f_i^*]$ с точностью до знака оказываются равны вершинным частям примесной задачи $\gamma^{(4)}, \gamma^{(6)}, \dots$

Переход к новым переменным f^*, f привел к выражению для действия (12), напоминающему исходное действие (7). Выражения для средних в новых и исходных переменных удастся связать посредством точных соотношений. В частности, можно получить тождество, связывающее функцию Грина ис-

ходного ансамбля $G_{\omega k}$ и собственно-энергетическую дуальной системы $\Sigma_{\omega k}^{dual}$:

$$G_{\omega k} = \frac{1}{g_{\omega}^{-1} + \Delta_{\omega} - \epsilon_k - (g_{\omega} + (\Sigma_{\omega k}^{dual})^{-1})^{-1}}. \quad (13)$$

Разумеется, поскольку переход к новым переменным является точным, он не упрощает задачу с точки зрения формального анализа. Идея замены переменных состоит в том, что при оптимально выбранной функции гибридизации Δ , действие (12) допускает построение теории возмущений (диаграммной техники), более эффективной, чем для исходной задачи (7). Это предположение оправдывается тем фактом, что при соответствующем выборе Δ уже гауссово приближение для дуальной системы $\Sigma_{\omega k}^{dual} = 0$ позволяет воспроизвести результат расчета методом DMFT, который полностью включает эффекты локализованных на узле корреляций. Дальнейшие диаграммные поправки по степеням нелинейности $V[f^*, f]$ улучшают результат DMFT, позволяя включить в рассмотрение нелокальную часть корреляций.

Диаграммы по степеням нелинейности дуального потенциала строятся стандартным образом. Их узлы соответствуют членам ряда Тейлора для V , то есть вершинным частям примесной задачи, а линии - функции Грина дуальных переменных G_{dual} (рисунок 3). В качестве критерия выбора функции гибридизации Δ в общем случае предложено требовать обращения в нуль простых петель на диаграммах (диаграмма *a* на рисунке 3), что существенно упрощает структуру диаграмм и позволяет воспроизвести результат DMFT для нулевого порядка теории. В работе проанализированы свойства полученной диаграммной техники. Рассмотрение модельных примеров показало очень быструю практическую сходимость - хорошие результаты дает уже учет первой нелокальной поправки (диаграмма *b* на рисунке 3). Конкретные результаты, полученные для модели Хаббарда, приведены на рисунках 4, 5.

Наконец, в **главе 4** рассмотрено применение метода дуальных перемен-

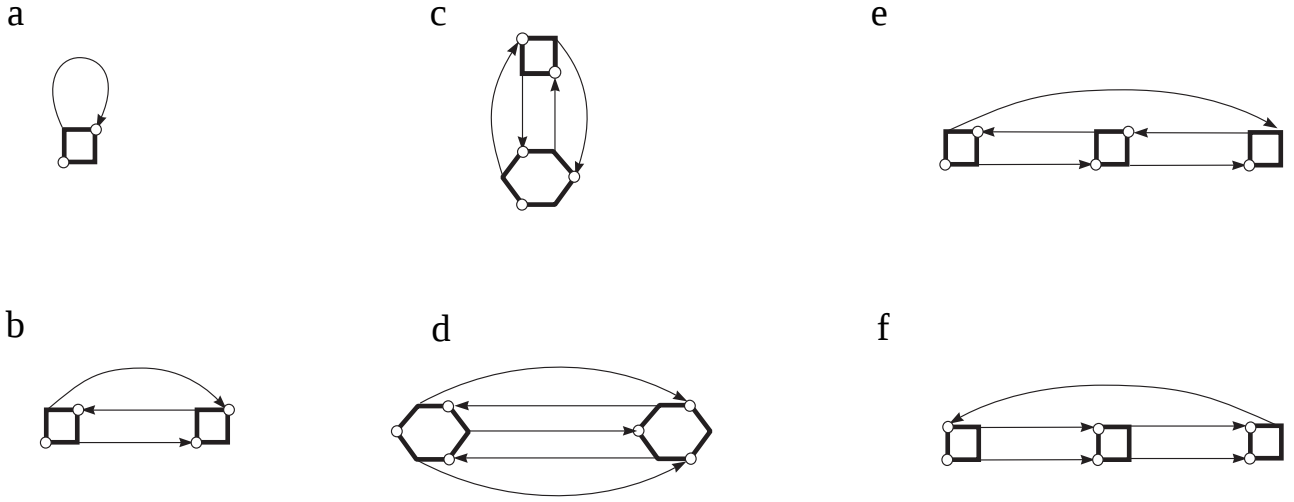


Рис. 3. Некоторые диаграммы, дающие вклад в дуальную собственно-энергетическую функцию.

