

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ ПЕРВОГО
ПРЕЗИДЕНТА РОССИИ Б.Н. ЕЛЬЦИНА»

На правах рукописи

Медведева Дарья Сергеевна

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НЕЛОКАЛЬНЫХ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА СВОЙСТВА СИСТЕМ С
СИЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ**

01.04.07 — Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, доцент
Мазуренко Владимир Владимирович

Екатеринбург — 2019

Оглавление

	Стр.
Введение	4
Глава 1. Обзор методов моделирования электронной структуры сильно коррелированных материалов	12
1.1 Квантовые решеточные модели	12
1.2 Методы решения квантовых электронных гамильтонианов	18
1.2.1 Теория динамического среднего поля	18
1.2.2 Расширенная теория динамического среднего поля	23
1.2.3 Цикл согласования расширенной теории динамического среднего поля	24
1.2.4 Численные методы решения эффективных примесных моделей	27
Глава 2. Разработка численной схемы для решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля на основе метода точной диагонализации	33
2.1 Применение метода точной диагонализации в рамках расширенной теории динамического среднего поля	34
2.1.1 Дискретное представление бозонного резервуара эффективной примесной модели	35
2.1.2 Особенности вычисления корреляционных функций для эффективной примесной модели	39
2.1.3 Ограничение заселенности бозонного резервуара в эффективной примесной модели	40
2.2 Анализ дискретизации фермионного и бозонного резервуаров при решении эффективной примесной модели	41
2.2.1 Решение эффективной примесной модели для учета нелокального кулоновского взаимодействия	42
2.2.2 Решение эффективной примесной модели для учета нелокального обменного взаимодействия	47

2.3	Цикл самосогласования в расширенной теории динамического среднего поля на основе метода точной диагонализации	51
2.4	Особенности проведения численных экспериментов	54
2.5	Выводы к главе	55
 Глава 3. Изучение влияния межузельных взаимодействий на электронные свойства модельной системы в расширенной модели Хаббарда на квадратной решетке		
3.1	Построение фазовой диаграммы U - V расширенной модели Хаббарда, определенной на квадратной решетке	57
3.2	Оценки нелокальных кулоновских взаимодействий для реальных систем	58
3.3	Экранирование локального кулоновского отталкивания при учете межузельного зарядового взаимодействия	63
3.4	Влияние учета нелокального кулоновского взаимодействия в пределах нескольких координационных сфер на собственно-энергетическую часть	67
3.5	Влияние учета нелокальных магнитных взаимодействий на одночастичные и двухчастичные спектральные функции	73
3.6	Выводы к главе	75
 Глава 4. Моделирование поверхностных sp-систем при помощи расширенной теории динамического среднего поля		
4.1	Особенности электронной структуры фторированного и гидрогенизированного графена	79
4.2	Решение уравнений DMFT для случая треугольной решетки	81
4.3	Учет локальных электронных корреляций и нелокальных кулоновских взаимодействий при описании наносистем C_2F и C_2H	85
4.4	Выводы к главе	87
Заключение		91
Список литературы		94

Введение

Актуальность темы исследования. В последние десятилетия вследствие бурного роста цифровых технологий стало возможным проводить высокоточные численные эксперименты. Компьютерное моделирование позволило изучить и понять такие физические явления как квантовый эффект Холла, наблюдаемый в двумерных электронных системах [1]; тяжелые фермионы в сверхпроводниках (CeCu_2Si , UPt_3 , UBe_{13} , U_2Zn_{17} , UCd_{11}) и магнетиках (NpBe_{13} , U_2Zn_{17} , UCd_{11}) и неупорядоченных системах (CeAl_3 и CeCu_6) [2]; нефермижидкостное поведение, Кондо эффект в системах с тяжелыми фермионами [3], высокотемпературную сверхпроводимость в купратах [4] (например, в соединениях $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [5]) и многие другие. Природа упомянутых эффектов обусловлена наличием в системах сильных корреляций между электронами внешних оболочек атомов, расположенных в узлах кристаллической решетки [6]. В данном контексте под корреляциями стоит понимать, что *электроны сильно взаимосвязаны и движутся взаимнообусловлено*.

