

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Концепция среднего поля и методы пост-DMFT в современной теории коррелированных систем

Я.С. Ляхова, Г.В. Астрецов, А.Н. Рубцов

Приводится краткий обзор методов моделирования коррелированных систем. Представление о корреляциях принципиально важно для физики таких систем, как изоляторы Мотта–Хаббарда, высокотемпературные сверхпроводники, молекулярные магнетики, "скрученные" бислои графена и т.д. На примере выбранной в качестве ориентира модели Хаббарда последовательно разбираются различные вычислительные методы начиная со среднеполевых и родственных им теорий, отображающих исследуемую физическую систему на эффективный ансамбль без взаимодействия. Далее обсуждается один из наиболее распространённых сегодня методов, позволяющий точно описывать локальные корреляции, — динамическая теория среднего поля (Dynamical Mean Field Theory, DMFT). Построенные на основе DMFT диаграммные методы в различной степени включают в рассмотрение нелокальную физику при сохранении полного учёта локальных корреляций. Проводится также описание недиаграммного метода флуктуирующего локального поля, позволяющего непертурбативно включить в рассмотрение флуктуации ведущих коллективных мод системы.

Ключевые слова: сильнокоррелированные системы, динамическая теория среднего поля, флуктуации

PACS number: 71.10. – w

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2022.09.039231>

Содержание

1. Введение (825).
 2. Среднеполевые теории (827).
 - 2.1. Вариационный метод в многочастичных задачах. 2.2. Теория среднего поля. 2.3. Метод функционала плотности. 2.4. Метод GW .
 3. Учёт локальных корреляций (830).
 - 3.1. Модель Андерсона. Приближение когерентного потенциала. 3.2. Динамическая теория среднего поля. 3.3. Кластерные обобщения динамической теории среднего поля.
 4. Методы пост-DMFT (835).
 - 4.1. Учёт нелокальных корреляций с помощью диаграммных методов. 4.2. Описание нелокальных корреляций без использования диаграммных рядов.
 5. Заключение (842).
- Список литературы (843).

1. Введение

Многочастичная задача квантовой механики сводится к решению уравнения Шрёдингера, и в стационарном случае она может быть представлена в виде

$$\left(- \sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \sum_{i < j} V(x_i, x_j) + \sum_i v(x_i) \right) \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N), \quad (1)$$

где $V(x_i, x_j)$ — потенциальная энергия взаимодействия i -й и j -й частиц, $v(x_i)$ — потенциальная энергия i -й частицы во внешнем поле, $x_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ обозначает совокупность пространственного положения и направления спина i -й частицы.

Мы будем рассматривать системы тождественных фермионов, т.е. волновая функция $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ предполагается антисимметричной по перестановкам аргументов. Слагаемое, описывающее взаимодействие между частицами, является источником множества интересных физических явлений и вместе с тем основной сложности при решении задачи. Именно в многочастичных системах важны корреляции электронного движения и возникающие в результате взаимодействия между частицами коллективные моды.

Один из наиболее известных примеров из истории изучения коррелированных материалов представляет собой физика моттовских изоляторов. К моменту выхода знаменитой работы Н.Ф. Мотта [1] уже была хорошо разработана зонная теория проводимости Блоха–Вильсона [2], являющаяся, по сути, среднеполевым приближе-

Я.С. Ляхова^(1,2,a), Г.В. Астрецов^(1,3,b), А.Н. Рубцов^(1,3,c)

⁽¹⁾ Российский квантовый центр,
Большой бульвар 30, 121205 Сколково, Москва,
Российская Федерация

⁽²⁾ Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ,
Каширское шоссе 31, 115409 Москва, Российская Федерация

⁽³⁾ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Ленинские горы 1, 119991 Москва, Российская Федерация
E-mail: ^(a) yanalyakhova@gmail.com, ^(b) gastretsov@gmail.com,
^(c) ar@rqc.ru

Статья поступила 14 марта 2022 г.,
после доработки 6 сентября 2022 г.

нием. Согласно теории Блоха – Вильсона носители тока в металлах рассматриваются как свободный газ частиц без взаимодействия, движущихся в эффективном поле решётки и других электронов. Для всех веществ с нечётным числом электронов на элементарную ячейку кристалла зонная теория проводимости предсказывает металлическое поведение. Мотт в работе [1] сделал ряд важных замечаний, указав, в частности, что некоторые вещества, например оксиды никеля, при определённых условиях проявляют себя как диэлектрики, хотя, согласно зонной теории проводимости, они должны быть металлами. Кроме того, было отмечено, что эти материалы обладают магнитными свойствами, а при нагревании их диэлектрическое поведение сменяется металлическим. Позднее вещества, обладающие перечисленными выше свойствами, стали известны как *изоляторы Мотта*, а переход таких веществ между фазами металла и изолятора был назван *переходом Мотта*. В работе [1] Н.Ф. Мотт предположил, что описанное явление можно объяснить кулоновским отталкиванием электронов.

Позднее, в 1963 г., Дж. Хаббард в цикле работ, ныне известных как Hubbard I, Hubbard II и Hubbard III [3–6], предложил модель, названную *моделью Хаббарда*. Цель, которую ставил перед собой автор, — описание переходных 3d-металлов — достигалась, в частности, за счёт ряда упрощений. В оригинальной модели Хаббарда каждый узел решётки обладает одной s-подобной орбиталью, а переходы возможны только между ближайшими соседями, причём амплитуды перехода для всех пар ближайших соседей равны. Гамильтониан модели Хаббарда имеет вид

$$\hat{H}_H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} - \mu \sum_j (\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow}) + U \sum_j \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow}, \quad (2)$$

где $\hat{c}_{i\sigma}$ и $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ — операторы уничтожения и рождения фермиона со спиновой проекцией σ на узле i , $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ — оператор числа частиц, а $-t$ отвечает амплитуде перехода электрона между соседними узлами $\langle ij \rangle$ и представляет собой матричный элемент оператора Гамильтона в базисе орбитальных волновых функций Ванье. Величина U характеризует взаимодействие двух фермионов на одном узле. Количество электронов в системе определяется химическим потенциалом (уровнем Ферми) μ ; при $\mu = U/2$ в системе присутствует половина от максимально возможного количества электронов. Определённая на квадратной решётке размерностью d модель Хаббарда характеризуется законом дисперсии $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{\alpha=1}^d \cos k_\alpha$ с шириной зоны $D = 4dt$. В некоторых случаях, в частности при моделировании купратных соединений, в модель включают также перескоки по диагонали элементарной ячейки; амплитуду соответствующих связей принято обозначать t' . В рамках настоящего обзора мы ограничимся рассмотрением случая равновесных систем, характеризующихся температурой T (здесь и далее температура измеряется в энергетических единицах, при записи формул используется система $e = m = \hbar = 1$).

Модель Хаббарда успешно применяется для описания моттовских изоляторов. В двух предельных случаях: предел свободных электронов ($U \rightarrow 0$) и атомный предел ($t \rightarrow 0$) — эта модель может быть решена точно. В первом случае, при половинном заполнении $n = n_\uparrow + n_\downarrow = 1$, модель предсказывает металлическую фазу, а во втором — фазу изолятора. В течение длительного времени

оставался нерешённым вопрос о переходе из одной фазы в другую. Сложность описания промежуточного состояния объясняется необходимостью учитывать как локальную, так и зонную физику. Такой режим называют *коррелированным*. Хаббардовская решётка является отправной точкой для множества задач, связанных с описанием корреляционных эффектов. Её обобщения могут касаться увеличения количества орбиталей на узлах решётки, возможности перескоков между дальними соседями [7, 8], учёта кулоновского взаимодействия электронов на разных узлах [9].

Таким образом, модель Хаббарда является прототипной системой в физике сильных корреляций главным образом благодаря простоте вида гамильтониана. В то же время модели класса Хаббарда (как правило, многоорбитальные) важны и для расчёта реальных соединений — параметры таких гамильтонианов определяют, например, на основе результатов метода функционала плотности (см. раздел 2.3). Современный интерес к сильнокоррелированным системам обусловлен, в частности, открытием в 1986 г. высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) купратов [10], описание которых не укладывается в рамки теории Бардина – Купера – Шриффера [11]. Принято считать, что для возникновения сверхпроводимости в ВТСП-купратах существенны явления, связанные с электронными корреляциями [12], хотя и имеются особенности в электронном [13] и фононном спектрах [14], ассоциирующиеся со значительным электрон-фононным взаимодействием. В последующие десятилетия были открыты материалы с "нестандартной" сверхпроводимостью на основе рутената стронция [15] и железа [16], обнаружена сверхпроводимость в окрестности квантовой критической точки в материалах с тяжёлыми фермионами [17, 18]. Поиск возможных объяснений сверхпроводимости в указанных материалах также значительно повлиял на развитие идей о квантовых спиновых жидкостях [19], поиск которых активно ведётся и сегодня [20, 21]. Подробнее о материалах с сильными электронными корреляциями можно узнать в обзоре [22].

Наиболее современными примерами коррелированных систем фермионов являются атомы в оптических ловушках [23, 24] и ван-дер-ваальсовы гетероструктуры с плоскими зонами [25]. Ярким примером последних служит двухслойный графен (Twisted Bilayer Graphene, TBG) [26], который, в зависимости от угла относительного поворота слоёв и числа заполнения, демонстрирует многочисленные фазы, например области сверхпроводимости, состояния моттовского изолятора и полуметалла, а также состояния целочисленных и дробных топологических изоляторов [27–29] и фазы с тяжёлыми фермионами [30].

Быстрый прогресс и обилие работ в области сильных корреляций привели к ситуации, когда многим представителям широкого физического сообщества оказалось неясным, в чём заключаются основные методические результаты последних лет и насколько существенны продвижения по сравнению, скажем, с ситуацией в конце XX в. Доступные методические обзоры, на наш взгляд, ориентированы на чрезмерно узкую аудиторию: излагаемый материал изобилует техническими деталями и, являясь безусловно полезным для специалистов в области и работающих под их руководством аспирантов, не позволяет взглянуть на ситуацию "со стороны". Представляются нужными публикации, играющие ту же роль,

что и пленарные лекции на научных конференциях, т.е. адресованные в первую очередь физикам, работающим в смежных областях. Настоящий обзор преследует именно такую цель: мы постарались отразить прогресс в средне-полевых и родственных им подходах в теории коррелированных систем, достигнутый за всё время развития данной области. При этом баланс ясности и подробности изложения в большинстве случаев смещён в сторону ясности; за более детализированной информацией читателю следует обращаться к цитируемой литературе.

Здесь мы проводим краткий обзор основанных на методах среднего поля подходов, используемых при моделировании систем, которые могут быть описаны в рамках модели Хаббарда и её обобщений. Считаем важным подчеркнуть, что предлагаемые к рассмотрению методы отнюдь не исчерпывают возможных направлений исследований. Серьёзное место в решении задач физики коррелированных систем занимают также численно точные схемы. Например, ставший "классическим" метод *точной диагонализации* (Exact Diagonalization, ED), в основе которого лежит собственно диагонализация гамильтониана либо численно точный поиск волновых функций и энергий состояний, близких к основному, продолжает активно развиваться [31–34]. Так, в недавней работе [35] схема ED используется для исследования свойств молекулярных кристаллов. Целый ряд статей посвящён рассмотрению с помощью ED скрученного двухслойного графена [36–39]. К известным ограничениям метода относится в первую очередь небольшой размер доступных для расчёта решёток ввиду быстро растущих при увеличении их размера вычислительных затрат.

Требуется обязательное упоминание и многочисленное семейство *квантовых методов Монте-Карло* (Quantum Monte Carlo, QMC) [40–43]. Методы QMC зарекомендовали себя как мощный инструмент для исследования коррелированных систем [44–46]. Доступные для расчётов размеры решёток здесь несколько больше, чем в случае с ED, однако исследователям приходится иметь дело с дополнительным ограничением. Речь идёт о так называемой *проблеме знака*, решение которой остаётся актуальной задачей для специалистов в данной области [47–49]. Плодотворным подходом в этой ситуации является использование QMC в связке с другими схемами. В работе [50], например, область низких температур для модели Хаббарда, недоступная для QMC из-за проблемы знака, исследуется с помощью метода *ренорм-группы матрицы плотности* (Density Matrix Renormalization Group, DMRG). Такое сочетание методов позволило авторам воспроизвести "полосатую" магнитную структуру системы, согласующуюся с экспериментальными данными для ВТСП-купратов [51]. Широкое поле для применения DMRG в его оригинальном построении представляют собой квазиодномерные системы [52, 53]. В целом, DMRG занимает важное место в арсенале численно точных методов физики коррелированных систем [54–56] и часто успешно применяется к решению задач, связанных со сверхпроводимостью [57–59] и сложными системами с сильными корреляциями [60, 61]. Заметим, однако, что применение DMRG для двумерных и трёхмерных систем остаётся затруднительным; в настоящее время продолжается активная работа по усовершенствованию метода в этом отношении [62, 63]. Здесь стоит упомянуть активно развивающееся в послед-

ние годы направление, связанное с использованием тензорных сетей для описания коррелированных систем. В частности, ренормгрупповые подходы к построению тензорных сетей позволяют проводить расчёты для двумерной модели Хаббарда на решётках с размерами вплоть до 10×10 , причём не только при нулевых, но и при конечных низких температурах [64]. Вызывает интерес и возможность использования квантовых процессоров для симуляции коррелированных материалов. Современные квантовые процессоры способны симулировать магнитные свойства небольших молекул и кластеров на основе спиновых гамильтонианов [65, 66]. Однако для полноценного моделирования более сложных систем необходимы процессоры с большим количеством долгоживущих кубитов и высокой точностью одно- и многокубитных операций. О практической реализуемости подобных проектов стало возможным говорить благодаря внедрению в вычислительные процедуры преобразования Бравы-Китаева (Bravyi–Kitaev Transformation) [67], позволившего отобразить локальные фермионные операторы системы, состоящей из m фермионных мод, на $O(\log m)$ -кубитные операции в системе m кубитов [68, 69], что в перспективе может привести к достижению высокой вычислительной эффективности квантовых симуляторов коррелированных систем большого размера.

После краткого отступления относительно методов, оставшихся за рамками настоящего обзора, вернёмся к нашей основной теме. Обзор построен следующим образом. Мы начинаем с обсуждения семейства средне-полевых методов и вариационного принципа в разделе 2. Теория среднего поля и основанные на ней методы слабо учитывают корреляционные эффекты или не учитывают их совсем. В разделе 3 обсуждается один из наиболее популярных и мощных численных подходов многочастичной физики, позволяющий учитывать локальные корреляции — динамическая теория среднего поля (Dynamical Mean Field Theory, DMFT). Раздел 4 посвящён рассмотрению методов, выходящих за рамки DMFT и в той или иной степени учитывающих нелокальные корреляционные эффекты различных масштабов. Краткие итоги подводятся в разделе 5.

2. Среднеполевые теории

Одним из базовых подходов к описанию многочастичных систем является *приближение среднего поля* (Mean Field Theory, MF). В рамках среднеполевых методов полная задача со взаимодействием редуцируется к рассмотрению некоторого выделенного набора степеней свободы в эффективном окружении. Так, в простейшем случае стационарной теории среднего поля многочастичная система сводится к одной моде во внешнем поле. Более сложный метод функционала плотности принципиально позволяет учесть все моды, делая описание системы точным, что, впрочем, ограничено на практике отсутствием сведений о точном виде функционалов плотности. В то же время в динамической теории среднего поля даётся полное описание выделенного узла, чем обеспечивается включение в рассмотрение всех локальных эффектов, о чём мы расскажем в разделе 3.

Начнём с описания в разделе 2.1 вариационного метода как общей схемы, позволяющей ввести понятие среднего поля последовательным образом.

2.1. Вариационный метод в многочастичных задачах

При рассмотрении задач квантовой механики непосредственное решение уравнения Шрёдингера часто оказывается недоступным. Одним из подходов к решению поставленной задачи в таких случаях является *вариационный метод*. В простейшей формулировке вариационный метод сводится к рассмотрению энергии основного состояния как функционала волновой функции:

$$E[\psi(\zeta)] = \langle \psi(\zeta) | \hat{H} | \psi(\zeta) \rangle, \quad (3)$$

где ζ — некоторый параметр, от которого зависит пробная волновая функция $\psi(\zeta)$. Минимизируя (3), получим приближение для волновой функции ψ_0 и энергии основного состояния E_0 .

