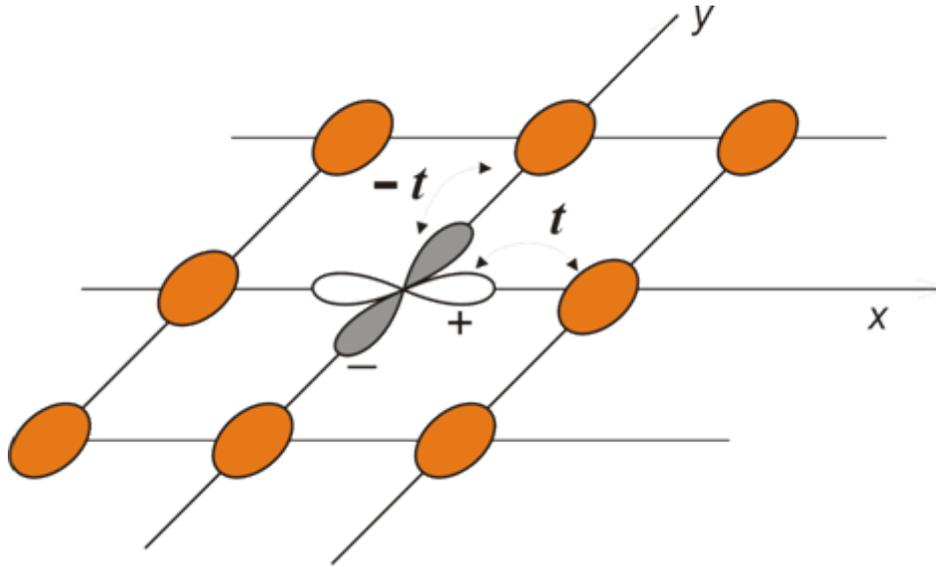


**КАК СОВМЕСТИТЬ
ВНУТРИАТОМНЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ
С ЗОННЫМ ОПИСАНИЕМ ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

П.И. Арсеев, С.О.Лойко

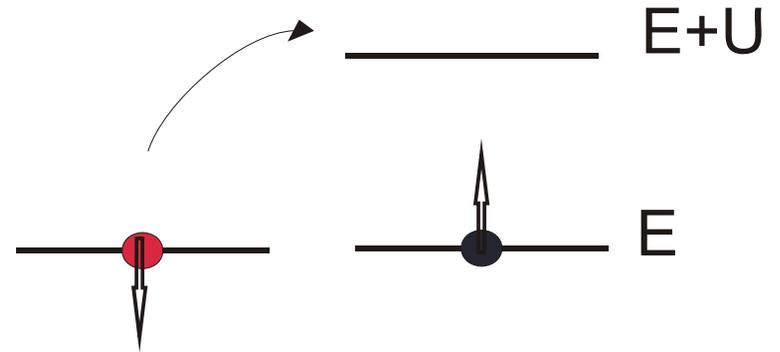
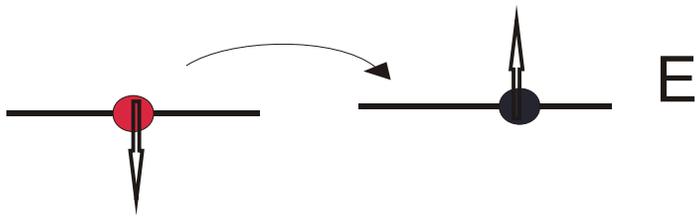
Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН

Примесь в решетке

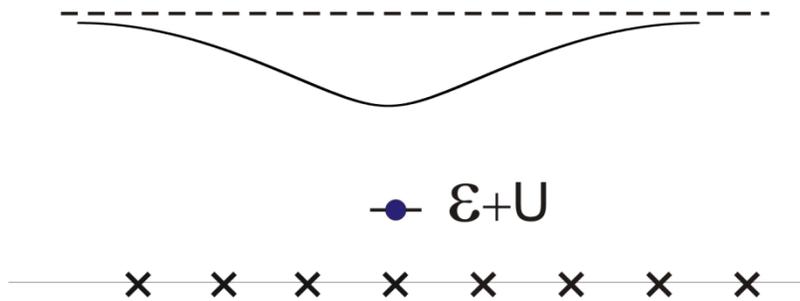


$$H_0 = \sum_i \varepsilon_0 a_i^\dagger a_i + \sum_{i,j \neq 0} (t_{ij} a_i^\dagger a_j + h.c.) +$$
$$+ \sum \varepsilon_\lambda c_\lambda^\dagger c_\lambda + \sum_{i,\lambda} (t_{i0}^\lambda a_i^\dagger c_\lambda + h.c.) + \sum_{i,\lambda} U_{\lambda,\lambda_1} n_\lambda n_{\lambda_1} (?)$$

Магнетизм в модели Андерсона



$$U \quad n_{\uparrow} n_{\downarrow}$$



Модель Андерсона

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} +$$

$$+ \varepsilon_{\uparrow} c_{\uparrow}^+ c_{\uparrow} + \varepsilon_{\downarrow} c_{\downarrow}^+ c_{\downarrow} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + t \sum_{k\sigma} (a_{k\sigma}^+ c_{\sigma} + c_{\sigma}^+ a_{k\sigma})$$

$$U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} \Rightarrow U \langle \hat{n}_{\downarrow} \rangle \hat{n}_{\uparrow} + U \langle \hat{n}_{\uparrow} \rangle \hat{n}_{\downarrow}$$