Отдельное внимание при описании сильно коррелированных систем уделяется разработке моделей, учитывающим нелокальные электрон-электронные взаимодействия. Например, недавно было обнаружено, что некоторые поверхностные наносистемы [7–9] характеризуются наличием сильных межузельных электростатических и магнитных взаимодействий. В определенных случаях оценочная величина кулоновского отталкивания между электронами соседних атомов уже не на порядок, как в обычных системах $3d$ -металлов [10], а всего в два раза меньше, чем локальное кулоновское взаимодействие [7]. Такие модели имеют большой потенциал применения, поскольку могут быть использованы при описании большого количества материалов и физических систем различных типов: поверхностных двумерных систем [8], графена [11], халькогенидов переходных металлов [12] и ультрахолодных атомов в оптических решетках [13–16].

Кроме того, в сильно коррелированных системах со значительными нелокальными взаимодействиями обнаруживаются специфические фазовые состояния. Одним из них является зарядовое упорядочение, возникающее в оксидах переходных металлов и органических проводниках [17–19], открытое изначально в магнетитах Fe_3O_4 [17; 18]. В данном состоянии электроны локализуются на определенных узлах кристаллической решетки, вследствие чего происходит

перераспределение электронной плотности. Зарядовое упорядочение вызывает особенный интерес у исследователей, поскольку вследствие нарушения симметрии возможно проявление сегнетоэлектрических свойств в системах манганитов-перовскитов типа $(\text{PrCa})\text{MnO}_3$, оксиде железа Fe_3O_4 и других активно изучаемых системах, например, LuFe_2O_4 [20].

Другой важной особенностью сильно коррелированных систем является переход металл-изолятор моттовского типа. Это открывает путь к созданию транзисторов [21–23], переключателей [24; 25] и устройств хранения информации [26–29] малых размеров, что является крайне важным вследствие общей наблюдаемой тенденции к миниатюризации вычислительных устройств. Очевидным является тот факт, что нелокальные взаимодействия в материале будут влиять на то, при какой величине внешнего параметра будет происходить фазовый переход [30].

Диссертационная работа посвящена разработке новых численных методов для моделирования сильно коррелированных систем с нелокальными кулоновскими и магнитными взаимодействиями и их применению к наиболее сложным на данный момент задачам материаловедения и физики конденсированного состояния.

Степень разработанности темы. К настоящему времени были сформулированы и получили развитие различные теории и модельные приближения, общей целью которых является получение данных о строении и свойствах реальных соединений. Хронология их развития представлена на рисунке 1. Одним из широко используемых методов является теория функционала плотности