Одним из самых известных вариационных методов в физике коррелированных систем является *приближение Гуцвиллера* [70]. Пробная волновая функция Гуцвиллера основного состояния модели Хаббарда, представляемая в виде

$$|\Psi_G\rangle = \prod_{i=1}^N (1 - \zeta \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}) |\Psi_0\rangle, \quad (4)$$

построена таким образом, чтобы описать уменьшение вклада состояний с двойным заполнением узлов по сравнению с вкладом основного состояния системы без взаимодействия $|\Psi_0\rangle$. Параметр ζ в этой схеме, называемый *параметром Гуцвиллера*, находится минимизацией энергии основного состояния. Данная схема примечательна тем, что позволяет приблизиться к описанию моттовского перехода: изменение величины взаимодействия U приводит к изменению искомого значения ζ , благодаря чему можно плавно переходить от предела невзаимодействующих фермионов к атомному пределу. В качестве одного из основных недостатков метода Гуцвиллера отметим сложности с контролем погрешности и возможностью улучшения полученного результата.

Во многих случаях вместо пробной волновой функции проще оказывается вводить пробный гамильтониан, допускающий явное вычисление собственных функций и спектра. Тогда часто бывает удобно воспользоваться *неравенством Гиббса–Боголюбова–Фейнмана* (Gibbs–Bogoliubov–Feynman, GBF) [71]. Неравенство GBF минимизирует свободную энергию $F = -T \ln \text{Tr} \exp(-\hat{H}/T)$ и, таким образом, является применимым для описания систем при конечной температуре. Неравенство GBF имеет вид

$$F \leq F' + \langle \hat{H} - \hat{H}' \rangle', \quad (5)$$

где штрихом отмечены величины, относящиеся к пробному ансамблю, для которого решение известно, а $\langle \dots \rangle'$ означает термодинамическое усреднение по этому ансамблю. Подробный вывод выражения (5) можно найти в книге [72]. Неравенство (5) даёт возможность получить верхнюю оценку свободной энергии и минимизировать её, варьируя параметры пробного гамильтониана $\hat{H}'(\zeta)$. Уравнение для поиска оптимального значения вариационного параметра ζ_0 в этом случае запишется в виде

$$\delta F|_{\zeta_0} = 0. \quad (6)$$

2.2. Теория среднего поля

Сформулируем стационарную теорию среднего поля в контексте вариационного метода. В этом случае эффективное поле можно рассматривать как свободный параметр пробного среднеполевого гамильтониана и подбирать его значение, варьируя свободную энергию (5).

Продemonстрируем эту процедуру применительно к модели Хаббарда, на каждый из узлов которой действует внешнее магнитное поле h_j , направленное вдоль оси z . Гамильтониан исследуемой системы имеет вид $\hat{H} = \hat{H}_H - \sum_j h_j (\hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow})$, где $\hat{H}_H$ — гамильтониан модели Хаббарда (2). Запишем пробный гамильтониан:

$$\hat{H}_{MF} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} - \sum_j h_j^{\text{eff}} (\hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow}), \quad (7)$$

где h_j^{eff} — эффективное магнитное поле. Неравенство GBF (5) тогда примет вид

$$F \leq -T \ln Z_{MF} + \sum_j \langle U \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} - \mu (\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow}) + (h_j^{\text{eff}} - h_j) (\hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow}) \rangle_{MF}, \quad (8)$$

где $Z_{MF} = \text{Tr} \exp(-\hat{H}_{MF}/T)$.

Заметим, что $-T \delta \ln Z_{MF} = -\langle \hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow} \rangle_{MF} \delta h_j^{\text{eff}}$ и, поскольку пробный ансамбль не содержит взаимодействия, т.е. является гауссовым, $\langle \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} \rangle_{MF} = \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle_{MF} \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle_{MF}$. Далее, вариация магнитного поля не меняет зарядового состояния узлов, т.е. $\delta \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle_{MF} = -\delta \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle_{MF}$. С учётом этих соотношений условие (6) применительно к (8) даёт известный результат:

$$h_j^{\text{eff}} = h_j + \frac{U}{2} \langle \hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow} \rangle_{MF}. \quad (9)$$

Уравнение (9) можно решать, например, итерациями, на каждом шаге вычисляя

$$\langle \hat{n}_{j\sigma} \rangle_{MF} = Z_{MF}^{-1} \text{Tr} \left[\hat{n}_{j\sigma} \exp \left(-\frac{\hat{H}_{MF}}{T} \right) \right]$$

и обновляя h_j^{eff} .

Рассмотрим случай однородного внешнего магнитного поля $h_j = h$. Тогда пробная система представляет собой совокупность двух ансамблей электронов, имеющих противоположные z -компоненты спинов и характеризующихся эффективными химическими потенциалами $\mu - h^{\text{eff}}$ и $\mu + h^{\text{eff}}$ соответственно. Поскольку изменение химического потенциала влечёт за собой изменение концентрации, пропорциональное (при малых температурах) плотности состояний вблизи уровня Ферми $\rho(\mu)$, отсюда получаем $\langle \hat{n}_{\uparrow} - \hat{n}_{\downarrow} \rangle_{MF} = 2h^{\text{eff}} \rho(\mu)$. Таким образом, восприимчивость в ферромагнитном канале в приближении среднего поля выражается как

$$\chi^F \equiv \frac{\partial \langle \hat{n}_{\uparrow} - \hat{n}_{\downarrow} \rangle_{MF}}{\partial h} = \frac{2\rho(\mu)}{1 - \rho(\mu)U}. \quad (10)$$

При $\rho(\mu)U = 1$ восприимчивость расходится, что соответствует спонтанному возникновению ферромагнитной упорядоченности. Выражение (10) называется *критерием Стоунера*. В 1938 г. Э.К. Стоунер сформулировал условие, определяющее, будет ли материал с заданной зонной структурой ферромагнитным [73]. Как следует из условия Стоунера, ферромагнитными являются материалы с большой плотностью состояний на уровне

Ферми, что объясняет, почему переходные металлы с незаполненной d-оболочкой, такие как Fe, Ni и Co, ферромагнитные.

2.3. Метод функционала плотности

Важным примером развития идеи о сведении многочастичной задачи к одночастичной является *метод функционала плотности* (Density Functional Theory, DFT) — один из наиболее популярных на сегодня методов в квантовом материаловедении и квантовой химии [74, 75], теоретически точный и хорошо согласующийся с экспериментальными данными [76, 77].

В основе DFT лежит теорема Хоэнберга–Кона [78], утверждающая, что по известной плотности числа частиц в основном состоянии $n(\mathbf{r})$ можно однозначно определить волновую функцию основного состояния системы ψ_0 . Технически это даёт возможность представить любые величины, характеризующие систему, как функционалы плотности числа частиц. Далее В. Коном и Л.Д. Шэмом было показано, что пространственное распределение плотности системы (1) с кулоновским взаимодействием $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ может быть точно воспроизведено, если рассмотреть систему невзаимодействующих частиц, находящихся в потенциале

$$\hat{V}_s = v(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' + \hat{v}_{xc}, \quad (11)$$

где первое слагаемое в правой части, $v(\mathbf{r})$, представляет собой внешний потенциал, действующий на систему, второе — усреднённый потенциал составляющих систему электронов, а *обменно-корреляционная энергия* $\hat{v}_{xc}$ формально включает в себя все многочастичные эффекты. В соответствии с теоремой Хоэнберга–Кона $\hat{v}_{xc}$ однозначно определяется плотностью системы $n(\mathbf{r})$.

Важно подчеркнуть, что с математической точки зрения $\hat{v}_{xc}$ представляет собой неизвестный функционал плотности системы. Успех DFT связан с существованием хороших приближений для этой функциональной зависимости. Например, в *приближении локальной плотности* (Local Density Approximation, LDA) $\hat{v}_{xc} = v_{xc}(\mathbf{r})$ определяется только плотностью в заданной точке $\mathbf{r}$ (а не во всех точках системы, как должно быть в точной теории).

Практический расчёт с использованием метода функционала плотности состоит в итеративном решении уравнений Кона–Шэма — уравнения Шрёдингера для невзаимодействующих частиц в эффективном поле, связанном с их плотностью. На заданном шаге процедуры для эффективного потенциала $\hat{V}_s$ следует найти плотность системы невзаимодействующих фермионов в поле такого потенциала. Эта задача сводится к решению одночастичного уравнения Шрёдингера $\hat{H}_{KS}\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r})$ с гамильтонианом

$$\hat{H}_{KS} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}_s.$$

Затем исходя из найденной плотности $n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2$, где сумма берётся по занятым состояниям, следует построить новый эффективный потенциал и т.д., до тех пор пока не будет достигнута сходимость итераций.

Метод DFT, разработанный для гамильтонианов *ab initio*, может быть применён для построения модельных решёточных систем, в частности для нахождения пара-

метров t и U модели Хаббарда [79, 80]. Однако непосредственное применение DFT к описанию самой решётки Хаббарда требует соответствующей переформулировки теоремы Хоэнберга–Кона и уравнений Кона–Шэма, что было сделано в работе [81].

По построению исходной теории метод DFT предназначен для определения свойств основного или равновесного состояния. Собственные значения ε_i гамильтониана $\hat{H}_{KS}$, исходно введённые как вспомогательные величины, на практике часто используются для расчёта зонной структуры материалов, что в ряде случаев даёт хорошие результаты (см. рис. 2 в разделе 2.4). В дальнейшем нас будут интересовать одночастичные возбуждения термодинамически равновесных систем. Для их анализа мы будем использовать функцию Грина в представлении Мацубары [82, 83]:

$$G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = - \int_0^{1/T} \langle \hat{c}_{\mathbf{r}}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{r}'}^\dagger(0) \rangle \exp(i\nu\tau) d\tau,$$

где $\nu = (2j+1)\pi T$, j — целое число, $\hat{c}(\tau) = \exp(\tau\hat{H}) \times \hat{c} \exp(-\tau\hat{H})$. Невзаимодействующий ансамбль характеризуется функцией Грина

$$G_{0,\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \sum_j \frac{\psi_j^*(\mathbf{r}')\psi_j(\mathbf{r})}{i\nu - \varepsilon_j}, \quad (12)$$

где ψ_j , ε_j — одночастичные волновые функции и энергии, полученные в случае DFT в результате решения уравнений Кона–Шэма.

Если рассматриваемая система обладает трансляционной инвариантностью, в частности если она определена на простой решётке, то её функция Грина зависит только от разности пространственных аргументов $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ и естественно перейти к фурье-образу функции Грина $G_{\mathbf{v}\mathbf{k}}$. При этом решением уравнений Кона–Шэма являются плоские волны с законом дисперсии $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, а функция Грина в приближении DFT имеет вид

$$G_{0,\mathbf{v}\mathbf{k}} = \frac{1}{i\nu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (13)$$

Применение представления Мацубары требует дополнительных комментариев. Мы будем использовать его здесь и далее для единообразия изложения, поскольку для методов семейства DMFT (см. разделы 3 и 4) расчёты для равновесных систем фактически проводятся только в этом представлении. Однако реальный спектр электронных возбуждений определяется плотностью состояний $A(\omega) = -(1/\pi) \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} G_{\omega\mathbf{k}}$, где $G_{\omega\mathbf{k}}$ — функция Грина на реальных частотах. (Здесь и ниже знак суммирования по импульсам включает множитель $1/N$, где N — число узлов решётки, так что $\sum_{\mathbf{k}} 1 = 1$. Аналогично суммирование по мацубаровским частотам включает множитель T .) Функция $G_{\omega\mathbf{k}}$ может быть получена аналитическим продолжением $G_{\mathbf{v}\mathbf{k}}$; в выписанных формулах такому продолжению соответствует замена $i\nu \rightarrow \omega + i0$.

2.4. Метод GW

Вычисление электронного спектра в рамках DFT во многих случаях является недостаточным — эффекты взаимодействия приводят к перенормированию спектра возбуждений, что формально соответствует появлению собственной энергии $\Sigma_{\mathbf{v}\mathbf{k}}$, определяемой соотношением $G_{\mathbf{v}\mathbf{k}}^{-1} = G_{0,\mathbf{v}\mathbf{k}}^{-1} - \Sigma_{\mathbf{v}\mathbf{k}}$. Значительная часть работ по коррели-

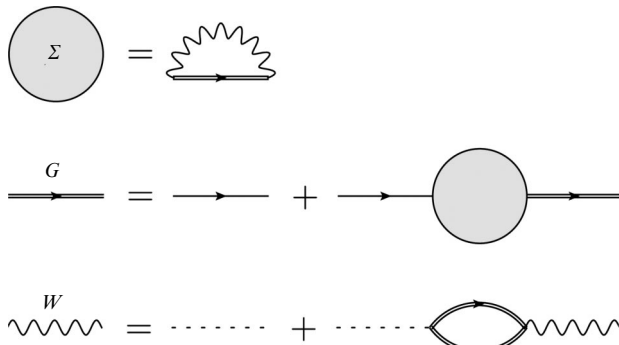


Рис. 1. Диаграммные блоки метода GW : собственная энергия Σ в приближении GW , уравнение Дайсона, связывающее функцию Грина G и собственную энергию, а также уравнение в приближении случайных фаз для экранированного взаимодействия W .

рованным системам посвящена именно расчёту перенормирования их электронного спектра.

Одним из возможных путей дальнейшего развития являются пертурбативные методы, стартующие с результата DFT как с нулевого приближения. В качестве примера этого направления рассмотрим *метод GW* . GW — диаграммный пертурбативный метод (рис. 1), в рамках которого собственно-энергетическая функция Σ раскладывается в ряд теории возмущений по экранированному кулоновскому взаимодействию W , при этом сохраняется только первый член разложения (для простоты изложения мы пишем уравнения для трансляционно-инвариантной системы):

$$\Sigma_{\mathbf{vk}} = - \sum_{\Omega \mathbf{q}} G_{\mathbf{v}-\Omega, \mathbf{k}-\mathbf{q}} W_{\Omega \mathbf{q}}, \quad (14)$$

где $W_{\Omega \mathbf{q}}$ — фурье-образ W . Заметим, что, в отличие от фурье-образа кулоновского взаимодействия $V_{\mathbf{q}}$, $W_{\Omega \mathbf{q}}$ зависит также от бозонных маубаровских частот Ω , определяя тем самым не только экранирование, но и запаздывание.

Для экранированного взаимодействия можно использовать приближение случайных фаз [84]:

$$W_{\Omega \mathbf{q}} = V_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{vk}} V_{\mathbf{q}} G_{\Omega-\mathbf{v}, \mathbf{q}-\mathbf{k}} G_{\mathbf{v}, \mathbf{k}} W_{\Omega \mathbf{q}}. \quad (15)$$

Приведённые выше выражения для Σ , G и W дают самосогласованную систему уравнений. Если исходной точкой является G_0 , взятая из расчётов методом теории функционала плотности, то во избежание двойного учёта эффектов взаимодействия из собственной энергии GW необходимо вычесть обменно-корреляционный потенциал, так что функция Грина примет вид

$$G_{\mathbf{vk}} = \frac{1}{G_{0, \mathbf{vk}}^{-1} + v_{\text{xc}} - \Sigma_{\mathbf{vk}}}, \quad (16)$$

где v_{xc} — обменно-корреляционная энергия, являющаяся константой в пространственно однородном случае.

На рисунке 2 представлено сравнение результатов расчётов для запрещённой зоны различных веществ, полученных в рамках DFT и GW . LDA даёт для многих материалов правильный порядок величины запрещённой зоны, но количественно систематически занижает её значение. Из рисунка видно, что приближение GW существенно увеличивает точность LDA. Однако метод

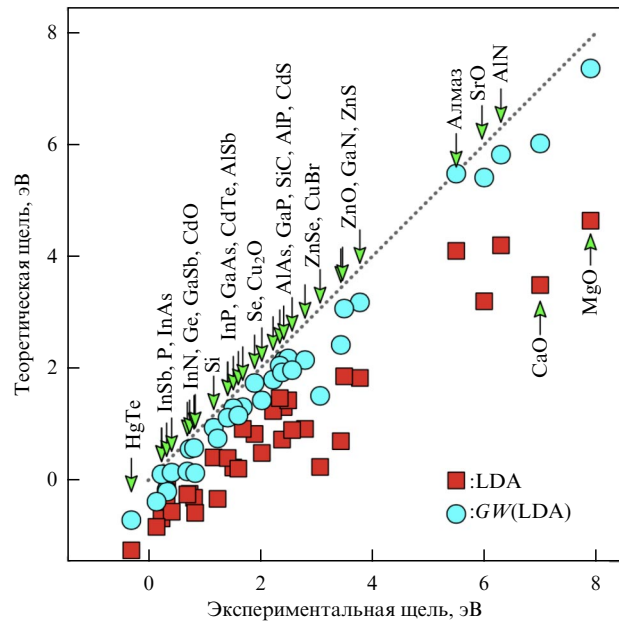


Рис. 2. Сравнение теоретических и экспериментальных значений ширины запрещённой зоны для полуметаллов (левая часть рисунка, отрицательная щель), полупроводников (средняя часть рисунка) и изоляторов (правая часть рисунка), полученных в рамках DFT (красные квадраты) и GW (голубые кружки) [89].

предсказывает нефизичные эффекты вблизи атомного предела, а также страдает от проблемы самоэкранирования [85, 86]. Для преодоления этих трудностей метод GW может быть, например, дополнен поправками к вершинным функциям, что отвечает учёту квантовых эффектов в обменно-корреляционной составляющей собственно-энергетической функции Σ [87, 88].

