



Metal-izolator prelaz u drugom redu teorije perturbacije

J. Vučičević

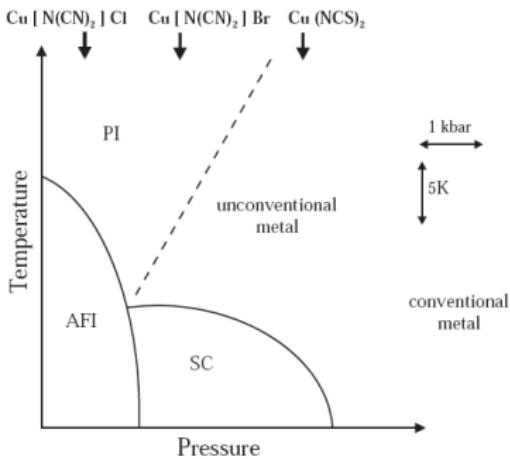
Scientific Computing Laboratory, Institute of Physics Belgrade
Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia
<http://www.scl.rs/>

Pregled

- Uvod
 - κ -organici
 - Veza neuredjenosti i otpornosti
 - StatDMFT
- Teorija
 - Habardov model
 - Teorija drugog reda perturbacije (SOPT)
 - Dinamička teorija srednjeg polja (DMFT)
 - Teorija Iterativne Perturbacije (IPT)
- Numerika
 - Brza Furijeova transformacija (FFT)
 - Half-filling IPT na imaginarnoj osi
 - Modifikovani Broyden metod
 - Arbitrary-filling IPT na realnoj osi
 - Impurity Solver
- Zaključak i rezultati

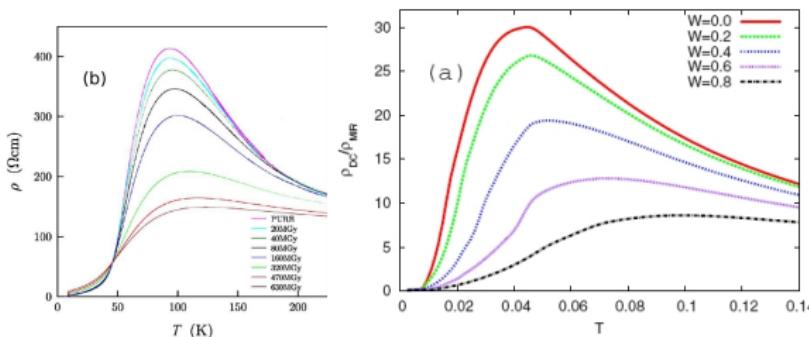
κ -organici

- κ -organici - jedna od klase jako-korelisanih materijala sa vrlo egzotičnim osobinama
 - Motov metal-izolator prelaz
 - Superprovodnost



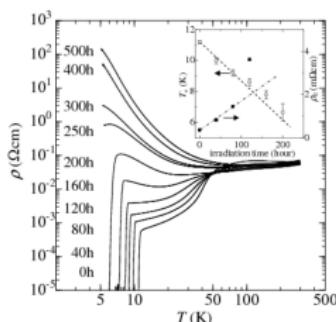
Veza neuredjenosti i otpornosti

- Mera neuredjenosti sistema veoma bitna za transportne osobine
 - Eksperimenti sa uzorcima ozračenim X-zracima pokazali veliku osetljivost optičke i električne provodnosti na promenu neuredjenosti



- DMFT sa raspodelom vrednosti energetskih nivoa, dobar metod za opisivanje ovih sistema, ali ima nedostatke

StatDMFT



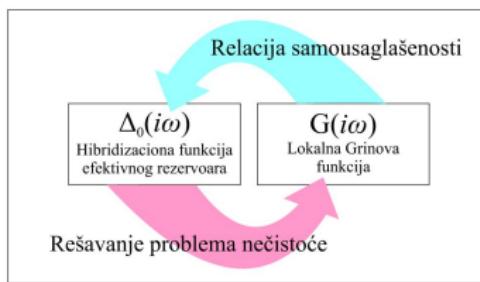
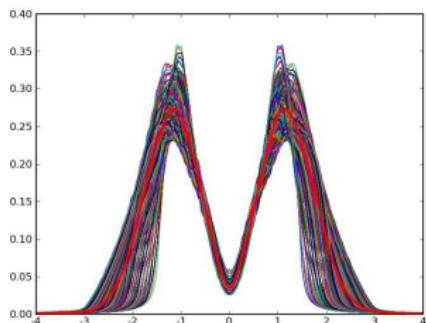
- Novi interesantni fenomeni zahtevaju bolju teoriju - realističniji tretman neuredjenosti
 - kandidat StatDMFT
- Cilj: dobiti fazni dijagram u prostoru 3 parametra
 - Jačina interakcije, U
 - Temperatura, T
 - Neuredjenost sistema, W