ных к моделям, описывающим решеточные степени свободы, а также некоторые родственные теории. Упор сделан на построение подходов, применимых для широкого диапазона режимов рассматриваемых моделей и интерполяции между физически различными предельными случаями (например, переходами «мягкая мода» и «порядок-беспорядок»). Формальная процедура замены переменных в целом повторяет представленную в Главе 3, однако присутствуют существенные технические отличия: для классических ансамблей и квантовых систем без вторичного квантования корреляторы нечетных порядков могут отличаться от нуля. Также, дополнительного анализа потребовали вопросы сходимости интегралов.

Исследована важная проблема фазовой диаграммы дискретной ϕ^4 модели. Эта классическая решеточная модель с температурными флуктуациями и потенциальной энергией

$$E = \sum_j \left(-\frac{A}{2} \phi_j^2 + \frac{B}{4} \phi_j^4 \right) + C \sum_{\langle jj' \rangle} (\phi_j - \phi_{j'})^2, \quad (14)$$

$A, B, C > 0$ – параметры модели. Соответствующий выбор единиц измерения энергии и ϕ позволяет избавиться от двух из этих величин, так что модель

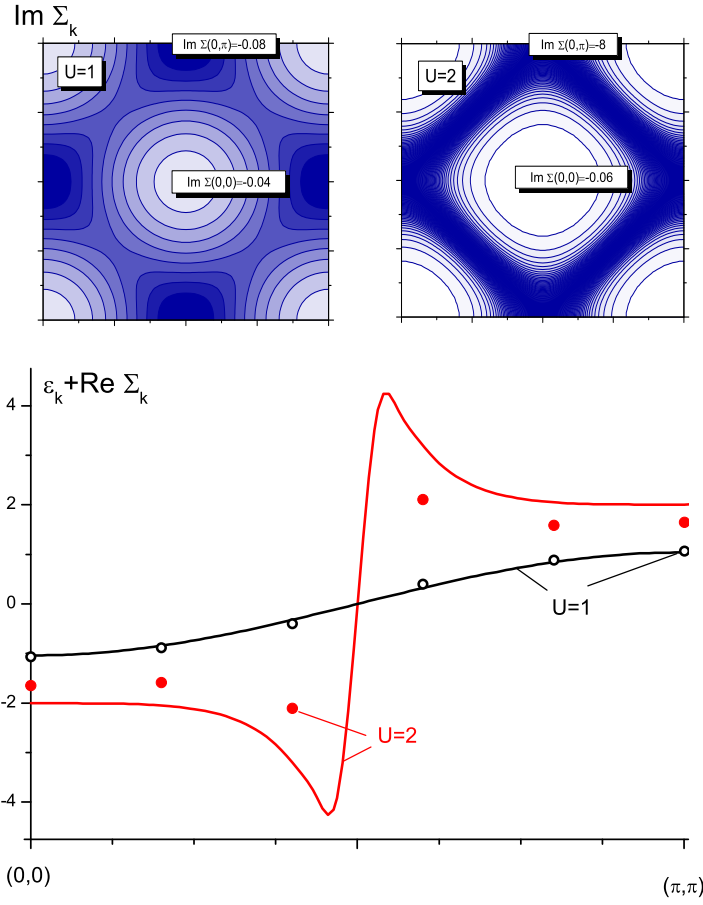


Рис. 4. Результаты расчета пространственной дисперсии собственно-энергетической функции модели Хаббарда без допирования методом дуальных переменных, с использованием диаграммы (b). Данные получены для модели Хаббарда при $t = 0.25, \beta = 20$, для значений $U = 1.0$ и $U = 2.0$. Приведенные данные относятся к энергии Ферми и получены полиномиальной экстраполяцией с частот Мацубары. *Верхняя часть*: дисперсия мнимой части собственной энергии. При переходе от $U = 1.0$ к $U = 2.0$ величина $\text{Im}\Sigma$ в максимуме возрастает на два порядка и существенно меняет характер своего пространственного распределения от металлического к характерному для антиферромагнетика. *Нижняя часть*: перенормированный закон дисперсии $\epsilon_k + \text{Re}\Sigma_{\omega=0,k}$, в сравнении с контрольными данными для решетки 10×10 . Следует заметить, что без учета диаграммной поправки, то есть в приближении одноузельного DMFT, перенормировка закона дисперсии отсутствует (собственная энергия является локальной).