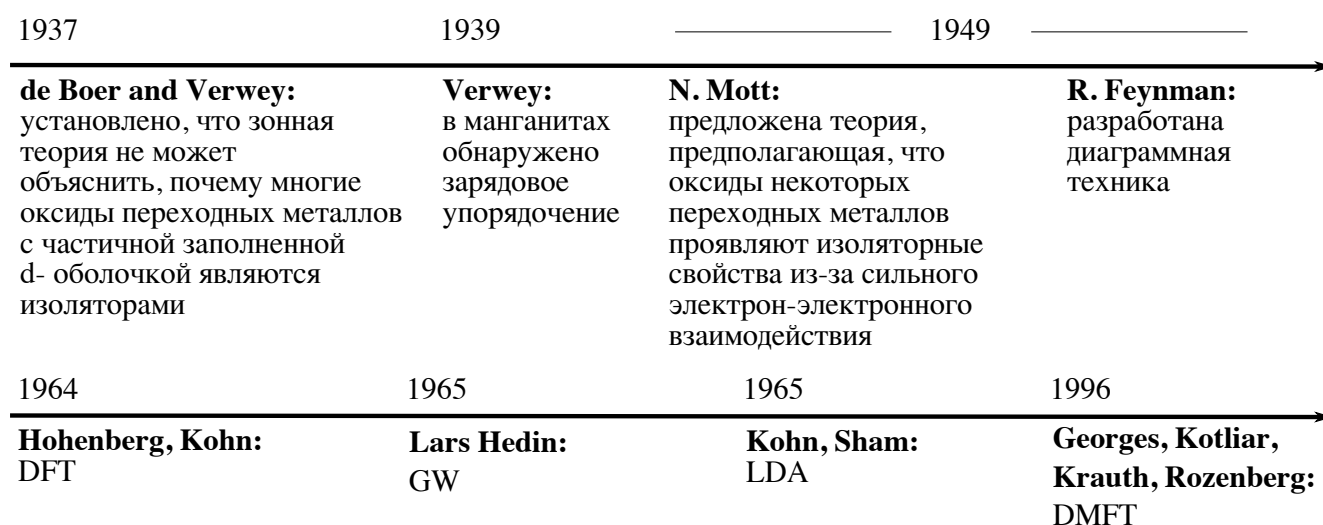


Рисунок 1 — Хронология развития методов учета электронных корреляций в реальных материалах.

(Density Functional Theory, DFT) [31], предоставляющая возможность моделировать электронную структуру материалов [32]. В рамках DFT все многоэлектронные эффекты формально учитываются в обменно-корреляционном потенциале, представляющем из себя некоторый функционал электронной плотности. Точный вид данного функционала не известен, но может быть получен при помощи различных приближений. Например, приближение локальной плотности (Local Density Approximation, LDA) [33] говорит о том, что потенциал зависит только от величины электронной плотности в конкретной точке пространства (распределение равномерно); в методе обобщенных градиентных приближений (Generalized Gradient Approximations, GGA) [34–36] предполагается неравномерное распределение электронной плотности; в *гибридных потенциалах* [37] учитывается поправка при экранировании кулоновского потенциала в металлических системах. Также существуют многие другие методы, но основной проблемой при описании сильно коррелированных систем является отсутствие учета орбитальной зависимости в потенциале, что в случае рассмотрения систем с частично заполненными d - и f -оболочками может приводить к неправильному описанию экспериментально наблюдаемых величин, таких как энергетическая щель и магнитный момент. В случае, когда в результате эксперимента установлено, что материал проявляет изоляторные свойства, данная проблема может быть частично решена в рамках приближений LDA+U [38], GGA+U [39–41]. Тем не менее, все вышеперечисленные методы являются одночастичными и не позволяют в полной мере учитывать корреляции между электронами. Так же их основной целью является описание основного состояния системы, в то время как воспроизведение экспериментальных данных связано с моделированием возбужденных состояний.

Иным подходом для решения задачи учета корреляций и взаимодействий электронов в материалах является использование многочастичных методов, основанных на диаграммах Фейнмана (Richard Phillips Feynman) [42]. В отличие от методов, основанных на функционале электронной плотности, данные методы дают возможность использовать *систематический подход* в решении многоэлектронной задачи, варьируя степень аппроксимации диаграммного ряда теории возмущений. Под степенью аппроксимации понимается выбор конкретного типа диаграмм, учитываемых при суммировании ряда. Методами, основанными на диаграммах первого порядка, являются метод Хартри-Фока и GW приближе-

ние (в названии используются обозначения G - одночастичная функция Грина, W - экранированное кулоновское взаимодействие) [43–46].

На основе самосогласованных диаграммных теорий можно решать задачу с помощью квантового эмбединга (вложения), идея которого заключается в объединении двух различных квантовых симуляций: строгого расчета выделенного объекта и приближенного расчета его окружения [47]. Одним из примеров такого подхода является теория динамического среднего поля (Dynamical Mean-Field Theory, DMFT) [48], в которой рассмотрение задачи многих тел сводится к описанию выделенного иона кристаллической решетки в некотором поле. Метод DMFT используется для исследования фазовых переходов в сильно коррелированных материалах, возникающих в результате внешнего воздействия, такого как температура, давление, электрическое и магнитное поля, легирование.

Ранее в работах по изучению спиновых стекол [49; 50], систем с нелокальными кулоновскими взаимодействиями [51–53] и систем с тяжелыми фермионами [54–56] была предложена расширенная теория динамического среднего поля (Extended DMFT) [57], позволяющая учитывать зарядовые и магнитные взаимодействия между электронами на соседних узлах. На сегодняшний день также важен учет данного вида взаимодействий в активно исследующихся магнитных пленках, адатомных системах и материалах на основе графена [7–9; 58–61].