Habardov Model

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

- Uračunava samo “on-site” interakciju (parametar U)
- Rešiv egzaktno samo u 1D
- Dovodi do netrivijalnih osobina
- Najjednostavniji model sposoban da opiše Mott-MIT
- Veruje se da je u okviru ovog modela (ili nekog njegovog uopštenja) moguće opisati fazni dijagram visokotemperaturnih superprovodnika

Dinamička Teorija Srednjeg Polja (DMFT)



- Self-energija nema jaku zavisnost od kristalnog impulsa
- Prelazak na lokalne veličine opravdana aproksimacija
- Mapiranje na Model Andersonove Nečistoće (SIAM) uz uslov samousaglašenosti

$$G_{imp} = G_{loc} \quad (2)$$

DMFT petlja

- Rešenje problema andersonove nečistoće najveći problem
- Centralno pitanje: metod (aproksimacija) kojim se nalazi self-energija
- Najbolji impurity solver je CTQMC
 - Tačan - uzima veliki broj feynmanovih dijagrama za izračunavanje self-energije
 - Numerički vrlo zahtevan - izvršavanje traje dugo
- StatDMFT rešava simultano problem nečistoće na velikom broju atoma
 - Brzina izvršavanja od primarnog značaja \Rightarrow neophodno uvesti veću aproksimaciju za izračunavanje self-energije

Teorija drugog reda perturbacije (SOPT)

- Popravka u odnosu na Hartree-Fock pristup
 - Hartree član - elektrostatički potencijal
 - Fock član - energija razmene
 - Ne radi dobro za kristalne rešetke
- SOPT uzima u obzir i drugi član perturbativnog razvoja self-energije po U :



$$\Sigma_{\vec{k}}(i\omega) = \sum_{i\omega', \vec{k}', \vec{q}, i\Omega} G_{\vec{k}'}(i\omega') G_{\vec{k}' - \vec{q}}(i\omega' - i\Omega) G_{\vec{k} - \vec{q}}(i\omega - i\Omega) \quad (3)$$

Teorija drugog reda perturbacije (SOPT)

- Analitičko produženje
 - Konturna integracija izbegava polove na imaginarnoj osi i “branč-cut”-ove na realnoj

$$\begin{aligned} \Sigma_{\vec{k}}(\omega) = -U^2 \int \frac{dx}{\pi} [& n(x) P''_{\vec{q}}(x) G_{\vec{k}-\vec{q}}(\omega-x) \\ & + f(x) P_{\vec{q}}(\omega+x) G''_{\vec{k}-\vec{q}}(-x)] \end{aligned} \quad (4)$$

- “Polarization bubble”:

$$\begin{aligned} P_{\vec{q}}(\omega) = -U^2 \sum_{\vec{k}'} \frac{dx}{\pi} [& f(x) G''_{\vec{k}'}(x) G_{\vec{k}'-\vec{q}}(x-\omega) \\ & + f(x) G_{\vec{k}'}(\omega+x) G''_{\vec{k}'-\vec{q}}(x)] \end{aligned} \quad (5)$$

Teorija drugog reda perturbacije (SOPT)

- ”Bare perturbation” teorija: $G_{\vec{k}}$ - gola Grinova funkcija:

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\vec{k}} + i\eta} \quad (6)$$