3. Учёт локальных корреляций

Метод GW , ограничивающийся только одной диаграммой для собственной энергии, неприменим для систем, в которых корреляции являются сильными, например для описания переходов Мотта. По-видимому, минимальное описание моттовской физики неизбежно должно опираться на явный учёт многочастичной физики, связанной с наличием хаббардовских членов в гамильтониане, как это сделано, например, в подходе Гупвиллера. Отметим также метод LDA + U [90], вводящий простую функциональную поправку к результату LDA, позволяющую учесть корреляции на статическом уровне. Метод LDA + U действительно оказался практически полезным при расчёте свойств соединений переходных и редкоземельных металлов с умеренными корреляциями.

Большим прорывом в данном направлении стала работа [91], в которой на основе среднеполевого приближения была разработана обобщённая версия метода LDA + U в пределе большого координационного числа, получившая название *самосогласованного приближения локальной примеси* (Local Impurity Self Consistent Approximation, LISA). Позднее за этим методом закрепилось название *динамической теории среднего поля* (DMFT), подчёркивающее возможность в точности учитывать локальные корреляции в рамках данного подхода.

Вначале рассмотрим идеологически родственный DMFT метод, появившийся несколько ранее, — прибли-

жение когерентного потенциала в теории неоднородных систем.

3.1. Модель Андерсона.

Приближение когерентного потенциала

Модель Андерсона в общем виде описывает класс систем с так называемым диагональным беспорядком. Гамильтониан такой системы может быть выражен в виде

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \sum_i v_i \hat{n}_i, \quad (17)$$

где v_i — случайный потенциал на i -м узле с конкретными значениями, отвечающими некоторому распределению вероятности. Например, для модели бинарного сплава замещения, решётка которого состоит из узлов двух типов, А и В, потенциал принимает одно из двух случайных значений: v^A и v^B . Корреляции v_i на разных узлах отсутствуют. Поставим задачу о поиске функции Грина такой системы, усреднённой по реализациям случайного потенциала.

Удобным подходом к решению модели Андерсона является *приближение когерентного потенциала* (Coherent Potential Approximation, CPA) [92]. Идея CPA заключается в том, чтобы рассмотреть вспомогательную систему, представляющую собой набор изолированных *примесных задач* — не связанных между собой узлов, каждый из которых испытывает действие случайного потенциала v_i и эффективной гибридизации Δ . Последняя впоследствии будет определена так, чтобы наилучшим образом описать влияние на заданный узел, оказываемое "в среднем" его соседями на исходной решётке (17). Физически важно, что такое влияние является запаздывающим — отклик решётки определяется состоянием узла не только в текущий, но и в другие моменты времени. Это соответствует гибридизации, зависящей от частоты, $\Delta = \Delta_v$. Следовательно, примесная задача оказывается негамильтоновой и описывается действием, представленным в терминах грассмановых [84, 93] переменных $c_v^\dagger, c_v$:

$$\mathcal{S}[c_j^\dagger, c_j] = \sum_v c_v^\dagger (-iv + v_j + \Delta_v) c_v. \quad (18)$$

Запишем функцию Грина примеси, усреднённую по реализациям v :

$$\mathcal{G}_v = \left\langle \frac{1}{iv - v_j - \Delta_v} \right\rangle_v \equiv \sum_v \frac{p(v)}{iv - v - \Delta_v}, \quad (19)$$

где $p(v)$ задаёт распределение вероятностей для случайных примесей. Практическое вычисление $\mathcal{G}_v$ весьма просто — например, для бинарного сплава сумма в выражении (19) содержит всего два слагаемых. Собственная энергия примеси

$$\Sigma_v = iv - \Delta_v - (\mathcal{G}_v)^{-1} \quad (20)$$

определяет, как беспорядок "в среднем" меняет функцию Грина примесной задачи. Основное предположение метода CPA состоит в том, что для исходной задачи (17) беспорядок приводит в среднем к такому же эффекту, т.е. решёточная функция Грина выражается как

$$G_{\mathbf{vk}} = \frac{1}{iv - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_v}. \quad (21)$$

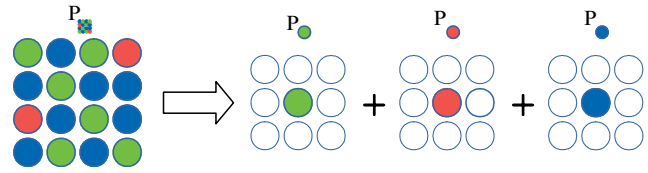


Рис. 3. В рамках метода CPA система с беспорядком заменяется ансамблем задач для каждого типа примеси с весами, соответствующими тому, как часто такая примесь встречается в сплаве.

На приведённую систему уравнений дополнительно накладывается условие того, чтобы примесная задача наилучшим образом моделировала свойства узлов решётки. С этой целью потребуем, чтобы функции Грина исходной и вспомогательной задач локально совпадали: $\mathcal{G}_v = \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{vk}}$. Последнее равенство представляет собой условие самосогласования метода — гибридизация Δ_v должна быть подобрана так, чтобы оно выполнялось на каждой из маупбаровских частот.

Представленный метод успешно предсказывает оптические и транспортные свойства сплавов [92]. Важно отметить среднеполевую природу метода — фактически для каждого из узлов окружающая среда с беспорядком заменяется некоторым усреднённым, описываемым гибридизацией Δ_v (рис. 3). Соответственно CPA не учитывает нелокальные корреляции, затрудняя тем самым его использование в случаях, когда окружение каждого узла флуктуирует сильно — в системах с пониженной размерностью, а также в андерсоновских диэлектриках [94, 95]. Кроме того, приближение когерентного потенциала не воспроизводит поправки к проводимости при низких температурах, связанные со слабой локализацией, а также существуют трудности с применением метода CPA для систем с недиагональным беспорядком [92].

3.2. Динамическая теория среднего поля

DMFT является одним из важнейших методов описания коррелированных систем, позволяющим точно описывать локальные флуктуации на узле. Рассмотрим вначале систему самосогласованных уравнений DMFT на примере модели Хаббарда (2), гамильтониан которой нам будет удобно представить в виде

$$\hat{H}_H = \sum_j \hat{H}_j^{\text{at}} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (22)$$

где $\hat{H}_j^{\text{at}} = U \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} - \mu(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow})$ — гамильтониан изолированного хаббардовского атома.

Сначала введём основные уравнения DMFT без формального обоснования, как в разделе 3.1 для CPA, а затем покажем, как эти уравнения могут быть получены с использованием вариационного принципа. Так же как и при выводе уравнений CPA, введём вспомогательную систему, представляющую собой набор примесных задач, каждая из которых соответствует узлу решётки с эффективной гибридизацией Δ_v — так называемой *примесной модели Андерсона* (Anderson Impurity Model, AIM). Действие примесной задачи имеет вид

$$\mathcal{S}[c_j^\dagger, c_j] = \mathcal{S}^{\text{at}}[c_j^\dagger, c_j] + \sum_v c_{vj\sigma}^\dagger \Delta_v c_{vj\sigma}, \quad (23)$$

где $S^{\text{at}}[c_j^\dagger, c_j]$ — действие хаббардовского атома, соответствующее гамильтониану $\hat{H}_j^{\text{at}}$. Для простоты записи формул мы предполагаем, что симметрия системы не нарушена, т.е. считаем гибридизацию одинаковой для всех узлов и не зависящей от спина.

Теперь следует найти функцию Грина $\mathcal{G}$ примесной задачи. Если в случае CPA функция Грина может быть найдена аналитически, то для гибридизации общего вида такая задача аналитического решения не имеет. Однако существуют алгоритмы и многочисленные программные реализации, так называемые *солверы* (AIM solvers), позволяющие достаточно эффективно решать примесную задачу численно [96–100]. Отметим ещё одно различие CPA и DMFT. Как следует из (19), в случае CPA изменение гибридизации на одной из частот приводит к изменению функции Грина примесной задачи только на той же самой частоте, тогда как в случае DMFT $\mathcal{G}_v$ представляет собой функционал гибридизации Δ_v , определённый для полной совокупности частот.

Если известна функция Грина примесной задачи, то несложно найти собственную энергию $\Sigma_v = i\nu + \mu - \Delta_v - \mathcal{G}_v^{-1}$. Подставив Σ_v в качестве собственной энергии решётки, мы вновь получим выражение для решёточной функции Грина DMFT, совпадающее с (21). Функцию Грина можно также выразить в виде

$$G_{vk} = \frac{1}{\mathcal{G}_v^{-1} + \Delta_v - \varepsilon_k}. \quad (24)$$

Уравнение (24) следует дополнить условием самосоглашения

$$\mathcal{G}_v = \sum_{\mathbf{k}} G_{vk}. \quad (25)$$

При практической реализации метода организуют итеративную процедуру. На первом шаге следует сделать какое-либо предположение о гибридизационной функции, например положить $\Delta_v = 0$. На n -й итерации гибридизация меняется по правилу

$$\Delta_v^{(n+1)} = \Delta_v^{(n)} + \xi \left(\sum_{\mathbf{k}} G_{vk}^{(n)} \right)^{-1} - \xi (\mathcal{G}_v^{(n)})^{-1},$$

где функции Грина решётки и примеси получены описанным выше способом для гибридизации $\Delta_v^{(n)}$, а $\xi \sim 1$ — параметр численной процедуры, который требуется подобрать для обеспечения наилучшей сходимости итераций. Как легко увидеть, неподвижная точка такого преобразования соответствует выполнению условия (25). Можно также показать, что в предельном случае системы без взаимодействия описанная процедура с $\xi = 1$ приводит к решению уже после первой итерации.

Здесь необходимо вернуться к вопросу об использовании мацубаровского представления. Как и описанные выше методы, уравнения DMFT могут быть сформулированы с использованием как мацубаровских, так и реальных частот. Однако численные схемы для решения примесной задачи Андерсона оказываются гораздо проще реализовать для представления Мацубары (обсуждение источников трудностей, связанных с так называемой проблемой знака, и современного прогресса в их разрешении можно найти в [101, 102]), поэтому на практике расчёты методом DMFT для равновесных систем всегда проводят в мацубаровском представлении. Существуют

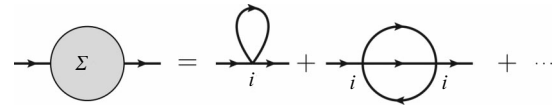


Рис. 4. Собственная энергия в DMFT является суммой всех локальных фейнмановских диаграмм.

методы, позволяющие аналитически продолжить численные результаты на ось реальных частот [103, 104] (несмотря на то что такая задача является плохо определённой) и тем самым построить спектр плотности состояний системы.

С точки зрения диаграмматики DMFT можно рассматривать как приближение, состоящее в том, что рассматривается не вся решётка в диаграммных рядах, а только один узел. Соответственно при вычислении собственной энергии учитывается полная совокупность диаграмм, но для каждой из них вместо суммирования по всем положениям каждого из внутренних узлов берётся только одно из них (рис. 4). Если заметить, что вероятность перескока с узла на узел (нелокальный эффект) убывает обратно пропорционально координационному числу Z , то становится ясно: в пределе большого Z собственно-энергетическая функция чисто локальна. Иными словами, DMFT — точный метод в пределе $Z \rightarrow \infty$.

Покажем теперь, как уравнения DMFT могут быть получены с использованием вариационного метода GBF. Действие, отвечающее гамильтониану модели Хаббарда, можно представить в виде

$$S[c^\dagger, c] = \sum_j S[c_j^\dagger, c_j] + \sum_{v\mathbf{k}\sigma} c_{v\mathbf{k}\sigma}^\dagger (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \Delta_v) c_{v\mathbf{k}\sigma}, \quad (26)$$

где мы учли, что $\sum_j c_{vj\sigma}^\dagger c_{vj\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} c_{v\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{v\mathbf{k}\sigma}$; действие примесной модели $S[c_j^\dagger, c_j]$ определено формулой (23). Рассмотрим гауссово приближение для $S[c_j^\dagger, c_j]$, точно воспроизводящее свободную энергию

$$\mathcal{F} = -T \ln \int \exp(-S[c_j^\dagger, c_j]) \mathcal{D}[c_j^\dagger, c_j]$$

и функцию Грина примесной задачи:

$$\tilde{S}[c_j^\dagger, c_j] = \frac{\mathcal{F}}{T} - \sum_{v\sigma} (c_{vj\sigma}^\dagger \mathcal{G}_v^{-1} c_{vj\sigma} - \ln \mathcal{G}_v). \quad (27)$$

Приближение DMFT можно понимать как результат замены $S[c_j^\dagger, c_j]$ в решёточном действии (26) приближённым выражением (27):

$$\tilde{S}[c^\dagger, c] = \frac{N\mathcal{F}}{T} - \sum_{v\mathbf{k}\sigma} [(\mathcal{G}_v^{-1} + \Delta_v - \varepsilon_{\mathbf{k}}) c_{v\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{v\mathbf{k}\sigma} - \ln \mathcal{G}_v]. \quad (28)$$

Как видно, приближению (28) действительно соответствует функция Грина (24). Отсюда можно также получить DMFT-приближение для свободной энергии системы. После подстановки $\tilde{S}$ интегрирование даёт

$$F = N\mathcal{F} + T \sum_{v\mathbf{k}\sigma} \ln \frac{G_{v\mathbf{k}}}{\mathcal{G}_v}. \quad (29)$$

В тензорной нотации второй член в правой части (29) можно записать как $-T \ln [1 + \mathcal{G}(\Delta - \varepsilon)]$.

В соответствии с вариационным принципом GBF потребуем неизменности F при малых изменениях Δ . Необходимо вычислять полную вариацию, т.е. учитывать, что изменение гибридизации $\delta\Delta$ влечёт за собой изменение собственной энергии $\delta\Sigma$. Расчёт приводит к уравнению

$$\sum_{\mathbf{k}} (G_{\mathbf{vk}} - G_{\mathbf{v}}) \delta\Sigma_{\mathbf{v}} = 0. \quad (30)$$

Поскольку вариация $\delta\Sigma$ может быть произвольной, из уравнения (30) следует условие самосогласования (25).

Являясь формально точным методом в пределе большого координационного числа, DMFT успешно применяется для описания многих реальных систем. В частности, этот метод хорошо описывает упомянутые выше моттовские переходы, обусловленные кулоновским отталкиванием электронов на узлах решётки [105, 106]. Широкие возможности для решения физических проблем открывают и всевозможные гибридные схемы, например $GW + (E)DMFT$ [107–109].

Наконец, заметим, что метод DMFT легко обобщается для случая симметрии, нарушенной спонтанно или под действием внешних полей. В этом случае гибридизация остаётся локальной в пространстве, но оказывается зависящей от спина и номера узла решётки, а кроме того, может содержать аномальные компоненты, в связи с чем формулы тоже целесообразно записывать в тензорном виде. В частности, функция Грина тогда принимает вид

$$G = \frac{1}{\mathcal{G}^{-1} + \Delta - \varepsilon}, \quad (31)$$

где $\mathcal{G}$ и Δ — тензоры, диагональные в (r, v) -представлении, но имеющие недиагональные спиновые компоненты. Тензор ε в указанном представлении, напротив, диагонален по спиновым и частотным, но не по координатным индексам. Условие самосогласования (25) тогда означает, что диагональные компоненты функции Грина решётки в координатном представлении совпадают с решением примесной задачи на каждом из узлов.

Стоит упомянуть об одной из проблем DMFT, характерной для одноузловой примесной задачи. Из теоремы Латтинжера следует: если собственная энергия ферми-жидкости локальна, то её плотность состояний на уровне Ферми не зависит от величины взаимодействия. Такой пиннинг плотности состояний на уровне Ферми приводит к тому, что для металлических систем, близких к переходу Мотта, DMFT предсказывает характерный для задачи Кондо пик в центре формирующейся моттовской запрещённой зоны (рис. 5), существующий до тех пор, пока система остаётся ферми-жидкостью. Данный пик, являющийся артефактом метода, впрочем, не создаёт дополнительных трудностей в предсказывании свойств реальных материалов [110]. Этот артефакт исчезает при использовании многоорбитальных моделей или кластерных методов, которые описаны в разделе 3.3.