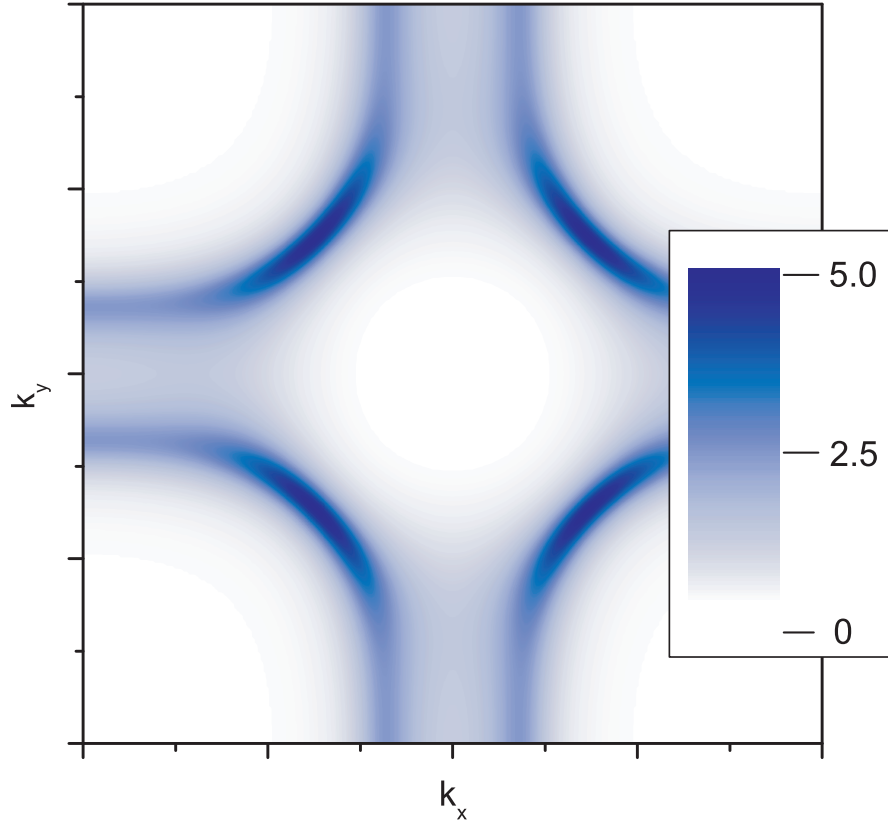


Рис. 5. Дисперсия спектральной функции допированной модели Хаббарда $A_{\omega=0,k}$ на уровне Ферми: расчет методом дуальных переменных, с использованием диаграммы (b). Использована tt' модель Хаббарда с параметрами $t = 0.25$, $t' = -0.075$, $U = 4.0$, $\beta = 80$. Величина допирования дырками 14%. Применительно к реальным ВТСП-керамикам эта область параметров соответствует так называемому режиму псевдощели. Плотность состояний, измеряемая экспериментально, в этом случае показывает провал вблизи уровня Ферми, хотя перехода в сверхпроводящее либо антиферромагнитное состояние не наблюдается. Существенной особенностью псевдощели является ее анизотропия: как следует из данных ARPES (M. R. Norman, A. Kanigel, M. Randeria, U. Chatterjee, J. C. Campuzano, Phys. Rev. B. **76** 174501 (2001)), поверхность Ферми разрушается, в первую очередь, вблизи границы зоны Бриллюэна (антинодальное направление), в то время для нодального направления экспериментальные данные по-прежнему содержат отчетливый пик на уровне Ферми. Приведенные теоретические результаты находятся в хорошем соответствии с этой картиной.

характеризуется единственным безразмерным параметром $a = A/C$.

Параметр a управляет типом перехода в системе (то есть фактически, величиной корреляций). В случае трехмерной системы, модель показывает фазовый переход второго рода при конечной температуре любом положительном значении a . При $a \rightarrow +\infty$, потенциал на узле содержит два резких глубоких минимума при $\phi = \pm\sqrt{A/B}$, и система (с точностью до тривиальных численных факторов) переходит в модель Изинга, показывающую переход ‘порядок-беспорядок’. В случае же малой нелинейности $a \rightarrow +0$, фононы остаются хорошо обусловленными квазичастицами вплоть до точки перехода, то есть имеет место переход типа “мягкая мода”. Изменение величины a позволяет непрерывным образом переходить от одного предельного случая к другому.

В работе получены надежные численные данные для фазовой диаграммы модели. Показано, что метод среднего поля обеспечивает ее описание во всем диапазоне параметров (с погрешностью около 30%). Построено обобщение этого метода, использующее разложение по степеням нелинейности отклика одноузельной задачи метода среднего поля и позволяющее уменьшить погрешность до 7%. Эти результаты приведены на рис. 6.