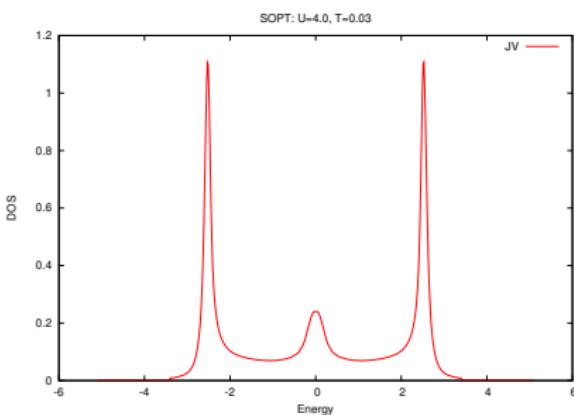
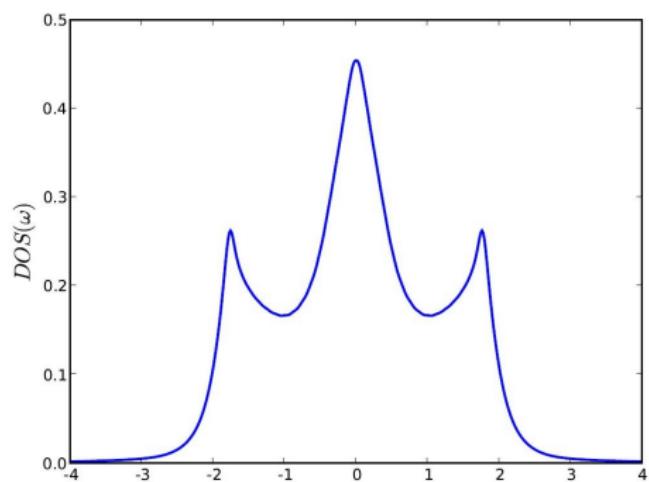
- Kompletan skup jednačina:

$$\Sigma_{\vec{k}}(\omega) = U^2 \sum_{\vec{k}', \vec{q}} \frac{f(\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}) f(\varepsilon_{\vec{k}'}) f(-\varepsilon_{\vec{k}'-\vec{q}}) + f(-\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}) f(-\varepsilon_{\vec{k}'}) f(\varepsilon_{\vec{k}'-\vec{q}})}{\omega - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}'} + \varepsilon_{\vec{k}'-\vec{q}} + i\eta}$$

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\vec{k}} - \Sigma_{\vec{k}}(\omega)}$$

$$G_{loc}(\omega) = \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(\omega)$$

Teorija drugog reda perturbacije (SOPT)



Rezultati SOPT kada za $U=2.0$ i $U=4.0$.

- Nema energetskog procepa - ne opisuje Mott MIT!

Half-filling IPT na imaginarnoj osi

- Na imaginarnoj osi
 - Procedura za half-filling vrlo jednostavna
 - “Pitome” funkcije \Rightarrow jednostavna numerika
 - Jedina poteškoća Furijeov transform
 - Analitičko produženje na realnu osu: veliki problem
- Dodatno pojednostavljenje za “semi-circular” DOS:
$$\Delta = t^2 G$$

$$G_0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - t^2 G(i\omega_n)} \quad (7)$$

$$\Sigma^{(2)}(\tau) = -U^2 G_0^2(\tau) G_0(-\tau) \quad (8)$$

$$G(i\omega_n) = \frac{1}{G_0^{-1}(i\omega_n) - \Sigma^{(2)}(i\omega_n)} \quad (9)$$

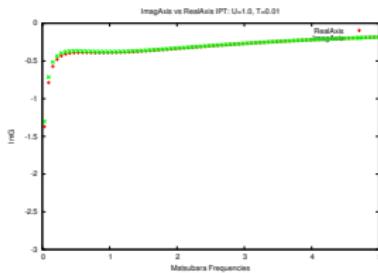
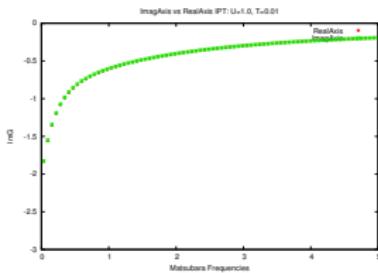
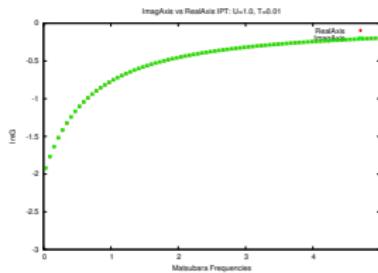
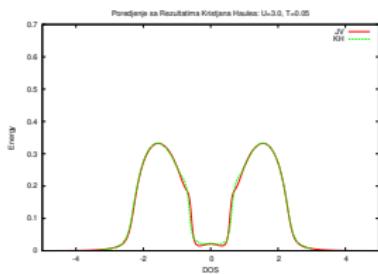
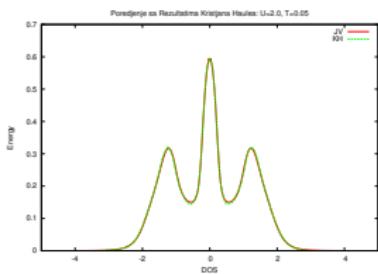
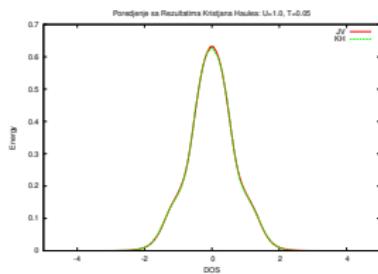
Half-filling IPT na realnoj osi

