

# Przybliżenie dynamicznego pola średniego

Karol Makuch

15.12.2011



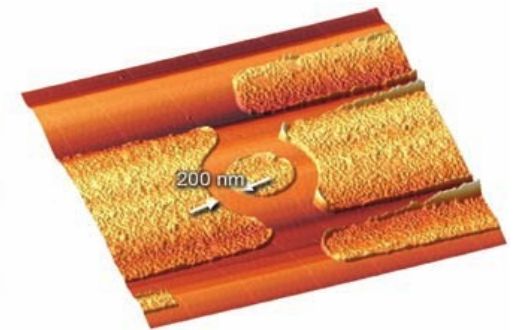
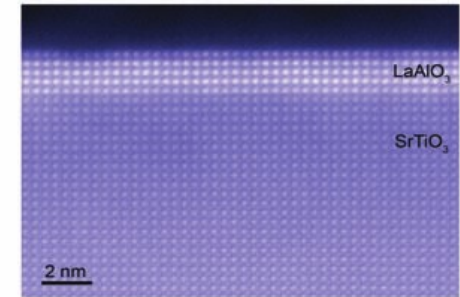
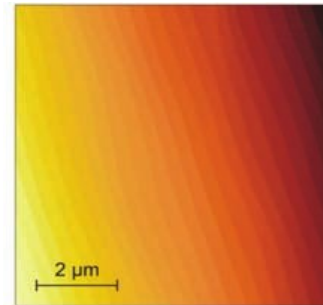
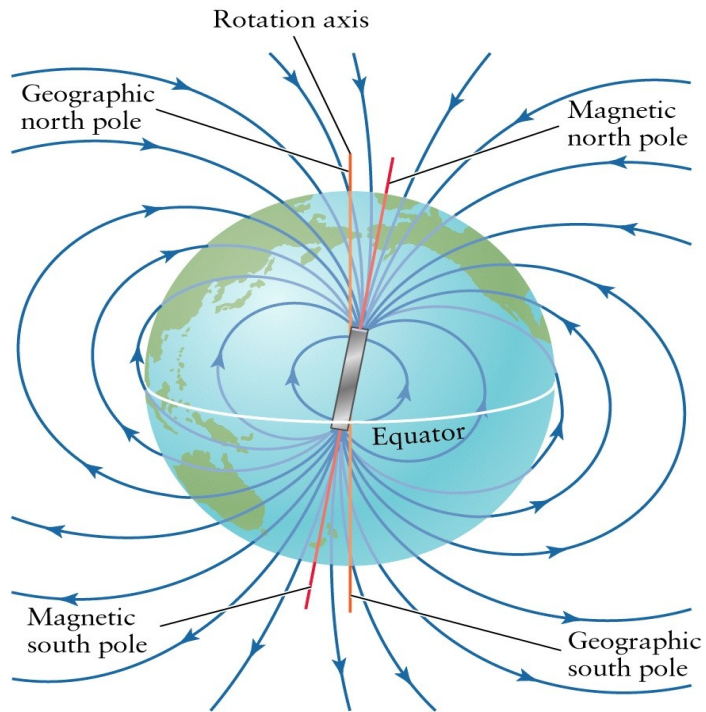
**INNOVATIVE ECONOMY**  
NATIONAL COHESION STRATEGY