Далее, для описания окрестности критической точки предложен новый метод, включающий переход к дуальным переменным как элемент ренормгруппового преобразования. Рассмотрен нулевой (гауссов) порядок теории. Фактически, речь идет о ренормгрупповом преобразовании, учитывающем (в процедуре замены переменных) только локальную на узле часть корреляций. Такая теория позволяет с неожиданно хорошей точностью воспроизвести значения критических индексов трехмерной модели Изинга. Например, для индекса ν получается величина 0.652 (литературные данные – 0.63). Теория позволяет также вычислять неуниверсальные характеристики; точность та-

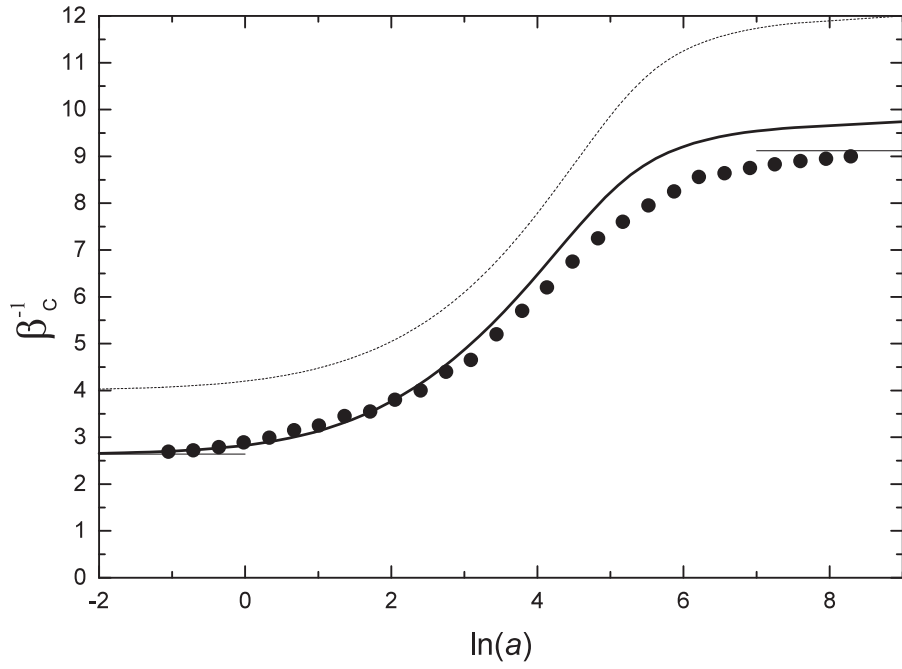


Рис. 6. Температура фазового перехода в дискретной ϕ^4 модели, как функция параметра модели a . Величина температуры перехода приведена в единицах $C|A|/B$. Точки – результаты прямого расчета на решетке методом Монте-Карло. Пунктир – приближение среднего поля. Сплошная линия – приближение независимых мод, перенормированное в терминах восприимчивости примесной задачи метода среднего поля).

ких вычислений легко повысить учет нелокальных поправок. Из полученных результатов можно заключить, что метод дуальных переменных действительно позволяет построить не только эффективные диаграммные техники, но и ренормгрупповые теории.

Апробация работы

1. Savkin, V.V. A continuous time QMC study of the correlated adatom trimer / V.V.Savkin, A.N.Rubtsov, M.I. Katsnelson, A.I.Lichtenstein // Nanostructures, St. Peterburg – 2005.
2. Рубцов, А.Н. Нелокальная физика сильных электронных корреляций / А.Н. Рубцов // Ломоносовские чтения, Москва. – 2008.
3. Рубцов, А.Н. Серия докладов по методу дуальных фермионов // Семинар по теории конденсированного состояния, ФИАН, Москва. – 2006-2007.
4. Рубцов, А.Н. Локальные и нелокальные эффекты в системах с сильными электронными корреляциями: можно ли объединить приближения слабой и сильной связи? // Семинар отделения теоретической физики ФИАН (руководитель Л.В. Келдыш), Москва. – 2006.
5. Рубцов, А.Н. Новое поколение методов Монте-Карло для расчета соединений и наноструктур с сильными электронными корреляциями / А.Н. Рубцов // Тематический семинар РНЦ “Курчатовский институт” (руководитель А.А. Солдатов), Москва. – 2007.
6. Rubtsov, A.N. Continuous time QMC for fermions // PSI-K LDA+DMFT school, Hamburg. – 2005.
7. Rubtsov, A.N. Continuous time QMC methods: applications for DMFT and beyond // Workshop "Progress in Computational Electronic Structure

Theory Bohn. – 2008.