- Na realnoj osi:
 - Procedura za half-filling malo složenija
 - Funkcije vrlo nezgodne \Rightarrow komplikovana numerika
 - Analitičko produženje na imaginarnu osu: nije problem
- Pristup Kristjana Haule-a jednostavan i efikasan:

$$G_0(\omega) = \frac{1}{\omega - \Delta(\omega)}, \quad A^\pm(\omega) = -\frac{1}{\pi} G_0''(\omega) f(\pm\omega)$$

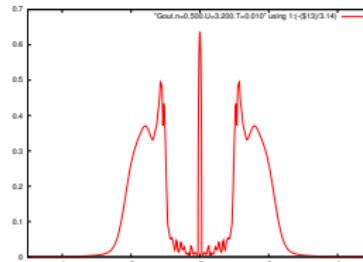
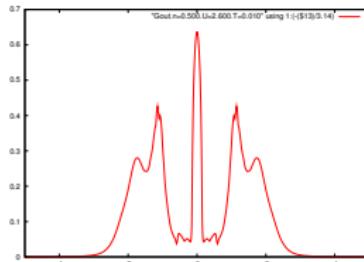
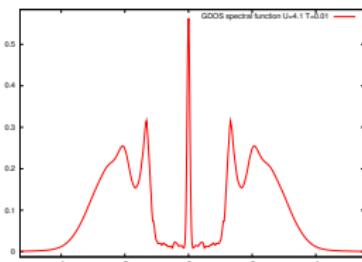
$$\begin{aligned} P_{1/2}(\Omega) &= \pi \int A^+(\omega) A^\pm(\omega - \Omega) d\omega \\ \Im\Sigma^{(2)}(\Omega) &= -U^2 \int [A^+(\Omega - \omega) P_2(\omega) + A^-(\Omega - \omega) P_1(\omega)] d\omega \\ \Re\Sigma^{(2)}(\Omega) &= -\frac{1}{\pi} \int \frac{\Im\Sigma^{(2)}(\omega)}{\Omega - \omega} d\omega \end{aligned}$$

Half-filling IPT





Half-filling IPT



IPT za dopirane sisteme

- Problem - naivno pravolinjsko uopštenje “half-filling” procedure na dopirane sisteme ne radi dobro!
- Rešenje - interpolativni izraz za self energiju, egzaktan u različitim limitima:
 - $U \rightarrow 0$
 - $U \rightarrow \infty$
 - $\omega \rightarrow \infty$
 - $\omega \rightarrow 0$, ali samo kad $T = 0$
- Henrik Kaujeter, *New Iterative Perturbation Scheme for Lattice Models with Arbitrary Filling*, Physical Review Letters, Volume 77, 1996.

$$\Sigma(\omega) = Un + \frac{a\Sigma^{(2)}(\omega)}{1 - b\Sigma^{(2)}(\omega)} \quad (10)$$

$$a = \frac{n(1-n)}{n_0(1-n_0)} \quad b = \frac{(1-2n)U - \mu + \tilde{\mu}_0}{n_0(1-n_0)U^2} \quad (11)$$

IPT za dopirane sisteme: Modifikacija

- Dodatno poboljšanje: Potthoff, 1997
- Dobija se spektralna funkcija sa jednim više egzaktnim momentom

$$M_m^{exact} = \int \omega^m A^{IPT}(\omega) d\omega, m = 0..3 \quad (12)$$

$$b = \frac{(1 - 2n)U - \mu + \tilde{\mu}_0 - B_0 + B}{n_0(1 - n_0)U^2} \quad (13)$$

$$B = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{n(1 - n)} \Im \int f(\omega) \Delta(\omega) \left(\frac{2}{U} \Sigma(\omega) - 1 \right) G(\omega) d\omega$$

$$B_0 = -\frac{1}{\pi} \frac{2n - 1}{n(1 - n)} \Im \int f(\omega) \Delta(\omega) G_0(\omega) d\omega$$