К успехам DMFT относится, в частности, описание фазового перехода оксида ванадия V_2O_3 при допировании его хромом из моттовского изолятора в металл [112]. Из экспериментальных данных известно [113], что V_2O_3 является изолятором. Допирование V_2O_3 хромом увеличивает подвижность электронов, что приводит к уменьшению эффективного кулоновского отталкивания между

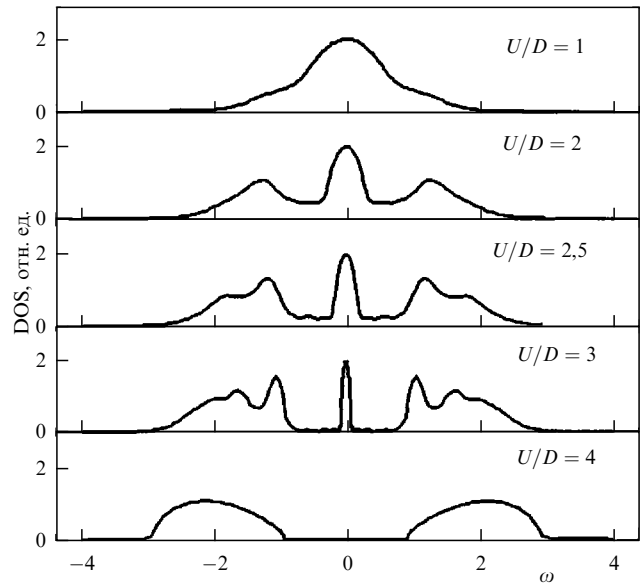


Рис. 5. Спектральная плотность (density of states, DOS) как функция реальной частоты ω при разных значениях отношения взаимодействия к ширине зоны U/D , вычисленная с помощью DMFT. Четыре верхние кривые соответствуют случаю металла, самая нижняя кривая ($U/D = 4$) соответствует изолятору. Для промежуточных значений U хорошо заметен пик при $\omega = 0$, свойственный одноузловой DMFT [111].

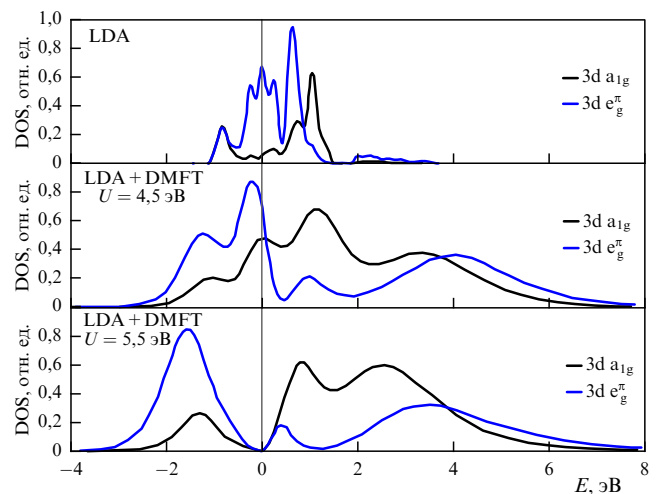


Рис. 6. Спектральная плотность как функция энергии E , рассчитанная с помощью методов LDA и LDA + DMFT при двух значениях хаббардовского взаимодействия, $U = 4,5$ и $5,5$ эВ, для моттовского изолятора V_2O_3 . $E = 0$ соответствует энергии Ферми, чёрная и синяя кривые относятся к орбитальным состояниям a_{1g} и e_g^π соответственно. LDA ошибочно предсказывает конечную плотность состояний на уровне Ферми (металл), в то время как LDA + DMFT при достаточно большом $U = 5,5$ эВ предсказывает щель в плотности состояний (изолятор) [112].

ними. DFT неверно предсказывает металлическое состояние в случае недопированного V_2O_3 . На рисунке 6 изображены плотности состояний для V_2O_3 , вычисленные с помощью LDA, а также метода LDA + DMFT. Метод функционала плотности даёт ненулевую плотность состояний на уровне Ферми и неверно предсказывает, что недопированный оксид ванадия должен быть металлом. Однако комбинация теории функционала плотности с динамической теорией среднего поля

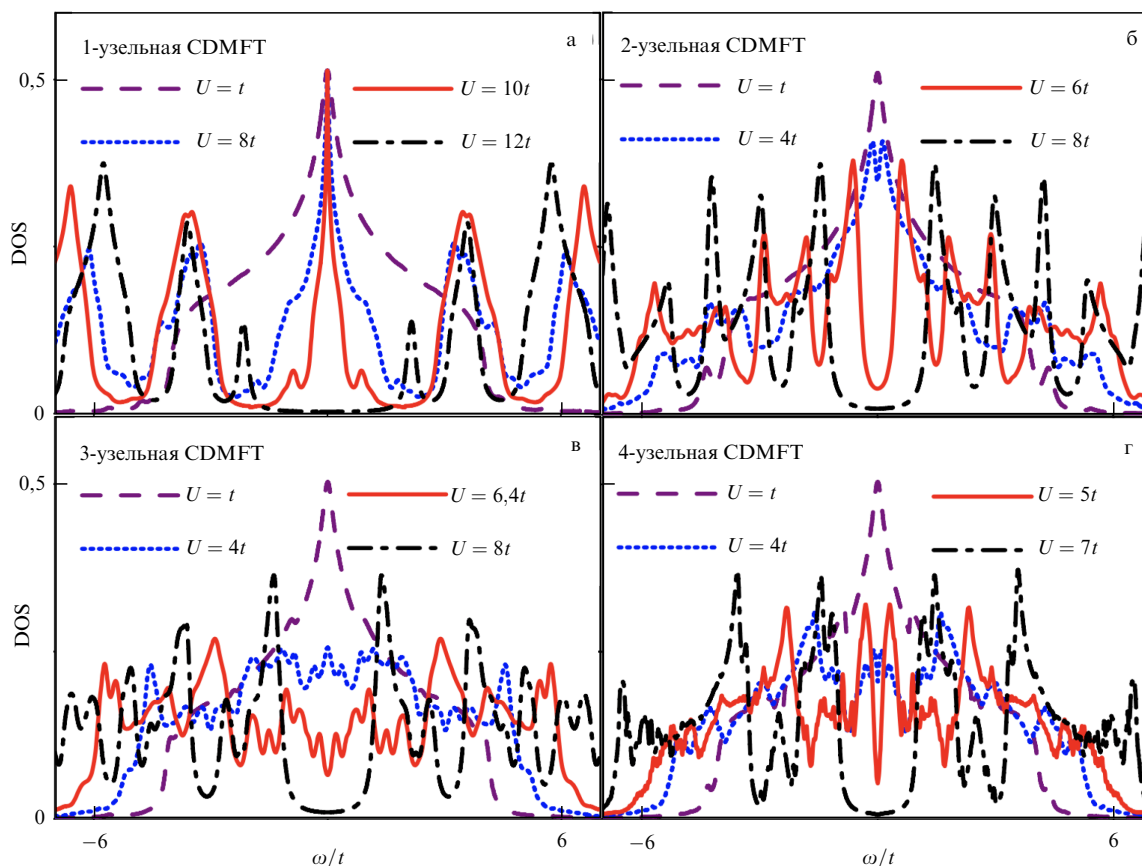


Рис. 7. Плотность состояний (DOS) как функция реальной частоты ω , вычисленная с помощью CDMFT для кластеров размерами от 1 до 4 узлов при разных величинах взаимодействия U . При увеличении размера кластера щель в плотности состояний возникает при всё более низких U , не соответствующих состоянию моттовского изолятора, что может свидетельствовать о существовании псевдощели в двумерной модели Хаббарда [120].

(LDA + DMFT) позволяет увидеть при увеличении хаббардовского взаимодействия U переход из металла в изолятор Мотта. Обратим также внимание, что на рис. 6 для метода LDA + DMFT характерная ширина спектральной функции больше, чем для метода LDA. Последнее связано с перенормировкой эффективной массы плотности состояний, следующей из частотной зависимости собственной энергии Σ_{ω} . Из недавних достижений DMFT стоит отметить пример применения метода к рассмотрению двухслойных скрученных структур, в частности WSe_2 и $\text{MoTe}_2/\text{WSe}_2$, магнитная и металл-изоляционная фазы которых успешно описываются в рамках данного подхода [114].

3.3. Кластерные обобщения динамической теории среднего поля

В основу кластерных методов положена идея аппроксимировать полную решётку с большим числом степеней свободы небольшим кластером, помещённым в эффективное окружение, моделирующее оставшиеся степени свободы [115]. Схема кластерной DMFT во многом схожа с одночастичной схемой. Вначале определяются степени свободы кластера и находится его точная функция Грина и собственно-энергетическая функция. Затем формулируется условие самосогласованности. На завершающем этапе определяется связь между кластерной и решёточной собственно-энергетическими функциями [116].

Основная методическая проблема кластерных методов заключается в том, что выбор эффективной гибридизации и соответственно связи решёточной и кластерной функций Грина не является однозначным. Известны различные кластерные схемы. Ограничимся кратким сравнением наиболее распространённых подходов; детальный анализ разных кластерных методов и сравнение с результатами других известных подходов можно найти, например, в обзорах [115, 117].

Простейшей по формулировке из кластерных схем является так называемая *ячейчатая DMFT* (Cellular DMFT, CDMFT). При подходе CDMFT изначальная система представляется как сверхрешётка, каждая ячейка которой содержит несколько узлов решётки изначальной системы. Например, в простейшем варианте для модели Хаббарда проводится разделение на ячейки размером 2×2 атома, после чего можно использовать уравнения одноузельной DMFT, рассматривая каждую ячейку сверхрешётки как многоорбитальную систему, гибридованную самосогласованным полем. По построению, CDMFT учитывает межузельные корреляции в пределах каждой из ячеек сверхрешётки. Благодаря такому, хотя и частичному, включению нелокальных эффектов CDMFT позволяет получить ряд результатов, отсутствующих в одноузельной схеме [118, 119]. В частности, в отличие от DMFT, CDMFT показывает формирование псевдощели до моттовского перехода [120, 121] (рис. 7). В одной из возможных модификаций [122] CDMFT с кластером

2×2 предсказывает d-волновую сверхпроводимость в допированной модели Хаббарда.

Однако CDMFT страдает от ряда недостатков, связанных с искусственным нарушением периодичности при разбиении исходной системы на кластеры. В частности, за исключением минимальной ячейки 2×2 , узлы кластера CDMFT оказываются неэквивалентными — одна их часть относится к границе кластера, а другая расположена внутри него. Эта проблема решена в методе *динамического кластерного приближения* (Dynamical Cluster Approximation, DCA) [123–125], где вводятся периодические граничные условия для узлов кластера, так что волновой вектор кластера пробегает значения из дискретного ряда $\mathbf{K}_{x,y} = 2\pi j_{x,y}/L_{x,y}$, $0 \leq j_{x,y} < L_{x,y}$, при общем размере кластера $N_c = L_x \times L_y$. Для исходной решётки волновой вектор может быть представлен как $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}$, где $|\tilde{\mathbf{k}}_{x,y}| < \pi/L_{x,y}$. Собственная энергия для исходной решёточной задачи предполагается зависящей только от $\mathbf{K}$, $\Sigma_{\mathbf{v},\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}}} = \Sigma_{\mathbf{v},\mathbf{K}}$, и совпадающей с собственной энергией кластера. Таким образом, функция Грина полной задачи имеет вид

$$G_{\mathbf{v},\mathbf{k}} = G_{\mathbf{v},\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}}} = \frac{1}{i\nu - \varepsilon_{\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}}} - \Sigma_{\mathbf{v},\mathbf{K}}} \quad (32)$$

В связи с этим говорят, что DCA приводит к огрублению — "крупнозернистости" (coarse-graining) — пространства волновых векторов.

Имея некоторую предполагаемую $\Sigma_{\mathbf{v},\mathbf{K}}$ и, следовательно, $G_{\mathbf{v},\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}}}$, можно построить огрублённую функцию Грина

$$\tilde{G}_{\mathbf{v},\mathbf{K}} = \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} G_{\mathbf{v},\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}}}.$$

Тогда примесная задача характеризуется гибридизацией $\Delta_{\mathbf{v},\mathbf{K}} = i\nu - \varepsilon_{\mathbf{K}} - \Sigma_{\mathbf{v},\mathbf{K}} - \tilde{G}_{\mathbf{v},\mathbf{K}}^{-1}$ и локальным взаимодействием U . Расчёт функции Грина $G_{\mathbf{v},\mathbf{K}}^c$ с помощью кластерного солвера позволяет найти следующую итерацию собственной энергии кластера $\Sigma_{\mathbf{v},\mathbf{K}}^c$, что замыкает цепочку самосогласованных уравнений DCA.

С увеличением размера кластера метод DCA обеспечивает более быструю сходимость результатов, чем CDMFT: поправки в DCA убывают с ростом размера кластера квадратично, в то время как в CDMFT — линейно [126]. Заметим, однако, что даже для ресурсоёмких расчётов с кластером 4×4 достижение практической сходимости результата с увеличением размера кластера в DCA нельзя считать установленным. Тем не менее к важным достоинствам метода DCA относится то, что вычисления с его помощью позволяют уверенно получить сверхпроводимость и псевдощель в двумерной модели Хаббарда [124, 125].

Дальнейший поиск "наилучшего" кластерного метода привёл к появлению схемы *вариационного кластерного приближения* (Variational Cluster Approach, VCA) [127–130]. В методе VCA различные кластерные теории рассматриваются с точки зрения порождающих их функционалов Латтинжера–Уорда. Оптимальная кластерная схема соответствует минимизации этого функционала. На рисунке 8 приведён пример расчёта с помощью метода VCA антиферромагнитного и сверхпроводящего параметров порядка [130] для двумерной модели Хаббарда.

Говоря о недостатках кластерных методов, следует в первую очередь отметить большую вычислительную

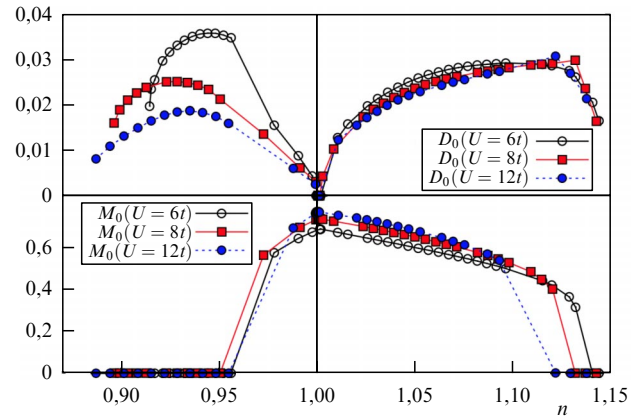


Рис. 8. Зависимости параметров порядка для d-волновой сверхпроводимости (D_0) и антиферромагнетизма (M_0) при нулевой температуре от электронной плотности n для кластеров 2×4 при $U = 6t$, $8t$ и $12t$, вычисленные с помощью VCA [130].

сложность, резко возрастающую с увеличением размера кластера. Кроме того, в любом случае кластерные методы не могут описывать физику, связанную с существованием длинноволновых коллективных флуктуаций на масштабах, превышающих несколько постоянных решётки. Для целого ряда многочастичных систем, в том числе планарных и слоистых (низкоразмерных), ведущие коллективные моды оказываются сильно делокализованными, а их флуктуации могут происходить в широком диапазоне амплитуд. В подобных случаях учёта только локальных флуктуаций на масштабах кластера оказывается недостаточно и необходимо дальнейшее развитие методов. Выход за пределы DMFT может осуществляться в различных направлениях. В последнее время значительное внимание было уделено развитию семейства диаграммных методов, построенных над результатом одноузельной схемы DMFT [131]. В разделе 4 даётся обзор основных подходов из этого семейства.

4. Методы пост-DMFT

4.1. Учёт нелокальных корреляций с помощью диаграммных методов

В контексте построения теорий пост-DMFT диаграммы включают в себя сильно перенормированные вершинные функции, описывающие локальную физику, и линии — нелокальные эффекты. Различные методы этого семейства отличаются друг от друга, как правило, способом перенормирования вершинных функций и/или выбором сохраняемых типов диаграмм. Такой подход, к сожалению, обладает рядом недостатков, среди которых не последнюю роль играет быстро растущая сложность практических вычислений при введении новых членов разложения, важных для учёта нелокальных корреляций.

В разделах 4.1.1–4.1.3 рассмотрим несколько диаграммных методов. Начнём с описания формализма дуальных переменных как иллюстрации общего подхода к построению пертурбативных диаграммных теорий, а затем перейдём к его конкретным реализациям.