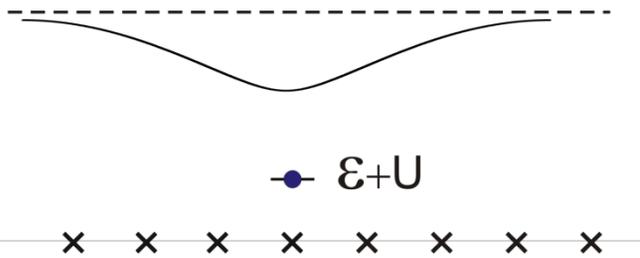
• $\varepsilon + U$



$$\varepsilon_{\uparrow} \Rightarrow \varepsilon_{\uparrow} + U \langle \hat{n}_{\downarrow} \rangle$$

$$\langle n_{\uparrow} \rangle = \int d\omega \frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ G_{00}^{\uparrow}(\omega, \langle n_{\downarrow} \rangle) \right\} n_F(\omega)$$

$$\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ G_{00}^{\uparrow}(\omega, \langle n_{\downarrow} \rangle) \right\} = \sum_{\lambda} |\psi_{\lambda}(0)|^2 \delta(\omega - \varepsilon_{\lambda})$$



$$\widehat{H}_i \psi_{\lambda} = \sum_j (t_{jm} + \delta_{jm} \delta_{im} U) \psi_{\lambda}(j) = \varepsilon_{\lambda} \psi_{\lambda}(m)$$

Задача об электронах с дополнительным потенциалом $U \langle \hat{n}_{\downarrow} \rangle$

на одном узле решетки

«Магнитное» решение, когда

$$\langle \hat{n}_{\downarrow} \rangle \neq \langle \hat{n}_{\uparrow} \rangle$$

Можно ввести вариационный параметр α

$$\begin{aligned}
 H_0 = & \sum_k \varepsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + t \sum_{k\sigma} (a_{k\sigma}^+ c_\sigma + c_\sigma^+ a_{k\sigma}) \\
 & + (\varepsilon_\uparrow + \alpha U \langle n_\downarrow \rangle) c_\uparrow^+ c_\uparrow + (\varepsilon_\downarrow + \alpha U \langle n_\uparrow \rangle) c_\downarrow^+ c_\downarrow \\
 & + U (n_\uparrow n_\downarrow - \alpha U \langle n_\downarrow \rangle n_\uparrow - \alpha U \langle n_\uparrow \rangle n_\downarrow)
 \end{aligned}$$

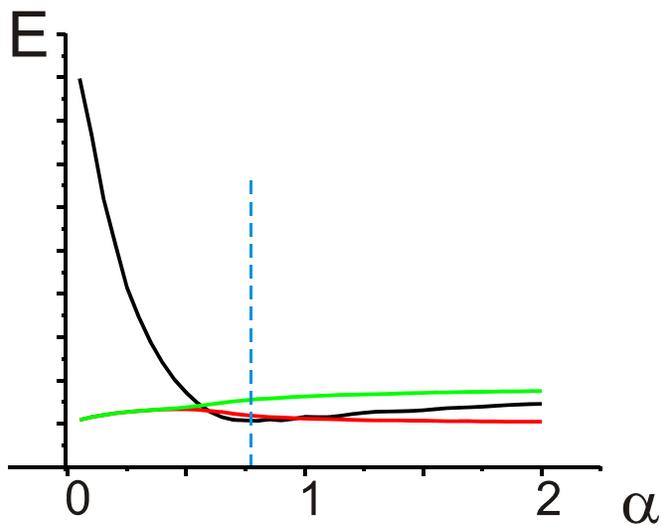
Обычный Андерсон с кулоновским отталкиванием αU

$$\varepsilon_\uparrow \Rightarrow \varepsilon_\uparrow + \alpha U \langle \hat{n}_\downarrow \rangle$$

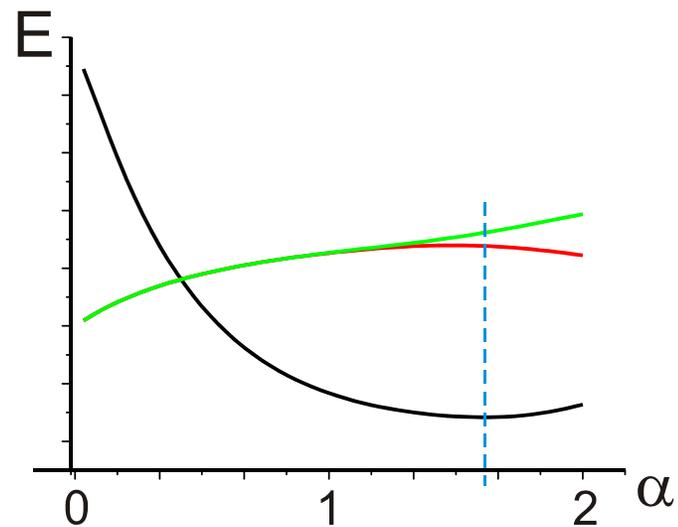
Плюс средняя энергия взаимодействия

$$\begin{aligned}
 W = & \langle U (n_\uparrow n_\downarrow - \alpha U \langle n_\downarrow \rangle n_\uparrow - \alpha U \langle n_\uparrow \rangle n_\downarrow) \rangle \\
 = & (1 - 2\alpha) U \langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle
 \end{aligned}$$