IPT za dopirane sisteme

$$G_0(\omega) = \frac{1}{\omega + \tilde{\mu}_0 - Un - \Delta(\omega)} \quad (14)$$

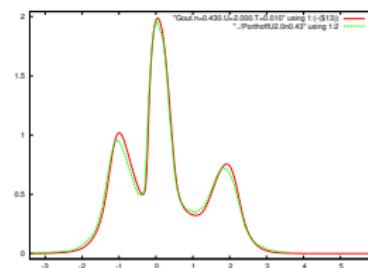
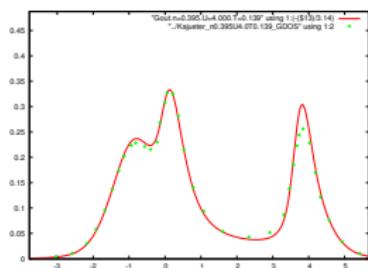
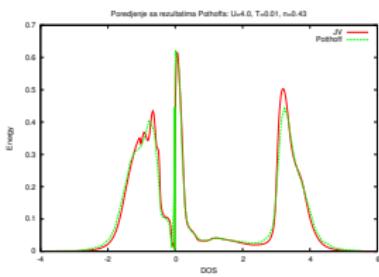
$$G(\omega) = \int \frac{\rho_0(x)dx}{\omega + \mu - \Sigma(\omega) - x} \quad (15)$$

$$\Delta(\omega) = \omega + \mu - G^{-1}(\omega) - \Sigma(\omega) \quad (16)$$

- Fixiranje slobodnih parametara ($\tilde{\mu}_0$ i n_0) na tri načina:

- $\mu = \tilde{\mu}_0$
- $n = n_0 \Rightarrow$ rešavamo $-\frac{1}{\pi} \int G_0(\omega) f(\omega) d\omega = n$ po $\tilde{\mu}_0$ i $-\frac{1}{\pi} \int G(\omega) f(\omega) d\omega = n$ po μ
- $\tilde{\mu}_0 = \mu_0 + \Sigma(0)$

IPT za dopirane sisteme



IPT Impurity Solver

- Nečistoća je definisana energijom svoje orbitale ϵ_d .

$$G_0(\omega) = \frac{1}{\omega + (\tilde{\mu}_0 - \varepsilon_d - Un_d) - \Delta(\omega)} \quad (17)$$

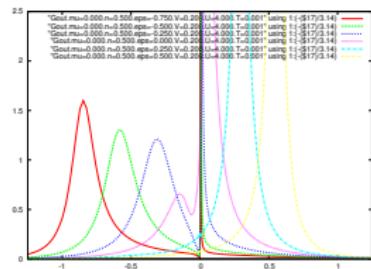
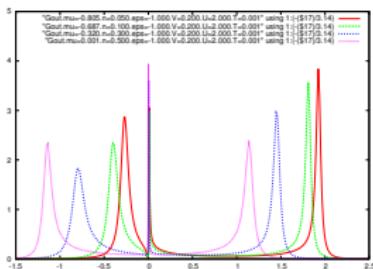
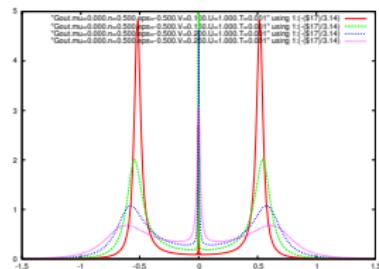
$$G(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \Delta(\omega) - \Sigma(\omega)} \quad (18)$$

- Kako ne možemo da izračunamo MPT parametar B dok ne izračunamo Grinovu funkciju, rešavamo sistem dve jednačine po $\tilde{\mu}_0$ i B :

$$\int G_0(\omega) f(\omega) d\omega = \int G(\omega) f(\omega) d\omega$$

$$B = \epsilon_d - \frac{1}{\pi} \frac{1}{n_d(1-n_d)} \Im \int f(\omega) \Delta(\omega) \left(\frac{2}{U} \Sigma(\omega) - 1 \right) G(\omega) d\omega$$