4.1.1. Методы дуальных переменных и динамическое вершинное приближение. Рассмотрим снова хаббардовское действие, выраженное формулой (26). Над каждым

из членов $\sum_{\mathbf{v}\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{v}\mathbf{k}\sigma}^\dagger (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{v}}) c_{\mathbf{v}\mathbf{k}\sigma}$ в выражении для статистической суммы $\mathcal{Z} = \int \exp(-S) \mathcal{D}[c^\dagger, c]$ такой системы можно произвести преобразование Хаббарда–Стратоновича [132, 133]:

$$\exp[-c^\dagger(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{v}})c] = \mathcal{G}_{\mathbf{v}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{v}}) \times \\ \times \int \exp\left\{-[\mathcal{G}_{\mathbf{v}}^{-1}(f^\dagger c + c^\dagger f) + \mathcal{G}_{\mathbf{v}}^{-2}(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{v}})^{-1}f^\dagger f]\right\} \mathcal{D}[f^\dagger, f], \quad (33)$$

где c и $c^\dagger$ — гассмановы переменные, соответствующие заданной моде $(\mathbf{v}, \mathbf{k}, \sigma)$, а f и $f^\dagger$ — дуальные гассмановы переменные (Dual Fermions, DF) [134]. После такого преобразования в выражении для статистической суммы оказывается возможным провести формальное интегрирование по исходным переменным $c^\dagger, c$, что приводит к формуле

$$\mathcal{Z} = Z_0 \int \exp\left\{-\sum_{\mathbf{v}\mathbf{k}\sigma} (\mathcal{G}_{\mathbf{v}} - (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{v}})^{-1}) \mathcal{G}_{\mathbf{v}}^{-2} f_{\mathbf{v}\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{v}\mathbf{k}\sigma} - \sum_j V[f_j^\dagger, f_j]\right\} \mathcal{D}[f^\dagger, f], \quad (34)$$

где Z_0 — возникающий из преобразования Хаббарда–Стратоновича множитель, а для дуального потенциала $V[f_j^\dagger, f_j]$ известны коэффициенты разложения в ряд Тейлора: они представляют собой полные вершинные функции примесной задачи. В частности, в главном порядке

$$V[f_j^\dagger, f_j] \approx - \sum_{\mathbf{v}\mathbf{v}'\Omega\sigma\sigma'} \gamma_{\mathbf{v}\mathbf{v}'\Omega\sigma\sigma'}^{(2)} f_{\mathbf{v}\mathbf{v}'\Omega, \sigma\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{v}\mathbf{v}'\Omega, i, \sigma} f_{\mathbf{v}'\Omega, i, \sigma'} f_{\mathbf{v}'\Omega, \sigma'}.$$

Здесь $\gamma^{(2)}$ — полная двухчастичная вершинная функция примесной задачи Андерсона:

$$\gamma_{\mathbf{v}\mathbf{v}'\Omega}^{(2)} = \mathcal{G}_{\mathbf{v}}^{-1} \mathcal{G}_{\mathbf{v}'+\Omega}^{-1} \mathcal{G}_{\mathbf{v}}^{-1} \mathcal{G}_{\mathbf{v}'+\Omega}^{(2)} - T^{-1} \mathcal{G}_{\mathbf{v}}^{-1} \mathcal{G}_{\mathbf{v}'}^{-1} \delta_{\Omega 0} + \\ + T^{-1} \mathcal{G}_{\mathbf{v}}^{-1} \mathcal{G}_{\mathbf{v}'+\Omega}^{-1} \delta_{\mathbf{v}\mathbf{v}'}, \quad (35)$$

где $\mathcal{G}_{\mathbf{v}\mathbf{v}'\Omega}^{(2)} = \langle c_{\mathbf{v}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{v}'+\Omega, \sigma} c_{\mathbf{v}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{v}\sigma'} \rangle$ — двухчастичная функция Грина [83] в примесной задаче Андерсона, $\langle \dots \rangle = \mathcal{Z}^{-1} \int \dots \exp(-S) \mathcal{D}[c^\dagger, c]$ — усреднение по примесной задаче, $\delta_{\mathbf{v}\mathbf{v}'}$ — символ Кронекера.

Преимущество перехода к дуальным фермионам состоит в том, что соответствующим выбором гибридизации Δ можно учесть часть корреляций в процедуре перехода к новым переменным и таким образом существенно подавить корреляции в дуальной системе. Это даёт основание конструировать диаграммное разложение по степеням $V[f_j^\dagger, f_j]$ вокруг локальных теорий, ожидая, что такое разложение будет обладать хорошими свойствами сходимости. Например, если выбрать в качестве Δ гибридизацию DMFT, то нулевой порядок получившейся теории воспроизводит DMFT, поправка первого порядка обращается в нуль, а поправка второго порядка позволяет воспроизвести значимые эффекты физики ВТСП-купратов, отсутствующие на уровне одноузельного DMFT: формирование арок и пиннинг сингулярности ван Хофа на поверхности Ферми [135].

По аналогии с методом DF можно построить процедуру перехода к дуальным бозонам (Dual Bosons, DB) [136]. В случае DB диаграммное разложение дуальной системы будет производиться вокруг *обобщённой ди-*

намической теории среднего поля (Extended DMFT, EDMFT) [111]. Этот подход хорош для описания систем с выраженными коллективными (бозонными) модами. Надо, однако, принимать во внимание *неоднозначность Фирца*, характерную для всех бозонных методов такого рода: конечный результат расчётов сильно зависит от конкретного способа разбиения фермион-фермионного взаимодействия по каналам [137, 138].

Другим возможным обобщением метода DMFT является *динамическое вершинное приближение* (Dynamical Vertex Approximation, ДГА) [139]. Приближение ДГА основано на предположении о локальности полной неприводимой двухчастичной вершинной функции в двумерной модели Хаббарда, что подтверждается данными кластерных вычислений [140]. Благодаря такому подходу можно использовать примесную задачу Андерсона для вычисления локальных вершинных функций, которые затем применяются для вычисления одночастичных и двухчастичных функций Грина полной задачи с помощью паркетных уравнений или лестничных диаграмм (см. раздел 4.1.3). Вся процедура проводится в полной аналогии с DMFT, но на двухчастичном уровне: условие самосогласования состоит в равенстве локальной части полностью неприводимой вершинной функции модели Хаббарда и полностью неприводимой вершинной функции примесной задачи. Набор диаграмм, генерируемых ДГА, довольно близок к ряду теории возмущений дуальных фермионов, хотя существуют и определённые расхождения [141].

Отметим также ряд методов, в которых процедура самосогласования проводится для одночастичных функций Грина. Так, приближение DMFT + $\Sigma_{\mathbf{k}}$ [142, 143] вводит в самосогласованные уравнения DMFT характерный пространственный масштаб ξ , связанный с нелокальными флуктуациями. В свою очередь метод DMFT + FLEX [144], включающий петлевые и лестничные диаграммы, может быть интерпретирован как упрощённый вариант описанного в разделе 4.1.3 метода паркетных уравнений, в том смысле, что DMFT + FLEX позволяет одновременно учитывать флуктуации в различных каналах.

Одним из главных достоинств перечисленных диаграммных методов является принципиальная возможность одновременного учёта локальных и нелокальных эффектов. Однако практическая применимость этих методов, к сожалению, сильно ограничена из-за высоких вычислительных затрат при реализации данных схем. Например, диаграммные ряды методов DF, DB, ДГА включают в себя локальные четырёхточечные вершины, что означает необходимость вычисления объекта с четырьмя внешними частотными индексами, а в случае многоорбитальных систем — ещё и орбитальными.

4.1.2. Методы TRILEX и D-TRILEX. В 2015 г. была сделана попытка преодолеть ограничения на длину нелокальных корреляций, не перегружая метод с точки зрения вычислительных затрат. В работах [145, 146] была предложена диаграммная вычислительная схема *TRILEX* (TRiply-Irreducible Local EXpansion), основанная на самосогласованном приближении вершинной функции Λ , описывающей фермион-бозонное взаимодействие.

Первым шагом в схеме построения TRILEX является разделение члена со взаимодействием на два канала,

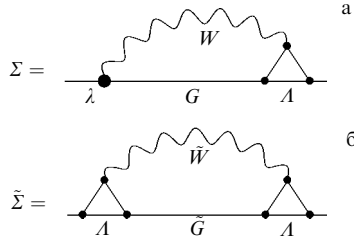


Рис. 9. Диаграмма нелокальной собственно-энергетической функции методов TRILEX (а) и D-TRILEX (б). $G, W (\tilde{G}, \tilde{W})$ — фермионный и бозонный пропагаторы в обычном (дуальном) пространстве.

спиновый и зарядовый, с помощью преобразования Хаббарда–Стратоновича. Введённые таким образом вспомогательные бозонные поля взаимодействуют с фермионными, что описывается эффективной фермион-бозонной вершиной Λ , перенормированной с учётом взаимодействия. В выражение для собственно-энергетической функции и поляризационного оператора эта величина входит через уравнение Дайсона:

$$\Sigma_{\mathbf{vk}} = G_{0,\mathbf{vk}}^{-1} - G_{\mathbf{vk}}^{-1} = - \sum_{\Omega\mathbf{q}\eta} \lambda^\eta G_{\mathbf{v}+\Omega,\mathbf{k}+\mathbf{q}} W_{\Omega\mathbf{q}}^\eta A_{\mathbf{v}\Omega\mathbf{k}\mathbf{q}}^\eta, \quad (36)$$

$$P_{\Omega\mathbf{q}}^\eta = W_{0,\Omega\mathbf{q}}^{-1} - W_{\Omega\mathbf{q}}^{-1} = 2 \sum_{\mathbf{vk}} \lambda^\eta G_{\mathbf{v}+\Omega,\mathbf{k}+\mathbf{q}} G_{\mathbf{vk}} A_{\mathbf{v}\Omega\mathbf{k}\mathbf{q}}^\eta, \quad (37)$$

где G_0, W_0 и G, W — решёточные функции Грина фермионного и бозонного полей, свободные и со взаимодействием соответственно, λ — свободная фермион-бозонная вершина (рис. 9а). Индекс η пробегает значения 0, x, y, z, где $\eta = 0$ соответствует зарядовому каналу, а остальные три значения соответствуют компонентам спиновой поляризации в магнитном канале.

Формально уравнения Дайсона являются точными. Собственно TRILEX-приближение в простейшей форме состоит в том, что фермион-бозонная вершинная функция предполагается локальной и совпадающей с вершинной функцией примесной задачи, для которой действие имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\text{f-b}}[c^\dagger, c, d] = & - \sum_{\mathbf{vk}\sigma} c_{\mathbf{vk}\sigma}^\dagger G_{0,\mathbf{vk}\sigma}^{-1} c_{\mathbf{vk}\sigma} - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\Omega\mathbf{q}} d_{\Omega\mathbf{q}} \mathcal{W}_{\Omega\mathbf{q}}'^{-1} d_{-\Omega,-\mathbf{q}} + \\ & + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{v}\Omega} \sum_{\sigma\sigma'} \lambda_{\mathbf{v}\Omega} c_{\mathbf{vk}\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^\eta c_{\mathbf{v}+\Omega,\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'} d_{-\Omega,-\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (38)$$

Требование совпадения локальных функций с таковыми для вспомогательной примесной задачи ($\sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{vk}} = G_{\mathbf{v}}$, $\sum_{\mathbf{k}} W_{\Omega\mathbf{k}} = W_{\Omega}$) замыкает систему уравнений TRILEX.

По построению TRILEX претендует на то, чтобы, с одной стороны, описывать локальную, моттовскую, физику, а с другой — учитывать корреляции дальнего порядка. Это обстоятельство позволяет рассматривать TRILEX как полноценную альтернативу кластерным вариантам DMFT. Например, как показано в работах [147, 148], одноузельный TRILEX способен описывать d-волновую сверхпроводимость, что применительно к DMFT возможно только в его кластерном обобщении. Хорошие результаты позволяет получать метод при применении к моделям, в которых важную роль играет спин-орбитальное взаимодействие — на фоне сильного локального

взаимодействия [149]. К важным преимуществам метода стоит отнести и то, что TRILEX, в отличие, например, от родственного ему, по сути, метода $GW + \text{DMFT}$ [150–153], учитывает одновременно и зарядовые, и спиновые флуктуации. Однако, как и в других схемах, основанных на разделении локального взаимодействия по каналам, в TRILEX существует проблема неопределённости Фирца. Отсутствие на данный момент последовательного способа разрешить неопределённость Фирца делает невозможным применение метода TRILEX к описанию фермионных систем со взаимодействием в режиме сильных бозонных флуктуаций в нескольких каналах, а также к описанию многоорбитальных систем, в частности изотропных спиновых флуктуаций в перовскитных материалах [154].

Попыткой преодолеть указанное препятствие стало кластерное обобщение метода TRILEX [155]. В данном случае параметр Фирца, определяющий разделение взаимодействия по каналам, рассматривается как свободный, подбираемый из соображений наилучшей сходимости численной схемы. Впрочем, это не избавляет кластерный TRILEX от перечисленных ранее недостатков кластерных обобщений DMFT, в частности нарушения трансляционной симметрии: диаграмма нелокальной собственно-энергетической функции в пределах кластера отличается от таковой между соседними кластерами. В работе [156] также показано, что асимметрия TRILEX-диаграмм для собственно-энергетической и поляризационной функций приводит к неверным результатам для восприимчивости в режиме сильной связи.

Решить перечисленные проблемы удалось авторам родственного метода, названного *дуальный TRILEX* (D-TRILEX) [157, 158]. D-TRILEX представляет собой ещё одну диаграммную вычислительную схему, основанную на частичной бозонизации (через преобразование Хаббарда–Стратоновича), и начинается с перехода к дуальным переменным, что позволяет выделить фермион-фермионное, бозон-бозонное и фермион-бозонное взаимодействия, причём, как обычно, рассмотрение ограничивается нижним порядком разложения по взаимодействию фермионов и бозонов:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{S}}_{\text{f-b}} = & - \sum_{\mathbf{vk}\sigma} f_{\mathbf{vk}\sigma}^\dagger \tilde{G}_{\mathbf{vk}\sigma}^{-1} f_{\mathbf{vk}\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{\Omega\mathbf{q}\eta} b_{\Omega\mathbf{q}}^\eta \tilde{W}_{\Omega\mathbf{q}}'^{-1} b_{-\Omega,-\mathbf{q}}^\eta + \\ & + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{v}\Omega} \sum_{\eta\sigma\sigma'} A_{\mathbf{v}\Omega}^\eta f_{\mathbf{vk}\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^\eta f_{\mathbf{v}+\Omega,\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'} b_{-\Omega,-\mathbf{q}}^\eta, \end{aligned} \quad (39)$$

где $f^\dagger, f$ — дуальные фермионные переменные, b — дуальные бозонные переменные, $\tilde{W}$ — дуальный бозонный пропагатор без взаимодействия. Бозон-фермионная вершина примесной задачи Λ в этом формализме представляет собой неперенормированную вершину для решёточной модели $\tilde{\mathcal{S}}_{\text{f-b}}$. Старшие из отброшенных членов разложения (39) содержат в себе описывающую фермион-фермионное взаимодействие четырёхточечную вершину $\gamma^{(2)}$, просто пренебречь которой оказывается невозможным. С другой стороны, прямое вычисление величины $\gamma^{(2)}$ представляет собой довольно ресурсоёмкую расчётную задачу. Поэтому D-TRILEX-формализм строится таким образом, чтобы подобрать конкретный вид бозонного взаимодействия, при котором вклад вершины $\gamma^{(2)}$ в диаграммном ряду оказался бы минимальным.

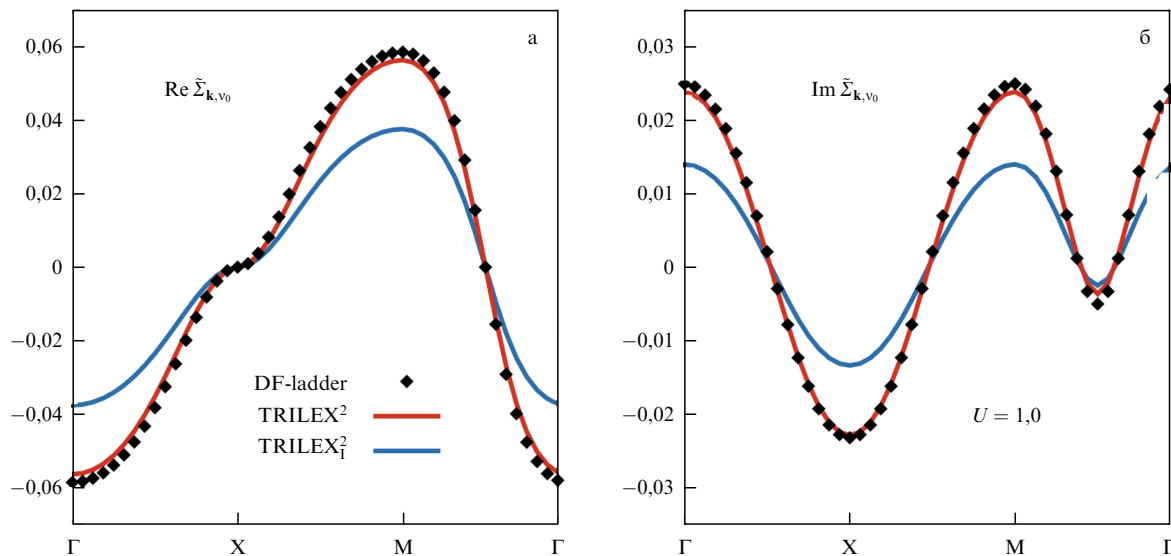


Рис. 10. Сравнение результатов расчётов для действительной и мнимой частей нелокальной составляющей собственнo-энергетической функции на первой мацубаровской частоте, полученных с помощью метода дуальных фермионов (DF-ladder), D-TRILEX с разбиением $U^c = -U^s = U/2$ (TRILEX²) и D-TRILEX с изинговским разбиением взаимодействия (TRILEX²_I) [157].