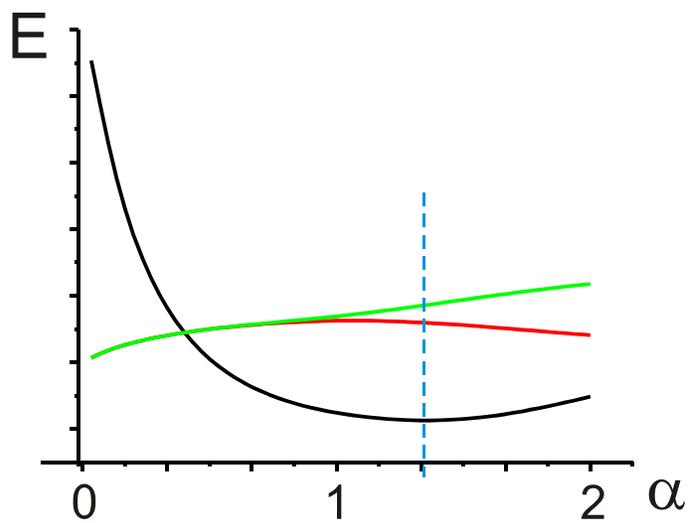
Минимизируем полную энергию по параметру α



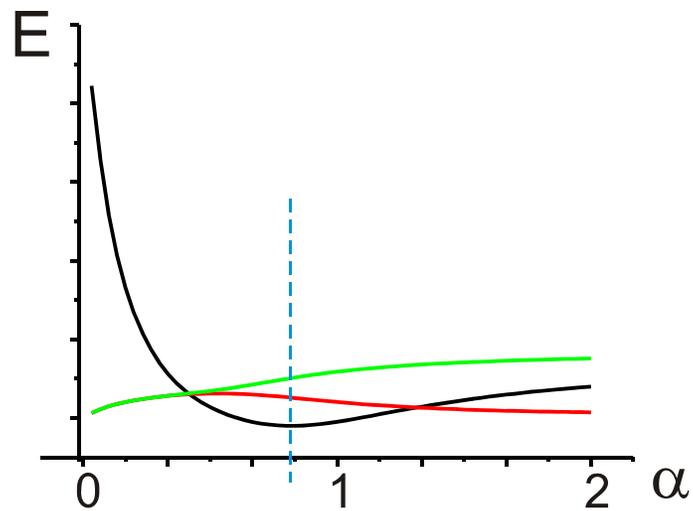
$E=0.5$ $U=4$ $E_F=0.8$



$E=1$ $U=1$ $E_F=2$



$E=1$ $U=2$ $E_F=0.8$



$E=1$ $U=4$ $E_F=0.8$

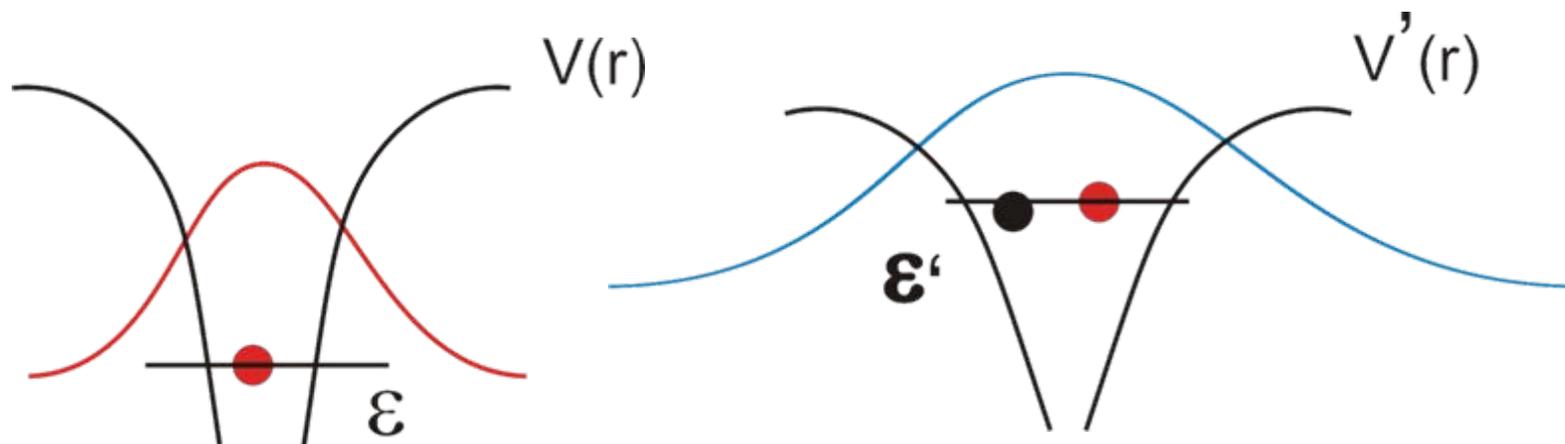
В стандартной модели Андерсона оптимальная для фиксированного числа частиц процедура используется в задаче с фиксированным химпотенциалом

Что еще нехорошо

Модель Андерсона одинаково предсказывает магнитное состояние для любых орбиталей

На s- и p- орбиталях никто магнетизма не видел

Что брать за электронные состояния на атоме примеси?