IPT Impurity Solver



Brzi Furijeov Transform

- Neophodan za IPT na imaginarnoj osi
- Inverzni transform je diskretan:

$$G(\tau) = T \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G(i\omega_n) \quad (19)$$

- Grinove funkcije su semplovane na ograničenom intervalu - unosi se sistematska greška!
- Poznajemo analitičke osobine:

$$G(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + C}, \quad n \rightarrow \infty \quad (20)$$

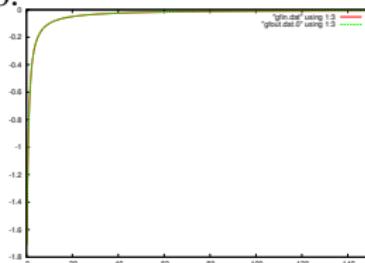
- Koristimo $C \approx -\Re G^{-1}(i\omega_{max})$ da unesemo dodatne članove u izraz

Brzi Furijeov Transform

- Direktni transform je kontinualan:

$$G(i\omega_n) = \int_0^{\beta} e^{i\omega_n \tau} G(i\tau) \quad (21)$$

- Poznajemo celu Grinovu funkciju u direktnom vremenu!
- Problem: visoko oscilatorna priroda podintegralne funkcije za visoke frekvence
- Rešenje: Podela podintegralne funkcije na intervale koje možemo analitički da rešimo.



Rezultat: Funkcija posle direktnog i inverznog furijeovog transforma neprimetno različita

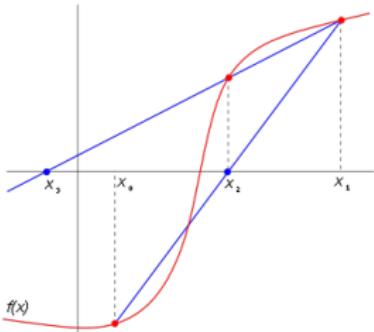


Modifikovani "Broyden solver"

- DMFT petlja - efektivno sistem N jednačina
- Rešavamo:

$$F(\vec{\Delta}) - \vec{\Delta} = \vec{\Delta}^{new} - \vec{\Delta} = 0 \quad (22)$$

- Broyden metod - metod za rešavanje sistema nelinearnih jednačina
 - Uopštenje "secant" metoda u 1D



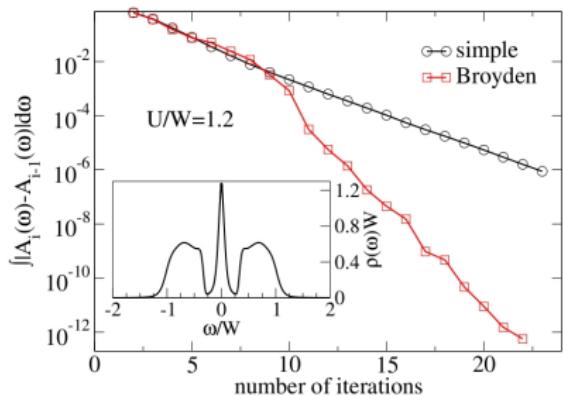
$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n) \quad (23)$$

Modifikovani "Broyden solver"