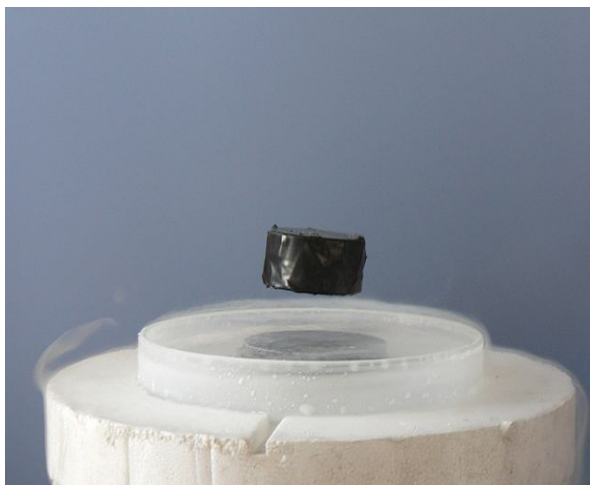
**EUROPEAN UNION**  
EUROPEAN REGIONAL  
DEVELOPMENT FUND



# Oddziaływanie elektronów



Mannhart Schlom 2010, Science



Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe

# Opis mikroskopowy

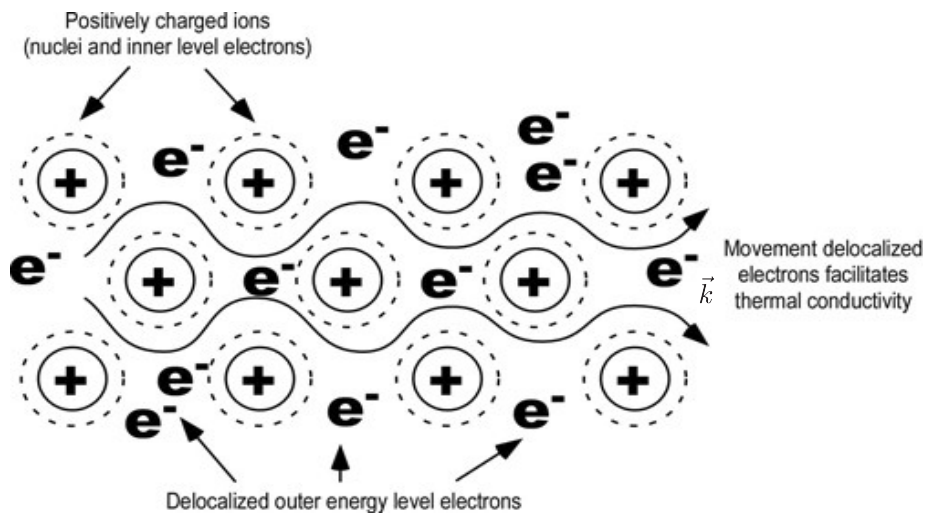
Hamiltonian elektronów w zewnętrznym potencjale (sieci krystalicznej)

$$H = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} + \sum_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} U_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{\delta} a_{\gamma}$$

Energia kinetyczna

Potencjał sieci krystalicznej

Oddziaływania coulombowskie między elektronami



Stany jednocząstkowe

$n = 0, 1, \dots$

$\vec{k}$  Pierwsza strefa Brillouina (tyle, ile węzłów sieci)

$\alpha$  spin

Jak wiąże się to z wielkościami mierzonymi (magnetyzacja, etc.)

## Jednocząstkowa termodynamiczna funkcja Greena

$$G_{\alpha\beta}(\tau, \tau') = -\langle T_{\tau} \hat{a}_{\alpha}(\tau) \hat{a}_{\beta}^{\dagger}(\tau') \rangle$$

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{N, \gamma_N} \langle \gamma_N | e^{-\beta(H - \mu \hat{N})} \dots | \gamma_N \rangle$$

uporządkowanie „czasowe”

$$T_{\tau} A(\tau) B(\tau') = \begin{cases} A(\tau) B(\tau') & \text{dla } \tau > \tau' \\ -B(\tau') A(\tau) & \text{dla } \tau < \tau' \end{cases}$$

repr. Heisenberga

$$\hat{a}_{\alpha}(\tau) = e^{\tau(H - \mu N)} \hat{a}_{\alpha} e^{-\tau(H - \mu N)}$$

---

Interpretacja dla  $\tau > \tau'$ :

do układu w stanie  $\gamma_N$  w „chwili”  $\tau'$  dokładana jest cząstka w stanie

jednocząstkowym  $\beta$ . Układ z dołożoną cząstką ewoluuje do „chwili czasu”  $\tau$ .