Далее, собственнo-энергетическая функция и поляризационный оператор определяются в главном (втором) порядке разложения по A :

$$\tilde{\Sigma}_{\mathbf{vk}} = - \sum_{\Omega\mathbf{q}} A_{\mathbf{v}+\Omega, -\Omega}^{\eta} \tilde{G}_{\mathbf{v}+\Omega, \mathbf{k}+\mathbf{q}} \tilde{W}_{\Omega\mathbf{q}}^{\eta} A_{\mathbf{v}\Omega}^{\eta}, \quad (40)$$

$$\tilde{P}_{\Omega\mathbf{q}}^{\eta} = 2 \sum_{\mathbf{vk}} A_{\mathbf{v}+\Omega, -\Omega}^{\eta} \tilde{G}_{\mathbf{v}+\Omega, \mathbf{k}+\mathbf{q}} \tilde{G}_{\mathbf{vk}} A_{\mathbf{v}\Omega}^{\eta}. \quad (41)$$

Заметим, что вершины A входят в D-TRILEX-выражения симметричным образом, в отличие от таковых в аналогичных выражениях метода TRILEX (ср. рис. 9а и б). Подробное обсуждение особенностей построения подобных диаграмм в дуальных переменных предлагается, например, в работе [159]. Разложение полной вершинной функции, аналогичное применяемому в D-TRILEX, можно найти также в работе [160], вышедшей почти одновременно с [157]. Авторы статьи [160] назвали такой подход *разложением однобозонного обмена* (Single-Boson Exchange (SBE) decomposition).

В основе D-TRILEX лежит приближение схемы DB, а значит, данный метод наследует у родительской схемы свойство самосогласованности, благодаря чему он оказывается не обременённым проблемой неопределённости Фирца. Разбиение на спиновый (s) и зарядовый (c) каналы производится для искусственно введённого взаимодействия, причём критерием выбора конкретного вида разбиения $U^c = -U^s = U/2$ является, как упоминалось, минимизация вклада отбрасываемых в рамках приближения диаграмм.

Из преимуществ D-TRILEX стоит выделить сравнительную простоту и низкие вычислительные затраты на его реализацию, что, в частности, позволяет применять данный метод к описанию таких систем, как селенид индия, характеризующийся сильными кулоновскими корреляциями на фоне выраженного электрон-фононного взаимодействия [161]. Причём метод позволяет получать результаты той же точности, что и, например, гораздо более ресурсоёмкий DF (рис. 10). Также отметим, что D-TRILEX свободен от нефизичных расходи-

мостей собственнo-энергетической функции, возникающих в ряде подходов, использующих обращение матрицы функции отклика [162–164].

D-TRILEX представляет собой самосогласованное диаграммное расширение DMFT, учитывающее коллективные электронные флуктуации. Важно заметить, что D-TRILEX может успешно применяться к описанию многоорбитальных систем [154]. На момент написания настоящего обзора этот метод представляет собой единственную схему, позволяющую описывать нелокальные корреляции в многоорбитальных системах с сильным взаимодействием. Так, авторы серии работ [165–167] развивают полноценную многозонную версию метода D-TRILEX и успешно применяют её к описанию свойств обобщённой модели Хаббарда на кубической и квадратной решётках, двухорбитальной решётке Хаббарда–Канамори и двухслойной хаббардовской решётке.

Обобщая вышесказанное, можно охарактеризовать методы типа TRILEX как попытку объединить точное описание локальных флуктуаций с помощью DMFT и приближённое описание нелокальных эффектов на уровне метода GW . Принципиальным здесь является то обстоятельство, что нелокальные флуктуации включаются в рассмотрение без учёта взаимовлияния каналов. Однако, как известно, для целого ряда физических систем, в частности купратов, этого недостаточно, поскольку коллективные флуктуации возникают в них одновременно в нескольких каналах и могут влиять друг на друга. В разделах 4.1.3, 4.2 мы предлагаем вниманию читателя методы, позволяющие учитывать соответствующие эффекты.

4.1.3. Метод паркетных уравнений в дуальных переменных и функциональная ренормгруппа. Развитым диаграммным подходом к учёту нелокальных корреляций сразу во всех каналах является *метод паркетных уравнений*. Основу метода составляет паркетное разложение полной вершинной функции F на полностью неприводимую вершину A и вершины Φ_r , приводимые в каналах рас-

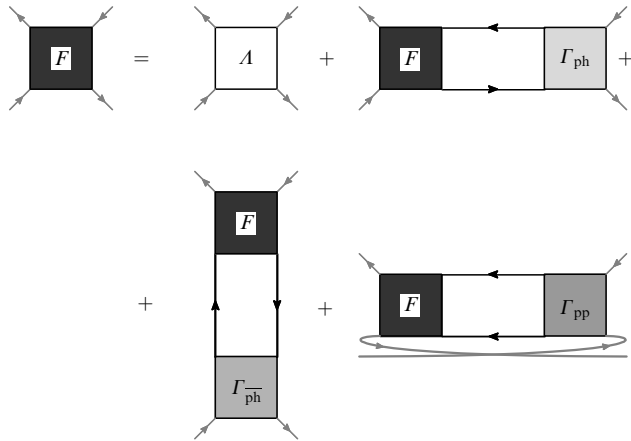


Рис. 11. Паркетное разложение полной вершинной функции F на полностью неприводимую вершинную часть A и приводимые вершины Φ_{ph} , Φ_{ph}^{-} и Φ_{pp} . Приводимые вершины Φ_r выражены через неприводимые вершины $\Gamma_r = F - \Phi_r$ с помощью уравнений Бете–Солпитера.

сеяния частица–дырка (particle–hole), частица–дырка в поперечном канале (particle–hole transverse) и частица–частица (particle–particle) ($r = ph, ph^-, pp$). Термин *полностью неприводимая* означает, что данные диаграммы нельзя разделить на несвязанные куски с помощью разрезания двух любых линий. Приводимые вершины Φ_r в свою очередь могут быть разрезаны по двум внутренним линиям (рис. 11). Вершинные функции Φ_r можно построить из соответствующих неприводимых вершин $\Gamma_r = F - \Phi_r$ с помощью лестничных уравнений, схематично записываемых как $\Phi_r = FGG_r$, известных также как *уравнение Бете–Солпитера* (Bethe–Salpeter, BS). Дополненные уравнением Швингера–Дайсона, связывающим собственную энергию Σ с полной вершиной F , паркетные уравнения и уравнения BS образуют замкнутую систему и решаются самосогласованно. Для подробного знакомства с методом паркетных уравнений мы предлагаем читателю обратиться к классическому обзору [168], а также к недавним работам, в которых метод паркетных уравнений без каких-либо приближений впервые был применён для небольших хаббардовских кластеров [169, 170].

К основным преимуществам метода паркетных уравнений можно отнести учёт всех эффектов, основанных на взаимном экранировании различных бозонных мод. В рамках данного подхода возможно построение всех одно- и двухчастичных корреляционных функций на основе полной неприводимой вершинной функции. Однако, несмотря на то что в практических реализациях используются различные приближения этой полной функции, метод паркетных уравнений требует больших вычислительных затрат. Последнее накладывает ограничения на размеры доступных для описания физических систем: максимальный размер импульсной сетки на сегодня составляет 6×6 узлов [171, 172].

Отметим достижения последних лет в области численного решения паркетных уравнений. Во-первых, применение асимптотик функций Грина [170] на высоких частотах и формфакторного базиса для пространственных индексов вершинных функций [172] позволило использовать частотные и импульсные сетки меньших размеров с большей эффективностью. Во-вторых, был

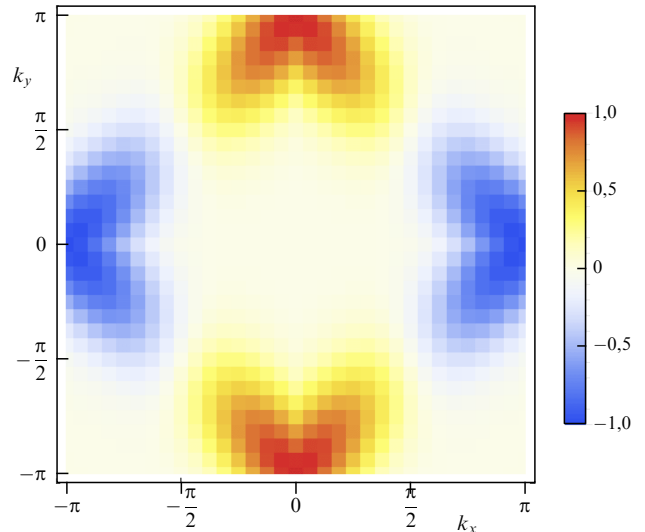


Рис. 12. Собственная функция для наибольшего собственного значения $\lambda_{pp} = 0,99$ уравнений Бете–Солпитера, вычисленная на решётке 32×32 методом паркетных уравнений в дуальных переменных. Вид функции свидетельствует о наличии d-волновой сверхпроводимости в допированной двумерной модели Хаббарда [174].

реализован метод частичной бозонизации вершинных функций для паркетных уравнений [173], позволяющий описывать длинноволновые флуктуации как бозонные степени свободы. Вычислительное преимущество достигается за счёт перехода от четырёхточечных функций Грина к трёхточечным.

Существенное уменьшение численной сложности решения паркетных уравнений оказалось возможным посредством перехода к дуальным переменным, как это сделано в работе [174]. При такой процедуре высокоэнергетическая физика, ассоциированная с локальными корреляциями, учитывается на уровне перехода к дуальным переменным, так что паркетные уравнения описывают фактически только низкоэнергетические процессы, связанные с флуктуациями коллективных мод системы. Последнее позволяет проинтегрировать по большей части мацубаровских частот, ограничиваясь диаграммами младших порядков. Построенная таким образом низкоэнергетическая модель, включающая только младшие мацубаровские частоты, допускает эффективное решение для решёток с числом узлов вплоть до 32×32 (рис. 12), учитывая при этом все флуктуации в различных каналах на равных основаниях.

Учёт нелокальных корреляций в нескольких каналах является принципиально важным, например, при описании систем с квантовыми фазовыми переходами или при рассмотрении сценариев куперовского спаривания за счёт спиновых флуктуаций. На рисунке 13 представлена фазовая диаграмма двумерной хаббардовской решётки при значениях параметров, соответствующих ВТСП-купратам. В данном случае видно, что учёт взаимного влияния бозонных мод на уровне одноузельного DMFT или построенного над ним лестничного приближения DF не позволяет воспроизвести в расчётах типичную куполообразную структуру сверхпроводящей фазы, а весьма затратный с точки зрения численных ресурсов кластерный метод (DCA) воспроизводит её менее выражено, чем дуальный паркетный формализм. Последнее может объясняться отсутствием в DCA необходимых перенор-

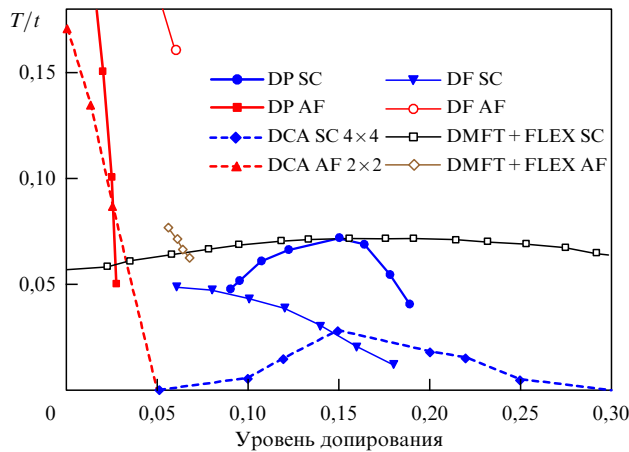


Рис. 13. Фазовая диаграмма двумерной модели Хаббарда в координатах уровень допирования – температура, полученная в рамках различных методов: дуальные паркетные (DP) уравнения для $U = 8t$, $t' = -0,2t$, $t'' = 0,1t$, динамическое кластерное приближение (DCA) для $U = 6t$, $t' = -0,2t$, $t'' = 0$, дуальные фермионы в лестничном приближении (DF) для $U = 8t$, $t' = t'' = 0$, метод DMFT+FLEX для $U = 5t$, $t' = -0,2t$, $t'' = 0,16t$. Здесь t , t' , t'' — амплитуды перескока между ближайшими узлами, по диагонали и через узел соответственно. Синие кривые соответствуют переходу в сверхпроводящее состояние, а красные — антиферромагнитному упорядочению [174].

мировок двухчастичной вершинной функции в длинноволновой области.

Для описания систем с конкурирующими нестабильностями может быть также использован метод функциональной ренормгруппы fRG [177, 178]. Идея оригинального метода состоит в плавной эволюции к коррелированной системе от точно решаемой гауссовой системы. Такая эволюция генерирует уравнения, содержащие корреляционные функции, обычно обрезанные на двухчастичном уровне. Данная техника успешно работает для слабого межчастичного взаимодействия, однако в режиме сильной связи требует учёта многопетлевых поправок. В ряде работ [179–181] показана эквивалентность метода многопетлевой функциональной ренормгруппы и паркетных уравнений; методы также характеризуются сравнимой вычислительной сложностью.

Уравнения fRG можно обобщить и для случая, когда стартовой точкой ренормгруппового потока является набор изолированных примесных задач Андерсона с параметрами, соответствующими решению DMFT [175]. Тогда действие можно записать в виде

$$S^{\xi} = \sum_{\mathbf{v}\mathbf{k}\sigma} (i\mathbf{v} - \xi A_{\mathbf{v}} - (1 - \xi)\epsilon_{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{v}\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{v}\mathbf{k}\sigma} + \sum_i \int_0^{1/T} d\tau U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (42)$$

свободное слагаемое действия определяется вкладом как примесной задачи Андерсона, так и решёточной задачи без взаимодействия. Начальная точка $S^{\xi=1}$ соответствует набору одинаковых примесных задач, гибридизации которых получаются из динамической теории среднего поля, $S^{\xi=0}$ соответствует модели Хаббарда (рис. 14).

Как и другие схемы с учётом взаимовлияния различных каналов флуктуаций, fRG также сигнализирует о наличии сверхпроводящего купола в фазовой диаграмме модели Хаббарда. На рисунке 15 представлена за-

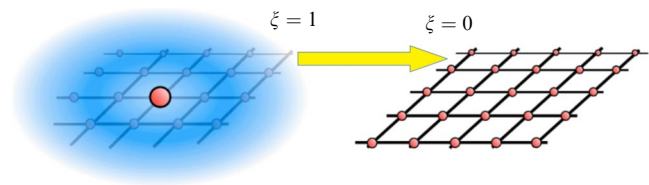


Рис. 14. Иллюстрация метода DMF^2RG , заключающегося в эволюции от примесной задачи Андерсона ($\xi = 1$) к полной решёточной задаче ($\xi = 0$) посредством уравнений ренормгруппы [175].

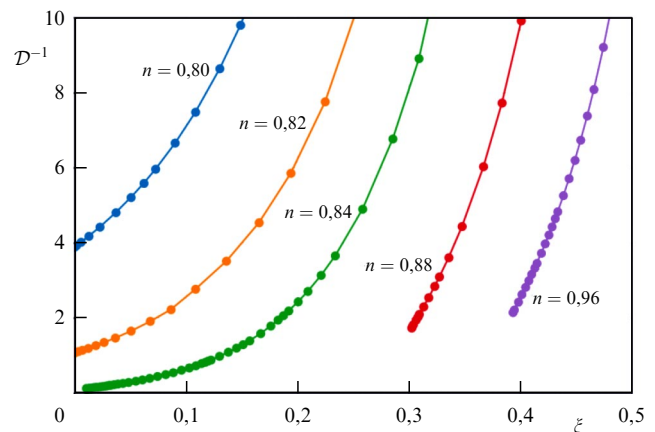


Рис. 15. Зависимость обратной величины эффективного взаимодействия D в куперовском d-волновом канале от параметра ξ при разных значениях электронной плотности n , полученная с помощью метода DMF^2RG для модели Хаббарда при параметрах $U = 8t$, $t' = -0,2t$, $T = 0,08t$. $\xi = 1$ соответствует набору примесных задач, $\xi = 0$ — модели Хаббарда [176].

висимость обратной величины эффективного взаимодействия для d-волнового спаривания электронов, соответствующего волновому вектору $\mathbf{Q} = 0$ и нулевой частоте, от параметра ренормгруппового потока ξ , полученная в работе [176] для разных значений электронной плотности. Для плотности $n = 0,96$ и $n = 0,88$ поток показан до критических значений ξ_c , при которых возникает магнитная неустойчивость. Видно, что при приближении к полузаполнению от $n = 0,80$ спаривающие корреляции сначала усиливаются, однако не могут полностью развиться из-за возникновения магнитной неустойчивости.