Модификация уравнений Хартри-Фока

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) + e^2 \sum_{\lambda' \neq \lambda} \int \frac{|\Psi_{\lambda'}(r')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dr'\right] \Psi_{\lambda}(r) + e^2 \sum_{\lambda' \neq \lambda, \uparrow\uparrow} \int \frac{\Psi_{\lambda}(r') \Psi_{\lambda'}(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dr' \Psi_{\lambda'}(r) = E_{\lambda} \Psi_{\lambda}(r)$$

$$\sum_{\lambda'} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) + V_H^{\lambda}(r)\right) \delta_{\lambda\lambda'} + V_{\lambda\lambda'}(r) \right] \Psi_{\lambda'}(r) = E_{\lambda} \Psi_{\lambda}(r)$$

$$V_H^{\lambda}(\vec{R}) = \int \frac{|\Psi_{\lambda}(r')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'$$

Если атом не изолированный – статистический подход

$$G(r, t; r' t') = i \langle \hat{\Psi}^+(r' t') \hat{\Psi}(r t) \rangle$$

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2m} \Delta + V(r) \right] G(r, t; r' t') =$$

$$i \langle \hat{\Psi}^+(r' t') \int dr_1 \hat{\Psi}^+(r_1 t) \hat{\Psi}(r_1 t) U(r_1 - r) \hat{\Psi}(r t) \rangle$$

Приближенное решение, факторизованное по пространственным переменным

$$\hat{\Psi}(rt) = \sum_{\lambda} \phi_{\lambda}(r) e^{-i\varepsilon_{\lambda} t} \hat{c}_{\lambda}$$

$$G(r, t; r' t') = \sum_{\lambda} \langle n_{\lambda} \rangle \phi_{\lambda}^{+}(r') \phi_{\lambda}(r) e^{-i\varepsilon_{\lambda}(t-t')}$$

$$[\varepsilon_{\lambda} - \frac{1}{2m} \Delta + V(r)] \langle \hat{n}_{\lambda} \rangle \phi_{\lambda}(r) \phi_{\lambda}^{+}(r') =$$

$$\langle \hat{n}_{\lambda} \hat{n}_{\lambda_1} \rangle \int dr_1 |\phi_{\lambda_1}(r_1)|^2 U(r_1 - r) \phi_{\lambda}(r) \phi_{\lambda}^{+}(r')$$

$$\left[-\frac{1}{2m} \Delta + V(r) + \sum_{\lambda_1 \neq \lambda} \frac{\langle \hat{n}_{\lambda} \hat{n}_{\lambda_1} \rangle}{\langle \hat{n}_{\lambda} \rangle} U_{\lambda_1}(r) \right] \phi_{\lambda}(r) = \varepsilon_{\lambda} \phi_{\lambda}(r)$$

$$U_{\lambda_1}(r) = \int dr_1 U(r - r_1) |\phi_{\lambda_1}(r_1)|^2$$

$$U_{\lambda\lambda_1}(r) = \int dr_1 U(r - r_1) \phi_{\lambda\sigma}^{*}(r_1) \phi_{\lambda_1\sigma}(r_1)$$

$$- \sum_{\lambda_1 \neq \lambda} \frac{\langle \hat{n}_{\lambda\sigma} \hat{n}_{\lambda_1\sigma} \rangle}{\langle \hat{n}_{\lambda} \rangle} U_{\lambda\lambda_1}(r) \phi_{\lambda_1}(r)$$

Если $\langle \hat{n}_\lambda \hat{n}_{\lambda_1} \rangle = \langle \hat{n}_\lambda \rangle \langle \hat{n}_{\lambda_1} \rangle$

$$\left[-\frac{1}{2m} \Delta + V(r) + \sum_{\lambda_1 \neq \lambda} \langle \hat{n}_{\lambda_1} \rangle U_{\lambda_1}(r) \right] \phi_\lambda(r) = \varepsilon_\lambda \phi_\lambda(r)$$

Без корреляторов возникает переучет кулоновского отталкивания

Для 2 электронов на 3-х p-орбиталях: $\langle n_{p\alpha} \rangle = \frac{2}{6}$

В уравнениях Хартри кулоновское отталкивание

для данного электрона от $5 \times \langle n_{p\alpha} \rangle = 1 \frac{2}{3} e$ электронов

После решения модифицированных уравнений
Хартри-Фока имеем обычную задачу о примеси в решетке:

ε_λ -- электронные уровни

$$U_{\lambda\lambda_1} = \int dr dr_1 |\phi_\lambda(r)|^2 U(r-r_1) |\phi_{\lambda_1}(r_1)|^2$$

- Матричные элементы кулоновского взаимодействия

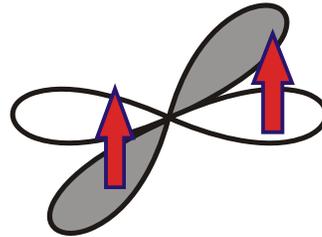
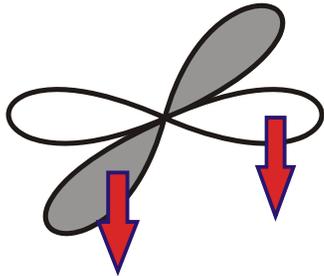
$$H_0 = \sum_i \varepsilon_0 a_i^\dagger a_i + \sum_{i,j \neq 0} (t_{ij} a_i^\dagger a_j + h.c.) +$$
$$+ \sum \varepsilon_\lambda c_\lambda^\dagger c_\lambda + \sum_{i,\lambda} (t_{i0}^\lambda a_i^\dagger c_\lambda + h.c.) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda,\lambda_1} \tilde{U}_{\lambda,\lambda_1} n_\lambda n_{\lambda_1}$$