## Jakie informacje zawiera jednocząstkowa funkcja Greena?

Dla równych czasów – gęstość obsadzeń poszczególnych stanów:

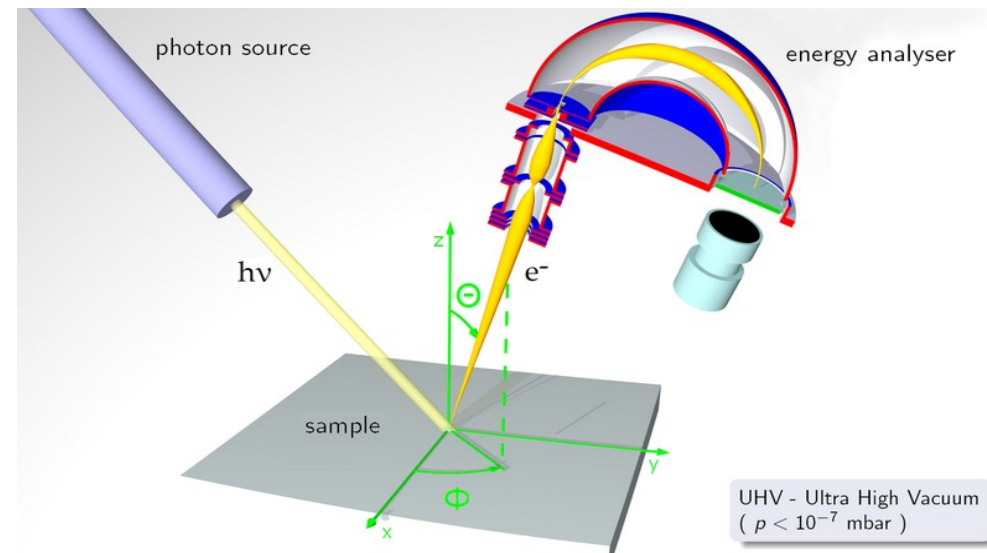
$$G_{\alpha\alpha}(0_-, 0) = \langle \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha} \rangle$$

Granica od strony ujemnej (uporządkowanie „czasowe”)

Z powyższego np.:

-informacje o fazie (ferromagnetyzm)

Bezpośredni pomiar funkcji Greena  
(przestrzeń odwrotna) poprzez  
badanie fotoemisji elektronów  
(ARPES)



# Funkcja Greena układu z zaburzeniem

$$H = H_0 + H_1$$

Dla  $H_0$  :  $G_{0,\alpha\beta}(\tau, \tau') = -\langle T_\tau \hat{a}_\alpha(\tau) \hat{a}_\beta^\dagger(\tau') \rangle$

Hamiltonian jest w średniej i ewolucji „czasowej”

Dla  $H$  :  $G_{\alpha\beta}(\tau, \tau') = -\langle T_\tau \hat{a}_\alpha(\tau) \hat{a}_\beta^\dagger(\tau') \rangle$

Równanie Dysona

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G$$

energia własna

# Wyprowadzenie równania Dysona

Wzór Matsubary:

$$e^{-\beta(H_0+H_1)} = e^{-\beta H_0} \mathbb{T}_{\beta'} e^{-\int_0^\beta d\beta' H_1(\beta')}$$

$$H_1(\beta') = e^{\beta' H_0} H_1 e^{-\beta' H_0}$$

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{\beta'} e^{-\int_0^\beta d\beta' H_1(\beta')} &= \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \dots \int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_n H_1(\beta_1) \dots H_1(\beta_n) \end{aligned}$$

Powyższe do wyrażenia na funkcję Greena

Wyrażenia reprezentowane rysunkami (diagramy Feynmana)