4.2. Описание нелокальных корреляций без использования диаграммных рядов

Описанные в разделе 4.1 диаграммные разложения, построенные над DMFT, позволяют последовательным образом учесть как локальные корреляции, так и существенно нелокальные эффекты, связанные с формированием коллективных мод. Численно точное решение задачи DMFT означает, что теория не содержит ограничений на величину и характер локальных корреляций. Однако, как легко понять, суммирование только выделенных классов диаграмм означает определённые предположения о характере флуктуаций. Именно, использование лестничных и паркетных приближений оправдано, если коллективные флуктуации можно считать гауссовыми или почти гауссовыми. Это, однако, неверно, в частности, если речь идёт о конечных системах (например, магнитных молекулах [182]), находящихся при достаточно низких температурах. В последнем случае на соответствующую параметру порядка коллек-

тивную степень свободы воздействует потенциал вида "мексиканская шляпа", так что статистика флуктуаций оказывается существенно негауссовой. Далее опишем метод флуктуирующего локального поля, позволяющий выходить за рамки локальной физики DMFT введением вспомогательного классического поля без предположений о величине и характере коллективных флуктуаций.

4.2.1. Метод флуктуирующего локального поля. В качестве нового способа учёта коллективных флуктуаций в работе [183] был предложен *метод флуктуирующего локального поля* (Fluctuating Local Field, FLF). Изначально метод был сформулирован для описания флуктуаций классического поля, определённого на конечной решётке, и впоследствии обобщён для квантовых систем.

При предположении о том, что лидирующий канал флуктуаций известен, метод FLF технически основывается на точном преобразовании статистической суммы, которое для решёточной модели, описываемой действием S , выражается в виде

$$Z = \int \exp(-S[c^\dagger, c]) D[c^\dagger, c] = \left(\frac{N}{2\pi\kappa T}\right)^{3/2} \times \\ \times \iint \exp\left\{-S[c^\dagger, c] - \frac{N}{2T}\left(\kappa\|\bar{s}\|^2 - 2(\zeta\bar{s}) + \frac{1}{\kappa}\|\zeta\|^2\right)\right\} \times \\ \times \mathcal{D}[c^\dagger, c] d^3\zeta. \quad (43)$$

Здесь ζ — искусственно введённое классическое векторное поле, сопряжённое с параметром порядка $\bar{s}$, а $\|\dots\|$ — длина вектора. В случае, например, антиферромагнитных флуктуаций компоненты $\bar{s}$ имеют вид

$$\bar{s}^\eta = \frac{T}{N} \int_0^{1/T} \sum_j \exp[i(\mathbf{q}\mathbf{r}_j)] c_{j\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^\eta c_{j\sigma'} d\tau,$$

где $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$, $\mathbf{r}_j$ — положение узла j . Величина κ является свободным параметром модели и определяет амплитуду флуктуаций поля ζ . Видно, что в показатель добавлен полный квадрат, так что интегрирование по ζ действительно возвращает исходную статистическую сумму. Важно заметить, что если вначале выполнить интегрирование по фермионным полям, то такое преобразование можно рассматривать как введение ансамбля $Z \propto \int Z_\zeta d^3\zeta$, где Z_ζ — статистическая сумма системы при конкретном значении флуктуирующего поля ζ . Вычисление Z_ζ может оказаться проще, чем исходной Z , поскольку благодаря появлению в действии для Z_ζ члена вида $\kappa\bar{s}^2$ флуктуации параметра порядка при каждом фиксированном значении поля ζ уменьшаются по сравнению с исходными. Это позволяет рассчитывать на использование теории возмущений, которая для исходной системы была бы неприменима. Дополнительное улучшение сходимости может быть достигнуто посредством оптимального выбора κ . Полная величина флуктуаций при этом восстанавливается за счёт последующего интегрирования по $d\zeta$. Важно отметить, что предложенный метод не накладывает ограничений на величину и статистику моментов рассматриваемых флуктуаций — они могут быть существенно негауссовыми.

На практике метод FLF развивается на основе некоторого "родительского" приближения, например среднего полевого или DMFT. В частности, в работе [184] раз-

вита схема DMFT + FLF для описания нелокальных магнитных флуктуаций в двумерных хаббардовских кластерах. Согласно теореме Мермина – Вагнера данная система парамагнитна и соответственно решение DMFT в отсутствие внешнего магнитного поля должно строиться на предположении о нулевом локальном магнитном моменте примеси. Однако в таком подходе не учитываются флуктуации магнитного момента примеси вблизи среднего значения, коррелированные для различных узлов решётки. В рамках метода FLF это можно исправить, введя зависимость функции Грина примеси от величины флуктуирующего поля. В простейшем случае такая зависимость линейна, т.е. функция Грина примеси выражается как

$$G_\zeta^{\text{FLF}} = G_\zeta - \sum_\eta \zeta^\eta f_\zeta(\omega) \sigma_{\sigma\sigma'}^\eta \exp[i(\mathbf{q}\mathbf{r}_j)], \quad (44)$$

где G_ζ — соответствующая некоторой гибридизации Δ_ζ функция Грина примеси, вычисленная методом DMFT при предположении отсутствия магнитной поляризации, а $f_\zeta(\omega)$ определяет частотный профиль поля ζ . Таким образом, в рассмотрение включаются различные значения локального магнитного момента. Поскольку флуктуирующее поле нарушает симметрию системы, далее будет использоваться тензорная нотация. Введём тензор L , ненулевые компоненты которого в фурье-представлении $L_{\zeta, \mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma, \sigma'}^\eta = f_\zeta(\omega) \sigma_{\sigma\sigma'}^\eta \exp[i(\mathbf{q}\mathbf{r}_j)]$, так что выражение (44) в тензорных обозначениях принимает вид $G_\zeta - (\zeta L)$. Тогда, по аналогии с выводом формулы (29), для хаббардовской решётки с дисперсией $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ можно получить выражение для свободной энергии $F_\zeta = -T \ln Z_\zeta$ [184]:

$$F_\zeta = N\mathcal{F} - \ln \det [1 + (G - (\zeta L))(\Delta - \varepsilon)] + \frac{N}{2\kappa} \zeta^2, \quad (45)$$

где $\mathcal{F}$ — свободная энергия неполяризованной примеси, а функция Грина при некотором значении поля ζ оказывается равна $G_\zeta = [(G_\zeta - (\zeta L))^{-1} + \Delta - \varepsilon]^{-1}$. Окончательная функция Грина метода FLF на основе DMFT получается в результате усреднения по всем значениям поля ζ :

$$G^{\text{FLF}} = \left\langle \frac{1}{(G_\zeta - (\zeta L))^{-1} + \Delta - \varepsilon} \right\rangle_{\text{FLF}}, \quad (46)$$

где $\langle \dots \rangle_{\text{FLF}} = Z^{-1} \int \dots Z_\zeta d^3\zeta$.

Наконец, требуется установить величину параметра κ и функцию $f_\zeta(\omega)$. Это можно сделать, заметив, что флуктуации параметра порядка, учтённые в методе FLF, можно исключить, заменив усреднение по ζ выбором единственного значения, соответствующего точке ζ_0 , в которой Z_ζ максимальна (седловая точка). Потребуем, чтобы такая оценка воспроизводила результат подхода, в котором флуктуации параметра порядка отсутствуют изначально, — DMFT. Рассмотрим случай системы, помещённой в слабое внешнее поле, что гарантирует отклонение ζ_0 от нуля и наличие спин-поляризации в решении DMFT. Обозначим функцию Грина такого спин-поляризованного решения как G^{DMFT} . Тогда для выбора κ и функции $f_\zeta(\omega)$ в соответствии с нашими рассуждениями следует потребовать

$$G^{\text{DMFT}} = \frac{1}{(G_\zeta - (\zeta_0 L))^{-1} + \Delta - \varepsilon}. \quad (47)$$

Требование (47) замыкает систему уравнений FLF.

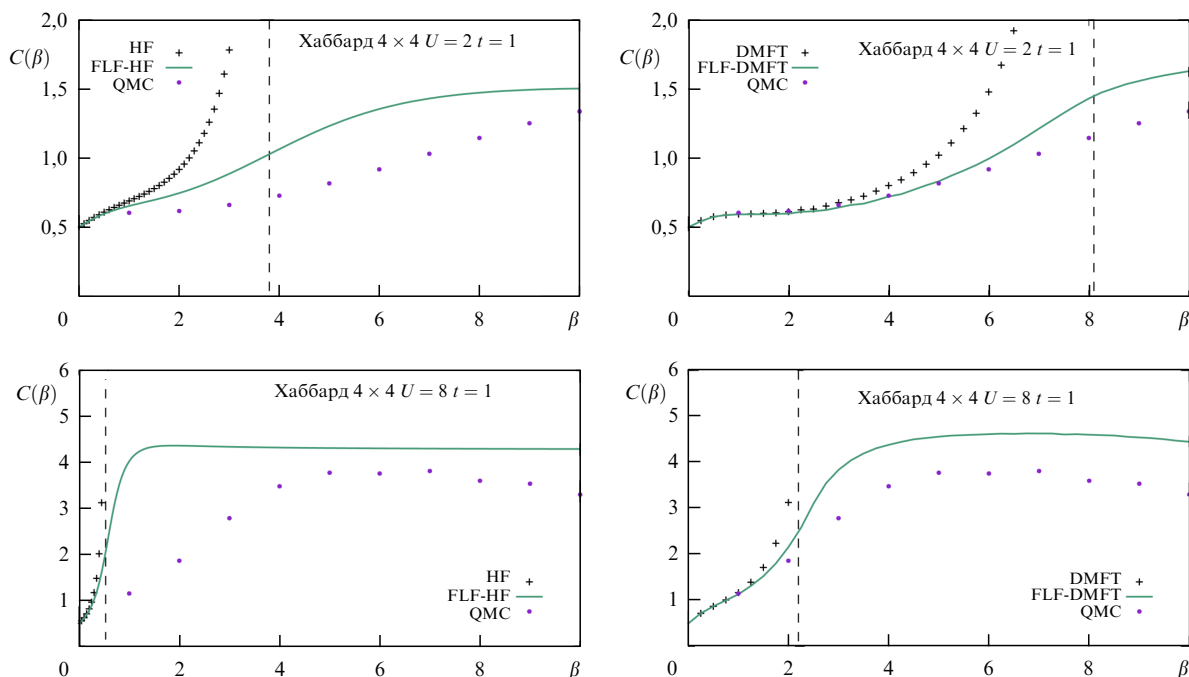


Рис. 16. Результаты расчёта зависимости постоянной Кюри C от обратной температуры $\beta = 1/T$ для полузаполненной антиферромагнитной двумерной решётки Хаббарда, полученные с помощью квантового метода Монте-Карло (QMC), среднестатистического приближения (Hartree – Fock, HF), динамической теории среднего поля (DMFT) и метода флуктуирующего локального поля, построенного на их основе (FLF – HF и FLF – DMFT) [184].

На рисунке 16 представлены результаты расчётов постоянной Кюри $C = T\chi$, где χ — восприимчивость в антиферромагнитном канале, для полузаполненных хаббардовских решёток размером 4×4 с $U = 2t$ (умеренно коррелированная система) и $U = 8t$ (сильнокоррелированная система), полученные с помощью схем FLF – HF (FLF на основе среднестатистического приближения Хартри – Фока) и FLF – DMFT. Поведение исследуемой системы определяется, во-первых, физикой, связанной с формированием локальных моментов, и, во-вторых, развитыми коллективными антиферромагнитными флуктуациями. Из рассмотренных приближений только FLF – DMFT включает оба указанных механизма. Видно, что эта схема даёт и наилучшее описание температурной зависимости постоянной Кюри.

Стоит подчеркнуть, что метод FLF позволяет повышать точность результатов за счёт увеличения числа рассматриваемых колебательных мод вблизи лидирующей. Эффективность многомодового режима FLF для классических систем Изинга и Гейзенберга продемонстрирована в работе [183], а в работе [185] данная схема успешно использована для вычисления свободной энергии одномерных хаббардовских цепочек. Заметим, однако, что увеличение количества учитываемых мод требует дополнительных вычислительных затрат, поэтому пока FLF остаётся технически ограниченным с этой стороны. Тем не менее простота реализации, гибкость метода и отсутствие ограничений на величину коллективных флуктуаций позволяют рассматривать FLF как перспективную численную схему для исследования коррелированных систем в различных режимах. Отметим также, что, хотя на момент написания настоящего обзора приведённый метод был развит только применительно к задачам с одним каналом флуктуаций,

схема его построения не накладывает ограничений на количество каналов.

5. Заключение

Итак, мы провели краткий обзор существующих сегодня численных методов описания коррелированных систем. Начав со среднестатистического приближения, отображающего многочастичную задачу на одночастичную в эффективном внешнем поле и не учитывающего корреляционные эффекты, мы перешли сначала к локально точной динамической теории среднего поля, а затем рассмотрели ряд схем, разработанных для учёта нелокальных корреляций.

Принимая во внимание большие успехи, достигнутые благодаря методу DMFT, нетрудно понять, почему многие последующие схемы именно его берут за основу. Учёт нелокальных эффектов как разложения вблизи локальной физики представляется вполне естественным. Нельзя, однако, забывать о том, что хороший численный метод должен отвечать ряду требований, среди которых обязательным является учёт физических законов (симметрия, наблюдаемые результаты и пр.). Весьма желательна также простая программная реализация и по возможности малые вычислительные затраты. Вместе с тем описание фазовых переходов предполагает и возможность рассмотрения физических систем в широком диапазоне значений параметров. Из перечисленных в настоящем обзоре методов указанным требованиям отвечают D-TRILEX и FLF, хотя с уверенностью говорить об этом можно будет только после ряда дополнительных проверок.

Физика коррелированных многочастичных систем активно развивается. Настоящий обзор не претендует

на сколь-либо полный охват всех работ в данной области и даже на представление полного перечня существующих методов. Однако мы надеемся, что наш обзор поможет читателю сориентироваться в широком поле работ по пост-DMFT-схемам, а приведённый список источников даст возможность заинтересовавшимся глубже разобраться в конкретном методе. Хорошим дополнением к настоящему обзору может служить работа [186], в которой проводится последовательное сравнение результатов различных схем для конкретной системы (полузаполненной модели Хаббарда с $U = 2t$).

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Дорожной карты развития высокотехнологичной области "Квантовые вычисления" № 1/17654-Д от 10.07.2019 г. (Государственная корпорация по атомной энергии "Росатом"). Работа Я.С.Л. поддержана Национальным исследовательским ядерным университетом МИФИ по программе "Приоритет-2030".