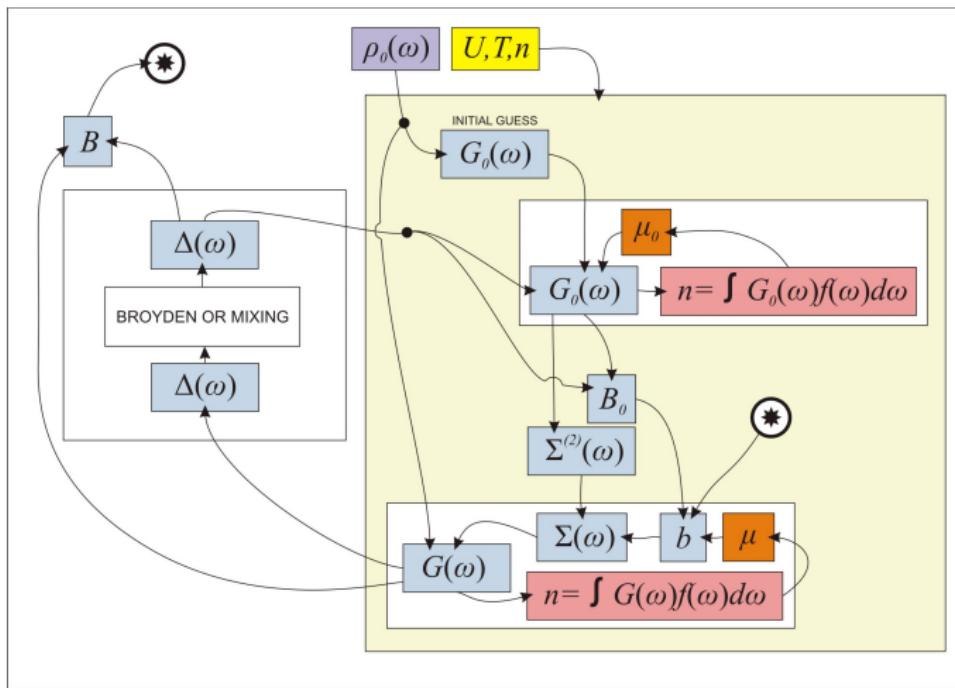
- U više dimenzija

$$\vec{V}_{n+1} = \vec{V}_n - \mathbf{J}_n^{-1} \vec{F}_n \quad (24)$$

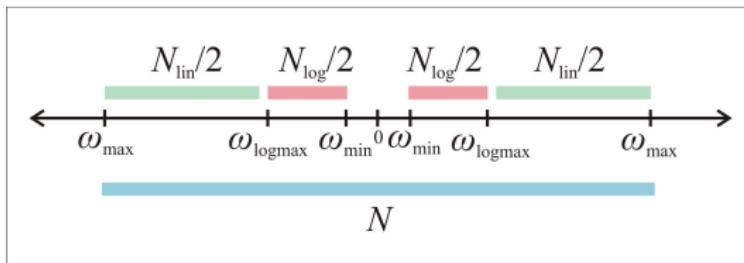
- Modifikacija - za izračunavanje novog Jakobijana koriste se sve prethodne iteracije



Arbitrary-filling IPT na realnoj osi



IPT Numerika: Sampliranje funkcija



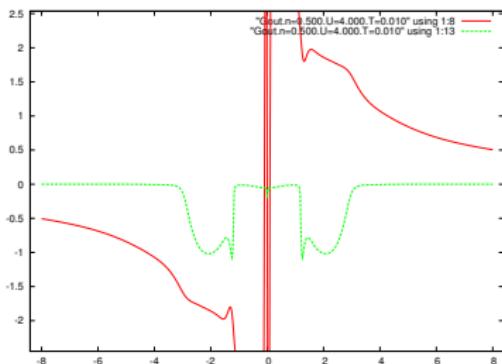
- Problem: Oštri pikovi oko $\omega = 0$
- Rešenje: Kombinacija Logaritamskog i linearnog grida

$$\omega_i = \pm \exp \left(\ln \omega_{MIN} + \frac{i}{N_{log}/2 - 1} \ln \frac{\omega_{MAXlog}}{\omega_{MIN}} \right), i \in [0, N_{log}/2 - 1] \quad (25)$$

IPT Numerika: Broadening

- Problem: U izolatoru G_0 i Σ imaju divergencije u $\omega = 0$
- Rešenje: Pomeriti se malo sa realne ose

$$G_0(\omega) = \frac{1}{\omega + i\eta - \Delta(\omega)} \quad (26)$$



Na slici: Realni deo $\Sigma^{(2)}$ ima nezgodnu strukturu oko $\omega = 0$

IPT Numerika: Kramars-Kronig

- Problem: podintegralna funkcija ima divergenciju u $\omega = \Omega$
- Rešenje: transformišemo izraz

$$\begin{aligned}\Re\Sigma(\Omega) &= -\frac{1}{\pi} \int \frac{\Im\Sigma(\omega)d\omega}{\Omega - \omega} \\ &= -\frac{1}{\pi} \left(\int \frac{\Im\Sigma(\omega) - \Im\Sigma(\Omega)}{\Omega - \omega} d\omega - \Im\Sigma(\Omega) \ln \frac{\omega_{MAX} - \Omega}{\omega_{MAX} + \Omega} \right)\end{aligned}\quad (27)$$