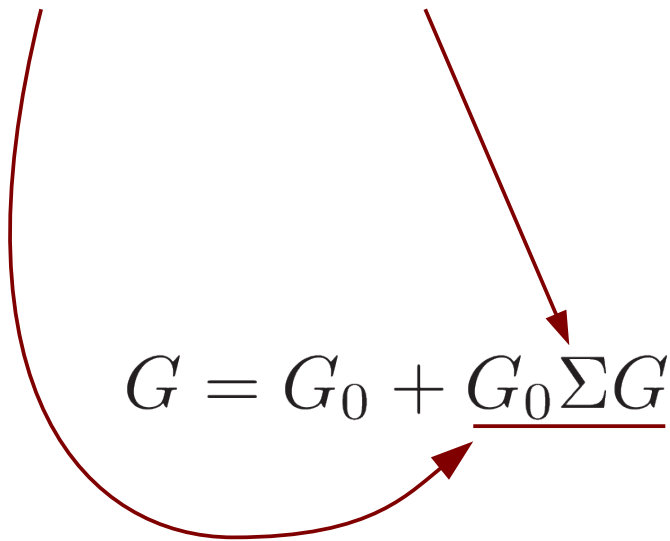
Elementy diagramu:  $G_0$ ,  $H_1$  reprezentowane odpowiednimi liniami

# Diagramy Feynmana



$G_{\alpha\beta}$  = suma wszystkich spójnych diagramów

Spójne:  
redukowalne – nieredukowalne





## (Mini)podsumowanie

Funkcja Greena – informacje o własnościach makroskopowych układu.  
Ścisłe można tę funkcję wyznaczyć tylko w szczególnych przypadkach

$$H = H_0 + H_1$$

Równanie Dysona

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G$$

# W stronę DMFT - Model Hubbarda

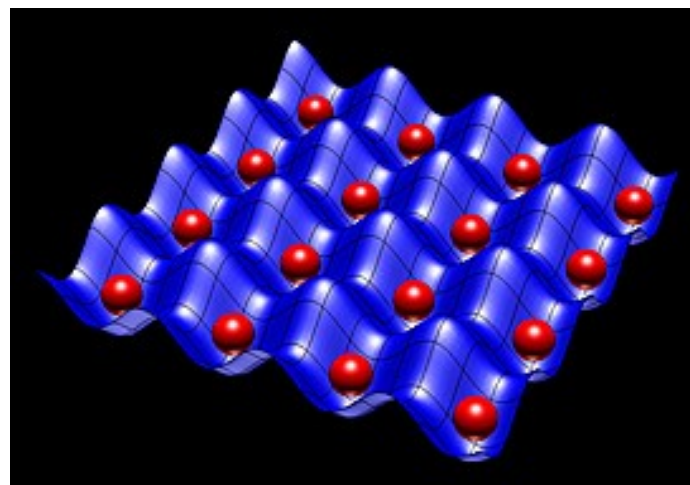
$$H = t \sum_{(i,j) \in n.n.} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{i=1}^N U \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$$

Próba wyjaśnienia ferromagnetyków klasycznych

Pomimo uproszczeń model Hubbarda nie jest ściśle rozwiązywalny  
Konieczność metod przybliżonych

Atomy na sieci optycznej

Symulacje kwantowe modelu Hubbarda?



# DMFT – początek

- Metzner i Vollhardt, 1987 – rozważanie modelu Hubbarda (przybliżenie Gutzwillera) dla różnej liczby wymiarów układu (skalowanie parametru  $t$ )

- Muller-Hartmann, 1989 – w granicy nieskończonej liczby wymiarów energia własna diagonalna

$$\Sigma_{ij} = \delta_{ij} \Sigma_{ii}$$

równanie Dysona  
można rozwiązać!