Другой, не менее важной задачей теоретического описания материалов, является возможность рассмотреть поведение системы при переходе из металлической фазы в изоляторную или наоборот. Дело в том, что в некоторых материалах данный переход происходит очень резко [62]. Для того, чтобы использовать эту особенность технологически, необходимо иметь четкое представление о процессах, происходящих в системе при таком переходе. Теоретическое описание фазового перехода и некоторых фазовых состояний невозможно в таких подходах, как DFT. Однако, более сложные электрон-электронные взаимодействия могут быть учтены в DMFT и ее расширенных версиях. В некоторых режимах также возможно получить аналитическое решение. Однако, чем более полно и точно необходимо описывать соединение, тем большее количество взаимодействий должны быть учтены. В результате, для изучения реальных материалов чаще требуется численное решение построенных моделей. Целесообразность выбора конкретного численного метода определяется совокупностью таких пара-

метров как точность получаемых данных, количество требуемых ресурсов для проведения расчета (времени и машинная память), а также особенностями алгоритма и сложностью его программной реализации.

Цель и задачи исследования. Диссертация посвящена разработке программного алгоритма для численного решения расширенной модели Хаббарда с использованием метода точной диагонализации, а также его применению для изучения как реально синтезированных поверхностных наноматериалов с s и p электронами, так и модельных сильно коррелированных систем, которые могут быть созданы в экспериментах над ультрахолодными атомами в оптических решетках.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Разработать численную схему решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля на базе метода точной диагонализации с использованием дискретного бозонного резервуара в эффективной примесной модели.
2. При помощи разработанного метода построить фазовую диаграмму для расширенной модели Хаббарда, определенной на квадратной решетке, в широком диапазоне параметров одноузельных и межузельных кулоновских взаимодействий. Данная фазовая диаграмма позволит с единых позиций анализировать свойства совершенно разных классов сильно коррелированных материалов и искусственно синтезируемых систем.
3. В рамках расширенной теории динамического среднего поля провести моделирование электронных свойств адатомных поверхностных систем на основе графена с учетом локальных и нелокальных кулоновских взаимодействий.

Научная новизна.

1. В рамках разработанного численного метода решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля впервые применен метод дискретного описания бозонного резервуара при решении эффективной примесной модели, что позволило создать расчетную схему, обладающую рядом преимуществ по сравнению с существующими. Во-первых, возможность проводить расчеты в режиме сильных корреляций вдали от границы фазового перехода металл-изолятор. Во-вторых,

- при помощи данного подхода становится возможным получать спектральные функции на действительных частотах, что позволяет проводить прямое сравнение расчетных данных с экспериментальными.
2. Определен минимально допустимый уровень дискретизации фермионного и бозонного резервуаров, позволяющий производить теоретические исследования методом точной диагонализации, при которых с хорошей точностью воспроизводятся результаты, полученные квантовым методом Монте-Карло.
 3. В результате проделанной работы был предложен сценарий экранирования кулоновского отталкивания на узле в режиме изолятора, что раньше было невозможно вследствие особенностей численных схем, основанных на методе квантового Монте-Карло.
 4. Впервые было показано, что учет корреляционных эффектов является важным и непренебрежимым при рассмотрении поверхностных sp -систем. Было показано, что основное состояние соединений C_2F и C_2H , определяемое приближением локальной электронной плотности как металлическое, при учете корреляций становится изоляторным.
 5. Впервые была построена фазовая диаграмма, характеризующая изменение границы фазового перехода металл - изолятор при учете зарядовых межузельных взаимодействий для поверхностных систем, описываемых расширенной моделью Хаббарда на треугольной решетке.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты, представленные в данной диссертации, могут быть использованы при моделировании экспериментально синтезируемых систем: оксидов переходных металлов и поверхностных наносистем, характеризующихся сильными электронными корреляциями. Численная схема, описанная в данной работе, реализована в виде библиотеки. Расширенная теория динамического среднего поля послужит отправной точкой для дальнейшего построения теорий, которые включают в себя пространственные корреляции, таких как метод дуальных бозонов [63].