8. Rubtsov, A.N. Beyond the DMFT: Dual Fermion scheme // Ab-initio Many-Body Theory summer school, San-Sebastian. – 2007.
9. Rubtsov, A.N. Continuous-time QMC for fermions: state of art and perspectives // Electronic Structure Calculation of Solids and Surfaces workshop, Strasbourg. – 2004.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в виде главы в монографии и в 12 статьях в ведущих научных журналах (полный список статей автора насчитывает 40 наименований).

Глава в монографии (по материалам главы 2):

- Rubtsov, A.N. Kondo Effect in Mesoscopic System / A.N.Rubtsov, M.I.Katsnelson, E.N. Gorelov, and A.I. Lichtenstein, in book: Electron Correlations in New Materials and Nanosystems, K. Scharnberg and S.Kruchinin (eds). – Amsterdam: Springer, 2007. – PP. 327-341.

Статьи (результаты, представленные в главе 2, опубликованы в статьях 1-3, в главе 3 - в статьях 4-7, а в главе 4 - в статьях 8-12):

1. Рубцов, А.Н. Квантовый метод Монте-Карло для фермионов в непрерывном времени: выход за рамки схем со вспомогательными полями / А.Н. Рубцов, А.И. Лихтенштейн // письма ЖЭТФ. – 2004. – Т.80. – С. 67-70.
2. Savkin, V.V. Correlated adatom trimer on metal surface: A continuous time quantum Monte Carlo study / V. V. Savkin, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein // Phys. Rev. Lett. – 2005. – V.94. – P.026402. – 4 pages.

3. Rubtsov, A.N. Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions / A. N. Rubtsov, V. V. Savkin, and A. I. Lichtenstein // Phys. Rev. B. – 2005. – V.72. – P.035122. – 9 pages.
4. Hafermann, H. Cluster Dual Fermion Approach to Nonlocal Correlations / H. Hafermann, S. Brener, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein // письма ЖЭТФ. – 2007. – Т.86. – С.769-774.
5. Poteryaev, A.I. Enhanced crystal-field splitting and orbital-selective coherence induced by strong correlations in V_2O_3 / A.I. Poteryaev, J.M. Tomczak, S. Biermann, A. Georges, A.I. Lichtenstein, A.N. Rubtsov, T. Saha-Dasgupta, and O.K. Andersen // Phys. Rev. B. – 2007. – V.76. – P.085127. – 17 pages.
6. Rubtsov, A. N. Dual fermion approach to nonlocal correlations in the Hubbard model / A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein // Phys. Rev. B. – 2008. – V.77. – P. 033101. – 4 pages.
7. Brener, S. Dual fermion approach to susceptibility of correlated lattice fermions / S. Brener, H. Hafermann, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein // Phys. Rev. B. – 2008. – V.77. – PP.195105. – 12 pages.
8. Rubtsov, A.N. Crossover between displacive and order-disorder phase transition / A.N. Rubtsov, J. Hlinka, T. Janssen// Phys. Rev. E. – 2000. – V.61. – PP.126-131.
9. Савкин, В.В. Двумерные и слоистые структуры в дискретной ϕ^4 модели / В.В. Савкин, А.Н. Рубцов // ЖЭТФ. – 2000. – Т.118. – С. 1391-1401.
10. Rubtsov, A.N. Quantum phase transitions in discrete ϕ^4 model: the crossover between two types of the transition / A.N. Rubtsov, T. Janssen

// Phys. Rev. B. – 2001. – V.63. – P. 172101. – 4 pages.

11. Savkin, V.V. Quantum discrete ϕ^4 model at finite temperatures / V.V. Savkin, A.N. Rubtsov, T. Janssen // Phys.Rev. B. – 2002. – V.65. – P.214103. – 12 pages.
12. Rubtsov, A.N. Quality of the mean-field approximation: A low-order generalization yielding realistic critical indices for three-dimensional Ising-class systems / A.N. Rubtsov // Phys. Rev. B. – 2002. – V.66. – P.052107. – 4 pages.

Личный вклад автора Соискатель впервые предложил идеи методов дуальных переменных и СТ-QМС. Дальнейшая разработка этих идей, результаты которой приведены в статьях по теме диссертации, происходила с непосредственным участием автора, вклад которого во всех случаях являлся существенным или определяющим. В случаях, когда в диссертации приведены результаты, полученные не лично соискателем, этот факт явно отражен в тексте.