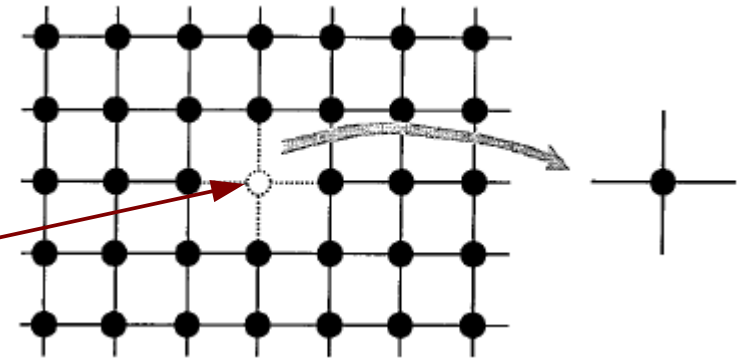
$$G = G_0 + G_0 \Sigma G$$

# Idea wyprowadzenia równań DMFT

$$H = t \sum_{(i,j) \in n.n.} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_i U \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$$

Jak efektywnie zachowuje się wybrany węzeł?

węzeł 0



$$H = H_0 + \Delta H + H^{(0)}$$

wyrazy z węzłem 0

wyrazy mieszane

Wyrazy zawierające jedynie węzły różne od zerowego

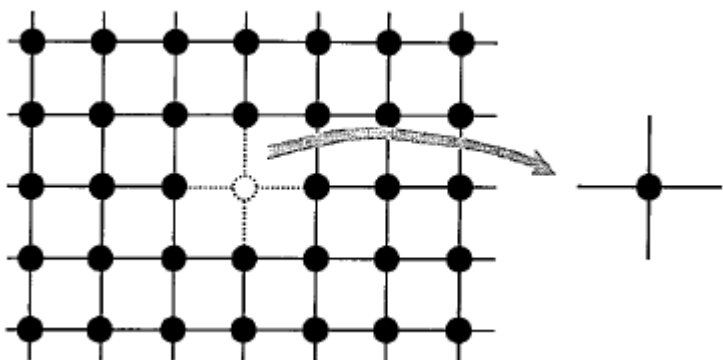
# Idea wyprowadzenia równań DMFT

$$Z = \frac{1}{|\Gamma|} \sum_{N, \gamma_N} \langle \gamma_N | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \gamma_N \rangle = \int \prod_{i\sigma} Dc_{i\sigma}^* Dc_{i\sigma} \exp[-S]$$

formalizm całek po trajektoriach

Działanie:

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^*(\tau) \left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{i\sigma}(\tau) + H(\{c_{i\sigma}^*(\tau)\}, \{c_{i\sigma}(\tau)\}) \right]$$



$$S = S_0 + \Delta S + S^{(0)}$$

$$Z = \int Dc_{0\sigma}^* Dc_{0\sigma} \exp[-S_{\text{eff}}]$$

Pełna informacja  
o zerowym węźle

Diagonalność energii własnej implikuje:

$$S_{\text{eff}} \approx \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' c_{0\sigma}^*(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau, \tau') c_{0\sigma}(\tau')$$

 Pole efektywne Weissa

$$G_{00}(\tau, \tau') = -\langle T_\tau c_{0\sigma}(\tau) c_{0\sigma}^*(\tau') \rangle_{S_{\text{eff}}}$$

Równanie Dysona dla zerowego węzła:

$$G_{00} = \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 \Sigma G_{00}$$

 Ta sama energia własna co dla pełnej funkcji Greena

# Równania DMFT

Równanie Dysona:

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G$$

Konsekwencje diagonalności energii własnej:

$$G_{00}(\tau, \tau') = -\langle T_\tau c_{0\sigma}(\tau) c_{0\sigma}^*(\tau') \rangle_{S_{\text{eff}}[\mathcal{G}_0]}$$