Методология и методы исследования. В данной диссертационной работе для исследования влияния нелокальных взаимодействий на электронные и магнитные свойства материалов и модельных систем были использованы численный метод точной диагонализации и квантовый метод Монте-Карло для решения уравнений DMFT и EDMFT.

Основные положения, выносимые на защиту:

- Разработанный численный метод решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля может быть применен для изучения класса поверхностных материалов с *sp*-электронами, который характеризуется значительными нелокальными кулоновскими взаимодействиями.
- Анализ спектральных функций показывает, что для описания зарядовых межузельных взаимодействий в двумерных физических системах необходимо не менее двух, а в случае обменных достаточно трех эффективных уровней в бозонном резервуаре эффективной примесной модели расширенной теории динамического среднего поля.
- Определено, что при учете нелокального зарядового взаимодействия в двумерных физических системах экранирование локального кулоновского отталкивания нелинейно и в режиме изолятора мало относительно величины самого параметра.
- Решение реалистичных моделей, описывающих материалы C_2F и C_2H , показывает, что при учете электронных корреляций в рамках теории динамического среднего поля данные соединения являются изоляторами при низких температурах.

Степень достоверности Достоверность полученных методических и расчетных результатов обеспечивается их внутренним согласием, непротиворечивостью современным представлениям физики и соответствием результатам проводившихся ранее исследований. Результаты работы были опубликованы в международных рецензируемых журналах.

Апробация работы происходила на следующих конференциях всероссийского и международного уровней:

1. 9 международная конференция по компьютерной физике (Сингапур, 2015);
2. II Международная молодежная научная конференция «Физика. Технологии. Инновации. ФТИ – 2015» (Екатеринбург, Россия, 2015);
3. 12 встреча молодых ученых Европейского центра теоретической спектроскопии «Challenges in ab initio modelling of materials and molecules» (Париж, Франция, 2015);

4. Международный симпозиум и воркшоп «Electronic Structure Theory for the Accelerated Design of Structural Materials» (Москва, Россия, 2015);
5. XXXVI Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка» (Екатеринбург, Россия, 2016);
6. Международная конференция «Graphene2016» (Генуя, Италия, 2016);
7. III Международная молодежная научная конференция «Физика. Технологии. Инновации. ФТИ – 2016» (Екатеринбург, Россия, 2016);
8. Симпозиум «Ab-initio based modeling of advanced materials» (Екатеринбург, Россия, 2016);
9. Международный воркшоп «Big Ideas in Quantum Matter» (Наймерген, Нидерланды, 2017);
10. Летняя школа по теоретической физике «Базис» (Москва, Россия, 2018).

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, в ряде работ вклад диссертанта был определяющим. Результаты первопринципного моделирования были предоставлены Руденко А.Н. (Университет Радбоуда Утрехтского, Нидерланды), все представленные расчеты СТQМС были выполнены Фридрихом Крином (Университет Гамбурга, Германия), разработка расчетного комплекса для учета нелокальных обменных взаимодействий проводилась совместно с Исаковым С.Н., цикл самосогласования реализован лично автором, все модельные расчеты были выполнены лично автором.

Публикации. Материалы диссертационной работы опубликованы в 9 печатных работах, из них 2 - статьи в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК, 7 - тезисы докладов.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 118 страниц, из них 97 страниц текста, включая 37 рисунков. Библиография включает 232 наименования.

Глава 1. Обзор методов моделирования электронной структуры сильно коррелированных материалов

1.1 Квантовые решеточные модели

При теоретическом описании систем, состоящих из большого количества частиц, используется многочастичное уравнение Шредингера, которое имеет следующий вид:

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi(\mathbf{x}_1\ldots\mathbf{x}_N) = E\Psi(\mathbf{x}_1\ldots\mathbf{x}_N), \quad (1.1)$$