Неосуществленная (пока) мечта

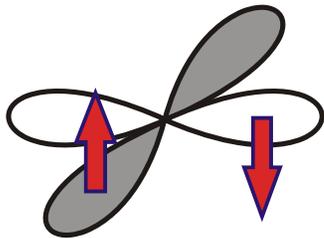
Расширение схемы на самосогласованное вычисление
корреляторов чисел заполнения

Надо следить не только за средним заполнением
различных состояний , как в модели Андерсона,
но и за корреляторами чисел заполнения

Что является характеристикой «магнитности» атома



$$\langle \hat{n}_{x\uparrow} \hat{n}_{y\uparrow} \rangle = \langle \hat{n}_{x\downarrow} \hat{n}_{y\downarrow} \rangle \simeq 1$$



$$\langle \hat{n}_{x\uparrow} \hat{n}_{y\downarrow} \rangle \simeq 0$$

Корреляторы, а не средние значения электронов разных спинов

Замечание про функции Ванье

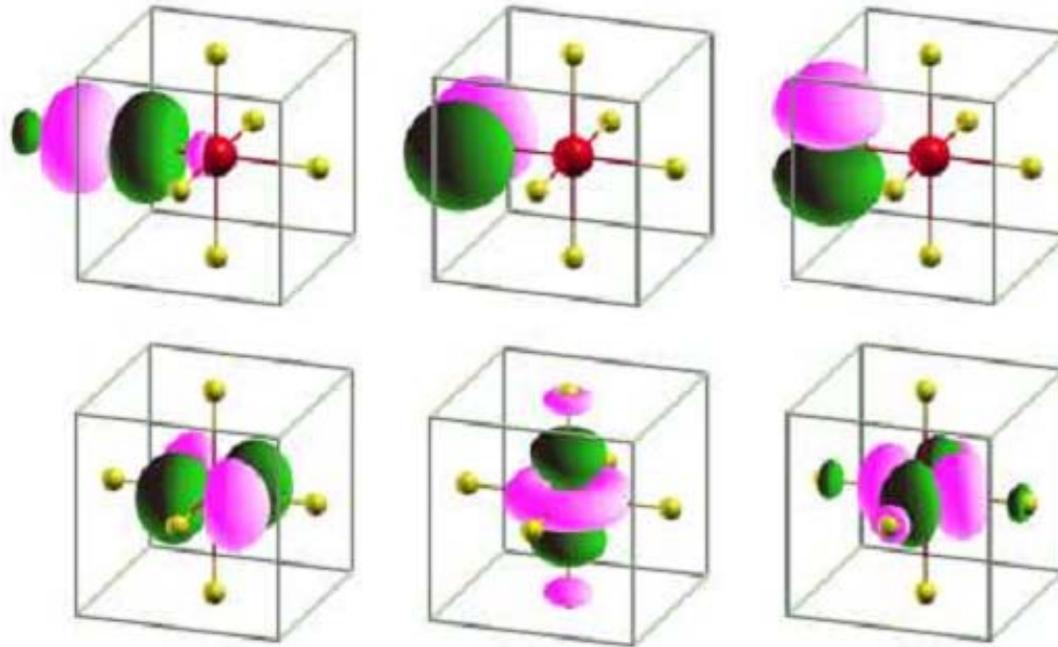


FIG. 7: (Color online) Distinct WFs for SrVO_3 obtained from the MLWF construction using the MBPP code. First row: $O(p_x)$, $O(p_y)$ and $O(p_z)$ for a chosen oxygen site. Second row: $V(t_{2g}, xy)$ as well as $V(e_g, 3z^2-r^2)$ and $V(e_g, x^2-y^2)$. The contour value for each of the MLWFs was chosen as $0.05 \text{ (a.u.)}^{-3/2}$.

**Dynamical mean-field theory using Wannier functions:
a flexible route to electronic structure calculations of strongly correlated materials**

F. Lechermann,^{1,2,□} A. Georges,¹ A. Poteryaev,¹ S. Biermann,¹ M. Posternak,³ A. Yamasaki,⁴ and O.K. Andersen⁴

Заключение

! Средние числа
NO PASARAN !

! Все на борьбу с корреляторами !