- Koristimo:

$$\lim_{\omega \rightarrow \Omega} \frac{\Im\Sigma(\omega) - \Im\Sigma(\Omega)}{\Omega - \omega} = (\Im\Sigma)'(\Omega) \quad (28)$$

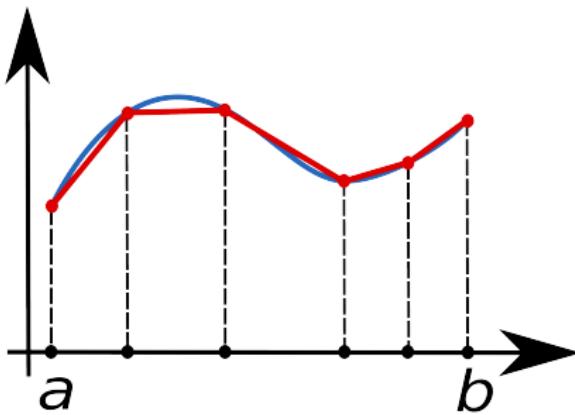
- Slično kada računamo G:

$$G(\Omega) = \int \frac{\rho_0(\omega)d\omega}{\Omega + \mu - \Sigma(\Omega) - \omega} \quad (29)$$

- Gornja transformacija ubija šum kada je $\Im\Sigma(\Omega)$ malo

IPT Numerika: Integracija

- Podintegralne funkcije jako nezgodne: oštri pikovi i divergencije
- Adaptivna Romberg integracija (*dcadre.f* sa NIST-ove arhive) - izrazito nezadovoljavajući rezultati
- Trapezoidal-rule najbolja opcija



IPT Numerika: Interpolacija

- Čuvamo vrednosti funkcija samo u tačkama grida
- Zbir/razlika dve tačke iz ω -grida ne mora biti u gridu

$$P_{1/2}(\Omega) = \pi \int A^{\mp}(\omega) A^{\pm}(\omega - \Omega) d\omega$$

$$\Im\Sigma^{(2)}(\Omega) = -U^2 \int [A^+(\Omega - \omega) P_2(\omega) + A^-(\Omega - \omega) P_1(\omega)] d\omega$$

- $A^-(\Omega - \omega)$ dobijamo linearnom interpolacijom
- Potrebno imati inverznu funkciju $i(\omega)$

IPT Numerika: Klipovanje

- Uvek važi: $\Im G(\omega) < 0, \forall \omega$
- U tačkama gde ovo nije zadovoljeno "odsecamo" Grinovu funkciju na neku malu negativnu vrednost.
- Dešava se uglavnom kada se koristi Broyden
- Opcije kada se ovo desi:
 - Isključimo Broyden na naki broj iteracija (ili do kraja)
 - Odsecamo i nastavljamo dalje

IPT Numerika: Mešanje rešenja i konvergencija

- Bitno kada ne koristimo Broyden solver
- Sprečava da program odluta u nefizičko rešenje

$$\Delta_0(\omega) = \frac{\sum_{i=0}^{N_{mix}-1} C_i \Delta_i(\omega)}{\sum_{i=0}^{N_{mix}-1} C_i} \quad (30)$$

- Uobičajeno: $N_{mix} = 2$, $C_0 = 1$, $C_1 = 2$
- Konvergencija se proverava pomoću srednje razlike vrednosti hibridizacione funkcije u sampliranim tačkama“

$$\delta = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} |\Delta_0(\omega_i) - \Delta_1(\omega_i)|}{N} \quad (31)$$

- Uobičajeni zahtev $\delta < 10^{-5}$

Impurity solver Numerika

- Rešavanje sistema 2 jednačine pomoću Modifikovanog Broyden-a - vrlo uspešno
- Opcija: koristiti MPT popravku ili ne
 - Ako ne, problem se pojednostavljuje na rešavanje jedne jednačine
- Problem: pikovi na ε_d i $\varepsilon_d + U$ mogu biti jako oštiri i uži nego što je razmak izmedju dve tačke ω grida
 - Moguće rešenje - uvodjenje dodatnih logaritamskih gridova na tim mestima
 - Nije od velikog značaja - interesuje nas fizika oko Fermi nivoa



Zaključak

- Pouzdan i brz kod
- Bez suvišnih aproksimacija
- Postiže konvergenciju lako za sve setove parametara
- Minimalan broadening
- Neophodna osnova za StatDMFT