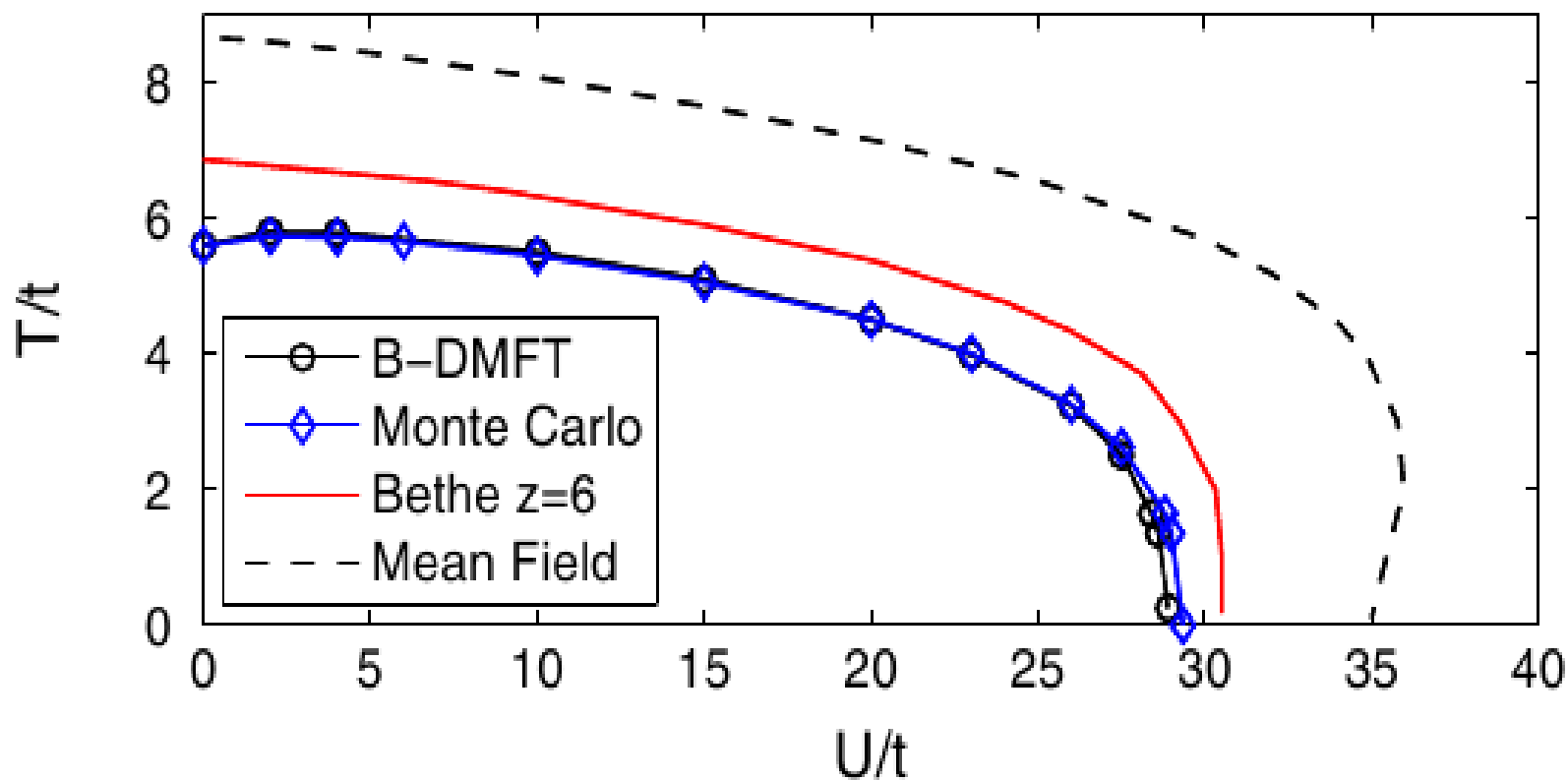
$$G_{00} = \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 \Sigma G_{00}$$

← QMC

Spójność termodynamiczna

# Bozonowy model Hubbarda (DMFT a Monte Carlo)

$$H = t \sum_{(i,j) \in n.n.} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{i=1}^N \frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)$$



Przejsie z fazy nadcieklej do normalnej ( $n=1$ ). Anders et al., PRL 2010



# Podsumowanie

- Oddziaływanie elektronów ważne w kryształach
- Wyniki DMFT dla oddziałujących elektronów (bozonowy model Hubbarda) są w dużej zgodności z obliczeniami numerycznymi (QMC)
- Przybliżenie DMFT spójne termodynamicznie (granica dużych wymiarów)
- Co dalej?