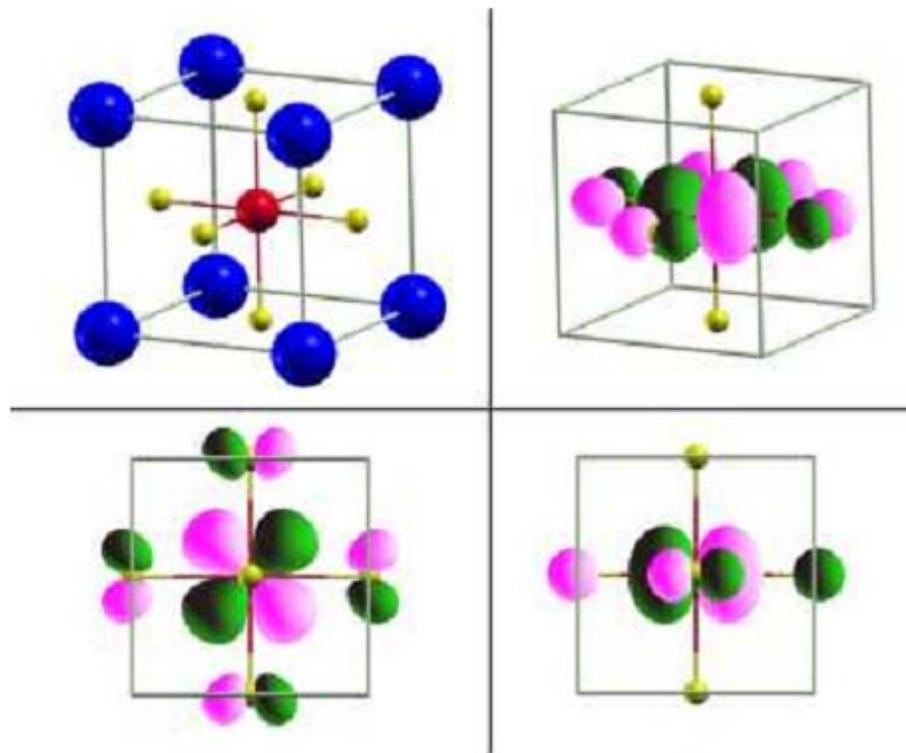
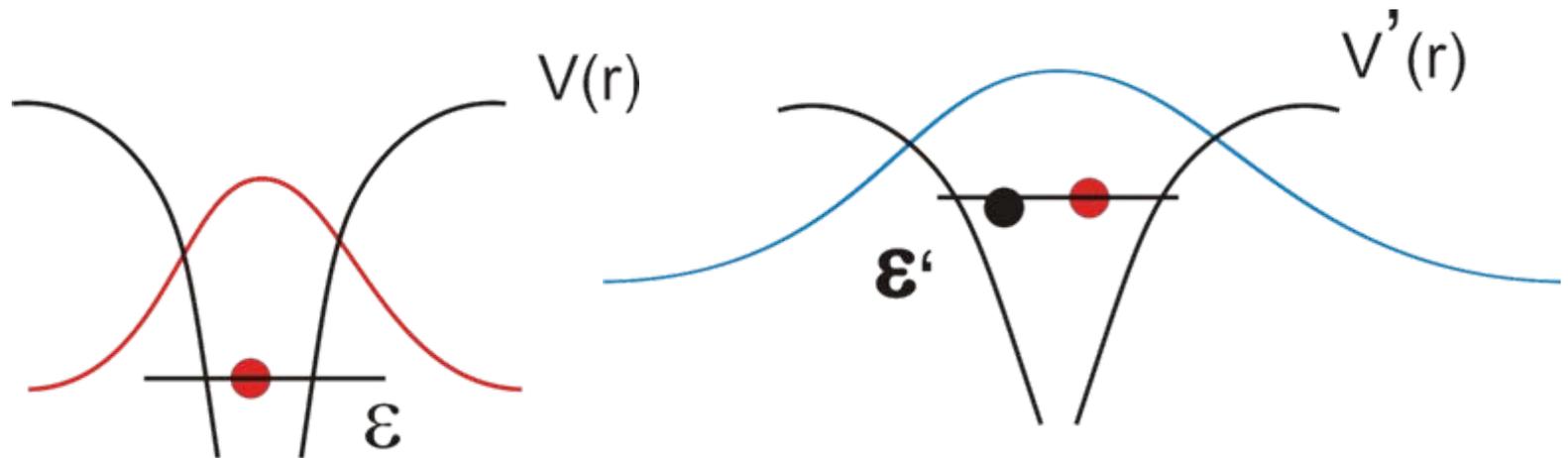


FIG. 4: (Color online) t_{2g} -like MLWF w_{xy} for SrVO_3 derived from the MBPP code. First row: SrVO_3 structure with Sr (large blue/dark), V (red/gray) and O (small yellow/light gray) and perspective view on w_{xy} . Second row: w_{xy} viewed along the c axis and along a axis. The contour value $w_{xy}^{(0)}$ was chosen as $0.05 \text{ (a.u.)}^{-3/2}$.

Все эффекты магнитного или орбитального упорядочения связаны с кулоновским взаимодействием электронов

$$H_0 = \sum_i \varepsilon_0 a_i^+ a_i + \sum_{i,j \neq 0} (t_{ij} a_i^+ a_j + h.c.) + \\ + \sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} c_{\lambda}^+ c_{\lambda} + \sum_{i,\lambda} (t_{i0}^{\lambda} a_i^+ c_{\lambda} + h.c.) + \sum_{i,\lambda} U_{\lambda,\lambda_1} n_{\lambda} n_{\lambda_1} (?)$$

Но что принять за электронные состояния на атоме примеси?