Список литературы

- Mott N F *Proc. Phys. Soc. A* **62** 416 (1949)
- Roth L M *J. Phys. Chem. Solids* **23** 433 (1962)
- Hubbard J *Proc. R. Soc. Lond. A* **276** 238 (1963)
- Hubbard J *Proc. R. Soc. Lond. A* **277** 237 (1964)
- Hubbard J *Proc. R. Soc. Lond. A* **281** 401 (1964)
- Изюмов Ю А *УФН* **165** 403 (1995); Izumov Yu A *Phys. Usp.* **38** 385 (1995)
- van Loon E G C P, Katsnelson M I *J. Phys. Conf. Ser.* **1136** 012006 (2018)
- Bünemann J et al. *J. Phys. Condens. Matter* **19** 326217 (2007)
- Aryasetiawan F et al. *Phys. Rev. B* **70** 195104 (2004)
- Bednorz J G, Müller K A *Z. Phys. B* **64** 189 (1986)
- Bardeen J, Cooper L N, Schrieffer J R *Phys. Rev.* **108** 1175 (1957)
- Damascelli A, Hussain Z, Shen Z-X *Rev. Mod. Phys.* **75** 473 (2003)
- Reznik D et al. *Nature* **440** 1170 (2006)
- Lanzara A et al. *Nature* **412** 510 (2001)
- Mackenzie A P, Maeno Y *Rev. Mod. Phys.* **75** 657 (2003)
- Kamihara Y et al. *J. Am. Chem. Soc.* **130** 3296 (2008)
- Petrovic C et al. *J. Phys. Condens. Matter* **13** L337 (2001)
- Stewart S R *Rev. Mod. Phys.* **56** 755 (1984)
- Lee P A, Nagaosa N, Wen X-G *Rev. Mod. Phys.* **78** 17 (2006)
- Yan S, Huse D A, White S R *Science* **332** 1173 (2011)
- Norman M R *Rev. Mod. Phys.* **88** 041002 (2016)
- Изюмов Ю А, Курмаев Э З *УФН* **178** 25 (2008); Izumov Yu A, Kurmaev E Z *Phys. Usp.* **51** 23 (2008)
- Bakr W S et al. *Nature* **462** 74 (2009)
- Mazurenko A et al. *Nature* **545** 462 (2017)
- Geim A K, Grigorieva I V *Nature* **499** 419 (2013)
- Yankowitz M et al. *Science* **363** 1059 (2019)
- Balents L et al. *Nat. Phys.* **16** 725 (2020)
- Kennes D M et al. *Nat. Phys.* **17** 155 (2021)
- Christos M, Sachdev S, Scheurer M S *Phys. Rev. X* **12** 021018 (2022)
- Song Z-D, Bernevig B A *Phys. Rev. Lett.* **129** 047601 (2022)
- Weinberg P, Bukov M *SciPost Phys.* **2** 003 (2017)
- Weinberg P, Bukov M *SciPost Phys.* **7** 020 (2019)
- Liu X-Y, Qi C *Comput. Phys. Commun.* **259** 107349 (2021)
- Amaricci A et al. *Comput. Phys. Commun.* **273** 108261 (2022)
- Yoshimi K, Tsumuraya T, Misawa T *Phys. Rev. Res.* **3** 043224 (2021)
- Ochi M, Koshino M, Kuroki K *Phys. Rev. B* **98** 081102 (2018)
- Repellin C et al. *Phys. Rev. Lett.* **124** 187601 (2020)
- Xie F et al. *Phys. Rev. B* **103** 205416 (2021)
- Potas P, Xie M, MacDonald A H *Phys. Rev. Lett.* **127** 147203 (2021)
- Austin B M, Zubarev D Y, Lester W A (Jr.) *Chem. Rev.* **112** 263 (2012)
- Needs R J et al. *J. Chem. Phys.* **152** 154106 (2020)
- Foulkes W M C et al. *Rev. Mod. Phys.* **73** 33 (2001)
- Burovski E A et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 186402 (2001)
- Wagner L K, Ceperley D M *Rep. Prog. Phys.* **79** 094501 (2016)
- Nakano K et al. *Phys. Rev. B* **103** L21110 (2021)
- Becca F, Sorella S *Quantum Monte Carlo Approaches for Correlated Systems* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2017)
- Li Z-X, Yao H *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **10** 337 (2019)
- Hangleiter D et al. *Sci. Adv.* **6** eabb8341 (2020)
- Huggins W J et al. *Nature* **603** 416 (2022)
- Huang E W et al. *npj Quantum Mater.* **3** 22 (2018)
- Jiang H-C, Devereaux T P *Science* **365** 1424 (2019)
- Bollmark G, Laflorencie N, Kantian A *Phys. Rev. B* **102** 195145 (2020)
- Bollmark G et al. *Phys. Rev. X* **13** 011039 (2023)
- Schollwöck U *Rev. Mod. Phys.* **77** 259 (2005)
- Schollwöck U *Ann. Physics* **326** (1) 96 (2011)
- Baiardi A, Reiher M *J. Chem. Phys.* **152** 040903 (2020)
- Jiang Y-F et al. *Phys. Rev. Res.* **2** 033073 (2020)
- Peng C et al. *New J. Phys.* **23** 123004 (2021)
- Mai P et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **119** e2112806119 (2022)
- Stemmler C, Paulus B, Legeza Ö *Phys. Rev. A* **97** 022505 (2018)
- Beran P et al. *J. Chem. Theory Comput.* **17** 7575 (2021)
- Sugihara T *J. High Energy Phys.* **2004** 007 (2004)
- Stoudenmire E M, White S R *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **3** 111 (2012)
- Li Q et al. *Phys. Rev. Lett.* **130** 226502 (2023)
- Tazhigulov R N et al. *PRX Quantum* **3** 040318 (2022)
- Stair N H, Evangelista F A *PRX Quantum* **2** 030301 (2021)
- Bravyi S B, Kitaev A Yu *Ann. Physics* **298** 210 (2002)
- Seeley J T, Richard M J, Love P J *J. Chem. Phys.* **137** 224109 (2012)
- Tranter A et al. *J. Chem. Theory Comput.* **14** 5617 (2018)
- Gutzwiller M C *Phys. Rev. Lett.* **10** 159 (1963)
- Predescu C *Phys. Rev. E* **66** 066133 (2002)
- Feynman R P *Statistical Mechanics* (Reading, MA: W.A. Benjamin, 1972)
- Stoner E C *Proc. R. Soc. Lond. A* **165** 372 (1938)
- Becke A D *J. Chem. Phys.* **140** 18A301 (2014)
- Jones R O *Rev. Mod. Phys.* **87** 897 (2015)
- Hasnig P J et al. *Philos. Trans. R. Soc. A* **372** 20130270 (2014)
- Zhang T et al. *RSC Adv.* **5** 106877 (2015)
- Hohenberg P, Kohn W *Phys. Rev.* **136** B864 (1964)
- Hybertsen M S, Schlüter M, Christensen N E *Phys. Rev. B* **39** 9028 (1989)
- McMahan A K, Annett J F, Martin R M *Phys. Rev. B* **42** 6268 (1990)
- Gunnarsson O, Schönhammer K *Phys. Rev. Lett.* **56** 1968 (1986)
- Абрикосов А А *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: Рипол Классик, 2013); Пер. на англ. яз.: Abrikosov A A, Gorkov L P, Dzyaloshinski I E *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (New York: Dover Publ., 1975)
- Mahan G D *Many-Particle Physics* (Berlin: Springer, 2013)
- Coleman P *Introduction to Many-Body Physics* (New York: Cambridge Univ. Press, 2015)
- Nelson W et al. *Phys. Rev. A* **75** 032505 (2007)
- Romaniello P, Guyot S, Reining L *J. Chem. Phys.* **131** 154111 (2009)
- Schmidt P S, Patrick C E, Thygesen K S *Phys. Rev. B* **96** 205206 (2017)
- Pavlyukh Y, Stefanucci G, van Leeuwen R *Phys. Rev. B* **102** 045121 (2020)
- van Schilfgaarde M, Kotani T, Faleev S *Phys. Rev. Lett.* **96** 226402 (2006)
- Anisimov V I, Aryasetiawan F, Lichtenstein A J *J. Phys. Condens. Matter* **9** 767 (1997)
- Metzner W, Vollhardt D *Phys. Rev. Lett.* **62** 324 (1989)
- Yonezawa F, Morigaki K *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **53** 1 (1973)
- Altland A, Simons B D *Condensed Matter Field Theory* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2010)
- Anderson P W *Phys. Rev.* **109** 1492 (1958)
- Elliott R J, Krumhansl J A, Leath P L *Rev. Mod. Phys.* **46** 465 (1974)
- Rubtsov A N, Savkin V V, Lichtenstein A I *Phys. Rev. B* **72** 035122 (2005)
- Werner P, Millis A J *Phys. Rev. B* **74** 155107 (2006)
- Gull E et al. *Rev. Mod. Phys.* **83** 349 (2011)
- Zingl M et al. *Physica B* **536** 254 (2018)
- de Souza Melo B M et al. *J. Phys. Condens. Matter* **32** 095602 (2020)
- Loh E Y (Jr.) et al. *Phys. Rev. B* **41** 9301 (1990)
- Cohen G et al. *Phys. Rev. Lett.* **115** 266802 (2015)
- Jarrell M, Gubernatis J E *Phys. Rep.* **269** 133 (1996)

104. Vidberg H J, Serene J W *J. Low Temp. Phys.* **29** 179 (1977)
105. Logan D E, Galpin M R *J. Phys. Condens. Matter* **28** 025601 (2016)
106. Park H, Haule K, Kotliar G *Phys. Rev. Lett.* **101** 186403 (2008)
107. Sun P, Kotliar G *Phys. Rev. B* **66** 085120 (2002)
108. Biermann S, Aryasetiawan F, Georges A *Phys. Rev. Lett.* **90** 086402 (2003)
109. Ayrat T, Biermann S, Werner P *Phys. Rev. B* **87** 125149 (2013)
110. Kotliar G et al. *Rev. Mod. Phys.* **78** 865 (2006)
111. Georges A et al. *Rev. Mod. Phys.* **68** 13 (1996)
112. Held K et al. *Phys. Rev. Lett.* **86** 5345 (2001)
113. McWhan D B, Rice T M, Remeika J P *Phys. Rev. Lett.* **23** 1384 (1969)
114. Zang J et al. *Phys. Rev. X* **12** 021064 (2022)
115. Maier T et al. *Rev. Mod. Phys.* **77** 1027 (2005)
116. Kotliar G et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 186401 (2001)
117. LeBlanc J P F et al. *Phys. Rev. X* **5** 041041 (2015)
118. Stanescu T D et al. *Ann. Physics* **321** 1682 (2006)
119. Chen Y-H et al. *Phys. Rev. B* **91** 045122 (2015)
120. Zhang Y Z, Imada M *Phys. Rev. B* **76** 045108 (2007)
121. Kyung B, Tremblay A-M S *Phys. Rev. Lett.* **97** 046402 (2006)
122. Lichtenstein A I, Katsnelson M I *Phys. Rev. B* **62** R9283 (2000)
123. Hettler M H et al. *Phys. Rev. B* **58** R7475 (1998)
124. Maier T A et al. *Phys. Rev. Lett.* **95** 237001 (2005)
125. Gull E, Parcollet O, Millis A J *Phys. Rev. Lett.* **110** 216405 (2013)
126. Aryanpour K, Maier Th A, Jarrell M *Phys. Rev. B* **71** 037101 (2005)
127. Potthoff M, Aichhorn M, Dahnken C *Phys. Rev. Lett.* **91** 206402 (2003)
128. Dahnken C et al. *Phys. Rev. B* **70** 245110 (2004)
129. Aichhorn M et al. *Phys. Rev. B* **74** 235117 (2006)
130. Sénéchal D et al. *Phys. Rev. Lett.* **94** 156404 (2005)
131. Rohringer G et al. *Rev. Mod. Phys.* **90** 025003 (2018)
132. Стратонович Р Л *ДАН СССР* **115** 1097 (1957); Stratonovich R L *Sov. Phys. Dokl.* **2** 416 (1957)
133. Hubbard J *Phys. Rev. Lett.* **3** 77 (1959)
134. Rubtsov A N, Katsnelson M I, Lichtenstein A I *Phys. Rev. B* **77** 033101 (2008)
135. Rubtsov A N et al. *Phys. Rev. B* **79** 045133 (2009)
136. Rubtsov A N, Katsnelson M I, Lichtenstein A I *Ann. Physics* **327** 1320 (2012)
137. Jaeckel J, Wetterich C *Phys. Rev. D* **68** 025020 (2003)
138. Baier T, Bick E, Wetterich C *Phys. Rev. B* **70** 125111 (2004)
139. Toschi A, Katanin A A, Held K *Phys. Rev. B* **75** 045118 (2007)
140. Maier T A, Jarrell M S, Scalapino D J *Phys. Rev. Lett.* **96** 047005 (2006)
141. Ribic T et al. *Phys. Rev. B* **96** 235127 (2017)
142. Sadovskii M V et al. *Phys. Rev. B* **72** 155105 (2005)
143. Кучинский Э З, Некрасов И А, Садовский М В *УФН* **182** 345 (2012); Kuchinskii E Z, Nekrasov I A, Sadovskii M V *Phys. Usp.* **55** 325 (2012)
144. Kitatani M, Tsuji N, Aoki H *Phys. Rev. B* **92** 085104 (2015)
145. Ayrat T, Parcollet O *Phys. Rev. B* **92** 115109 (2015)
146. Ayrat T, Parcollet O *Phys. Rev. B* **93** 235124 (2016)
147. Vučićević J, Ayrat T, Parcollet O *Phys. Rev. B* **96** 104504 (2017)
148. Cao X et al. *Phys. Rev. B* **97** 155145 (2018)
149. Richter M et al. *Phys. Rev. B* **104** 195107 (2021)
150. Sponza L et al. *Phys. Rev. B* **95** 041112 (2017)
151. Vučićević J et al. *Phys. Rev. Lett.* **123** 036601 (2019)
152. Kauch A et al. *Phys. Rev. Lett.* **124** 047401 (2020)
153. Simard O, Takayoshi S, Werner P *Phys. Rev. B* **103** 104415 (2021)
154. Stepanov E A et al. *Phys. Rev. Lett.* **127** 207205 (2021)
155. Ayrat T, Vučićević J, Parcollet O *Phys. Rev. Lett.* **119** 166401 (2017)
156. Krien F *Phys. Rev. B* **99** 235106 (2019)
157. Stepanov E A, Harkov V, Lichtenstein A I *Phys. Rev. B* **100** 205115 (2019)
158. Harkov V et al. *Phys. Rev. B* **103** 245123 (2021)
159. Stepanov E A et al. *Phys. Rev. B* **94** 205110 (2016)
160. Krien F, Valli A, Capone M *Phys. Rev. B* **100** 155149 (2019)
161. Stepanov E A et al. *npj Comput. Mater.* **8** 118 (2022)
162. Schäfer T et al. *Phys. Rev. B* **94** 235108 (2016)
163. Chalupa P et al. *Phys. Rev. B* **97** 245136 (2018)
164. Krien F, Valli A *Phys. Rev. B* **100** 245147 (2019)
165. Vandelli M et al. *Phys. Rev. Res.* **5** L022016 (2023)
166. Vandelli M et al. *SciPost Phys.* **13** 036 (2022)
167. Stepanov E A *Phys. Rev. Lett.* **129** 096404 (2022)
168. Bickers N E, in *Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons* (Eds D Sénéchal, A-M Tremblay, C Bourbonnais) (New York: Springer, 2004) Ch. 6, pp. 237–296
169. Tam K-M et al. *Phys. Rev. E* **87** 013311 (2013)
170. Li G et al. *Phys. Rev. B* **93** 165103 (2016)
171. Wentzell N et al. *Phys. Rev. B* **102** 085106 (2020)
172. Eckhardt C J et al. *Phys. Rev. B* **101** 155104 (2020)
173. Krien F et al. *Phys. Rev. B* **102** 195131 (2020)
174. Astretsov G V, Rohringer G, Rubtsov A N *Phys. Rev. B* **101** 075109 (2020)
175. Taranto C et al. *Phys. Rev. Lett.* **112** 196402 (2014)
176. Vilardi D, Taranto C, Metzner W *Phys. Rev. B* **99** 104501 (2019)
177. Metzner W et al. *Rev. Mod. Phys.* **84** 299 (2012)
178. Dupuis N et al. *Phys. Rep.* **910** 1 (2021)
179. Kugler F B, von Delft J *Phys. Rev. Lett.* **120** 057403 (2018)
180. Kugler F B, von Delft J *Phys. Rev. B* **97** 035162 (2018)
181. Hille C et al. *Phys. Rev. Res.* **2** 033068 (2020)
182. Zhu T, Chan G K-L *Phys. Rev. X* **11** 021006 (2021)
183. Rubtsov A N *Phys. Rev. E* **97** 052120 (2018)
184. Rubtsov A N, Stepanov E A, Lichtenstein A I *Phys. Rev. B* **102** 224423 (2020)
185. Lyakhova Ya S, Stepanov E A, Rubtsov A N *Phys. Rev. B* **105** 035118 (2022)
186. Schäfer T et al. *Phys. Rev. X* **11** 011058 (2021)

Mean-field concept and post-DMFT methods in the modern theory of correlated systems

Ya.S. Lyakhova^(1, 2, a), G.V. Astretsov^(1, 3, b), A.N. Rubtsov^(1, 3, c)

⁽¹⁾ Russian Quantum Center, Bol'shoi bul'var 30, 121205 Skolkovo, Moscow, Russian Federation

⁽²⁾ National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Kashirskoe shosse 31, 115409 Moscow, Russian Federation

⁽³⁾ Lomonosov Moscow State University, Leninskie gory 1, 119991 Moscow, Russian Federation

E-mail: ^(a) yanalyakhova@gmail.com, ^(b) gastretsov@gmail.com, ^(c) ar@rqc.ru

We briefly review methods for modeling correlated systems. The concept of correlations is of fundamental physical importance for systems such as Mott–Hubbard insulators, high-temperature superconductors, molecular magnets, and twisted graphene bilayers. With the Hubbard model chosen as a reference, we systematically describe various numerical methods, starting with the mean-field and related theories that map the physical system under study onto an effective interaction-free ensemble. We also discuss the dynamical mean-field theory (DMFT), which is one of the most common modern methods to describe local correlations exactly. DMFT-based diagram methods incorporate effects of nonlocal physics to varying degrees, with the local correlations taken into account in full. In addition, we describe the nondiagram fluctuating local field method, whereby fluctuations of the leading collective modes of the system can be treated nonperturbatively.

Keywords: strongly correlated systems, dynamical mean-field theory, fluctuations

PACS number: **71.10. – w**

Bibliography — 186 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **193** (8) 825–844 (2023)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFN.2022.09.039231>

Received 14 March 2022, revised 6 September 2022

Physics – Uspekhi **66** (8) (2023)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFN.2022.09.039231>