Графен

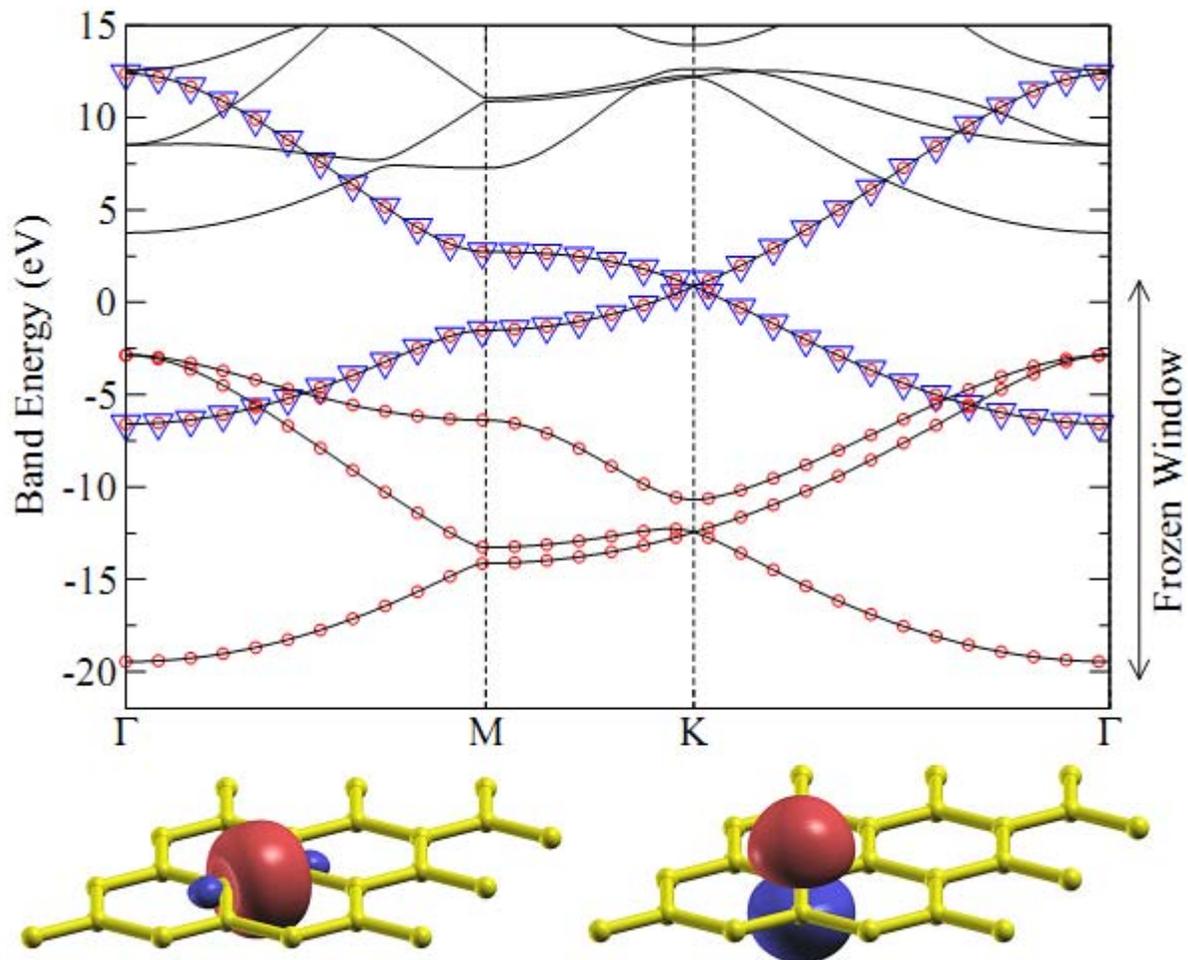


FIG. 6 (Color online) Solid black lines: band structure of graphene. Blue triangles: band structure for the subspace selected by projection onto atomic p_z orbitals. Red circles: band structure for the subspace selected by projection onto atomic p_z orbitals on each site and sp^2 orbitals on alternate sites, and using the frozen window indicated. The lower panels show the MLWFs obtained from the standard localization procedure applied to these two projected manifolds.

Коррелированное заполнение S и P состояний

$$E_S = \frac{1}{\pi} \int \sum_n \text{Im} G_{nn}(\omega) \omega n(\omega) d\omega$$

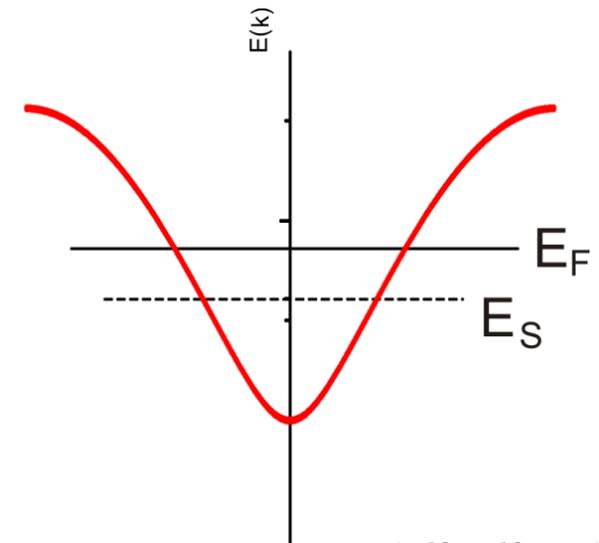
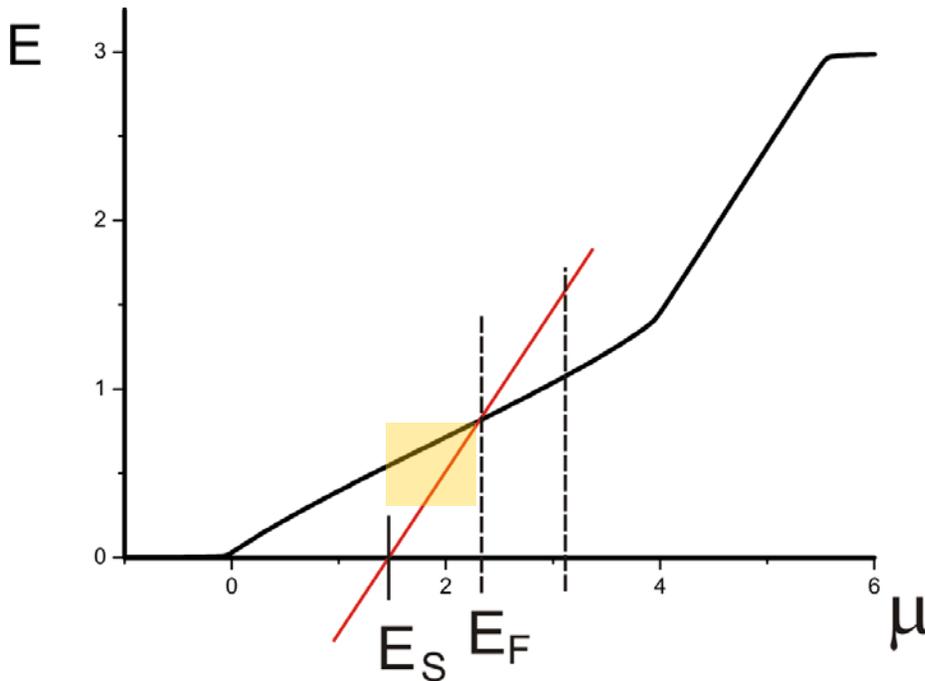
$$E_S - E_0 = \frac{1}{\pi} \int \text{Im} \left\{ \frac{\sum U_{sp} (G_k^0(\omega))^2}{1 - U_{sp} \sum_{k_1} G_{k_1}^0(\omega)} \right\} \omega n(\omega) d\omega$$

Когда

$$E_S - E_0 + \varepsilon_S < 0 \quad ?$$

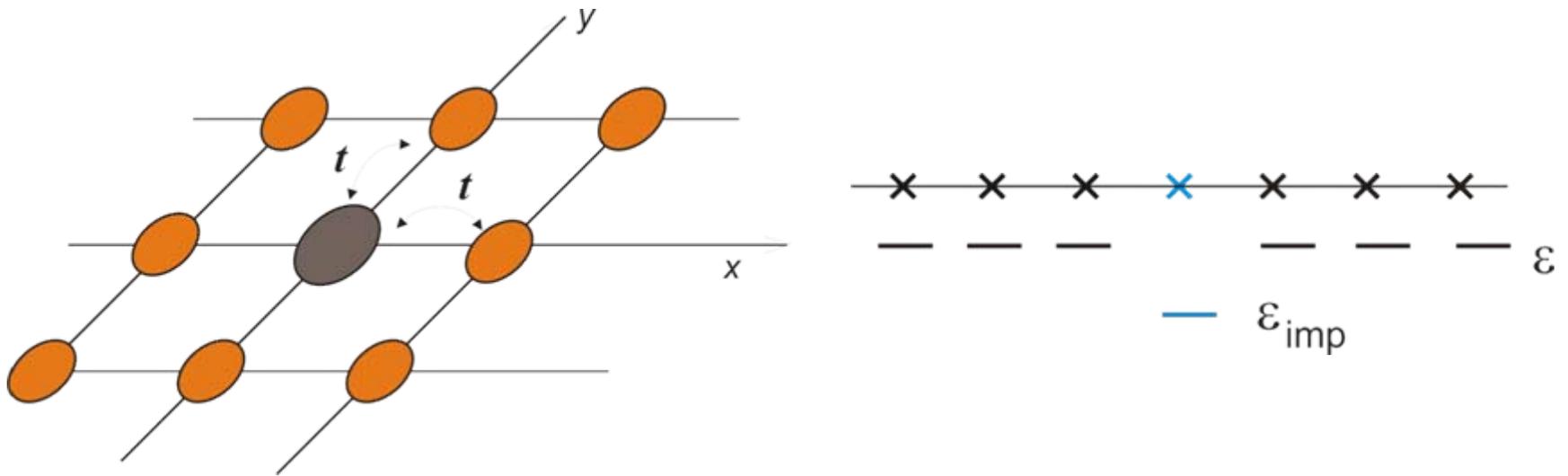
потери

выигрыш



$$\tilde{U}_{\lambda\lambda_1} = U_{\lambda\lambda_1} \left(1 - \frac{\langle n_\lambda n_{\lambda_1} \rangle}{\langle \hat{n}_\lambda \rangle} \right)$$

Подход сильно связанных электронов



$$H = \sum_i \epsilon a_i^\dagger a_i + \sum_{i,j \neq 0} (t_{ij} a_i^\dagger a_j + h.c.) + \epsilon_{imp} c^\dagger c + \sum_i (t_{i0} a_i^\dagger c + h.c.)$$