где $\hat{\mathcal{H}}$ - гамильтониан системы, E - собственные значения энергии системы, то есть значения, которые может принимать энергия системы, когда последняя находится в определенном состоянии, $\Psi(\mathbf{x}_1\ldots\mathbf{x}_N)$ - волновая функция, описывающая данное состояние, представляющее из себя собственный вектор (в матричной механике) уравнения (1.1), $\mathbf{x}_N$ - координаты частицы, N - число частиц в системе. В кристаллах электроны взаимодействуют друг с другом, двигаясь в поле ионных остовов, которые в свою очередь взаимодействуют между собой и колеблются около положения равновесия. Электроны намного легче ядер, таким образом, можно предположить, что движение электрона не связано с движением ядер. Исходя из этого, гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ системы можно разделить на две части и представить в виде:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}_{ee}, \quad (1.2)$$

где $\hat{\mathcal{H}}_0$ - невзаимодействующая часть гамильтониана, которая состоит из суммы кинетических энергий каждого отдельного электрона с учетом потенциала поля ионов решетки, $\hat{V}_{ee}$ - потенциальная энергия взаимодействия электронов друг с другом. Используя приближение Борна-Оппенгеймера и полагая что электроны движутся в поле неподвижных ионов решетки, гамильтониан (1.2) электронной системы может быть переписан в виде:

$$\hat{\mathcal{H}} = \underbrace{\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{x}}^2 + V_{ext}(\mathbf{x}_i) \right)}_{\text{движение электронов в поле ядер}} + \underbrace{e^2 \sum_{i<j} \frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}}_{\text{взаимодействие электронов}}, \quad (1.3)$$

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ - редуцированная постоянная Планка, m - масса электрона, ∇ - оператор Набла, $V_{ext}(\mathbf{x}_i)$ - потенциал ядер, в котором движется электрон, e - заряд электрона, $\mathbf{x}_i$ - радиус-вектор i -ого электрона в системе. Удобным способом описания систем, состоящих из большого количества частиц, является метод квантовой теории поля, который широко используется в физике конденсированного состояния вещества. Сложность описания многочастичных (анти)симметричных (фермионных) бозонных волновых функций для одинаковых частиц решается путем введения операторов, рождающих или уничтожающих частицу в данном состоянии. Однако, удобнее использовать *операторы поля* со следующими коммутационными отношениями:

$$\left[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \right]_{\substack{(+), \\ -}} = 0, \quad \left[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') \right]_{\substack{(+), \\ -}} = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (1.4)$$

где $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ - дельта-функция, которая возвращает 1 в случае, если $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$, и 0 в случае, если $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}'$, α, β - индексы спина или орбиталей, $+$ обозначает коммутатор и соответствует фермионным волновым функциям, а знак $-$ обозначает антикоммутатор и соответствует бозонным. Заменяя волновую функцию полевым оператором, действующим на квантовое поле с флуктуирующим числом частиц, а суммирование по частицам - интегрированием по пространству, гамильтониан системы может быть переписан в терминах вторичного квантования следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{x}}^2 + V_{ext}(\mathbf{x}) \right) \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\psi}_\delta(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\gamma(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (1.5)$$

Для удобства проведения численных расчетов было предложено использовать *функции Ванье* [64–68]. Данные функции локализованы на узлах с координатами $\mathbf{X}_i$ и могут быть представлены как

$$\phi_{i\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{X}_i} \psi_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{x}), \quad (1.6)$$

где $\psi_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{x})$ - функции Блоха для невзаимодействующего гамильтониана, α - индекс спина и орбиталей. Полевой оператор переписывается в виде $\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) = \sum_i \phi_{i\alpha}(\mathbf{x}) c_{i\alpha}$.

Таким образом, от гамильтониана (1.3) мы приходим к *гамильтониану квантовой решеточной модели*

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} t_{ij}^{\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta}^\dagger c_{l\delta} c_{k\gamma}, \quad (1.7)$$

где матричные элементы интеграла перескока $t_{ij}^{\alpha\beta}$ и полной матрицы взаимодействия $U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta}$ вычисляются следующим образом:

$$t_{ij}^{\alpha\beta} = \int d\mathbf{x} \phi_{i\alpha}^*(\mathbf{x} - \mathbf{X}_i) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{x}}^2 + V_{ext}(\mathbf{x}) \right) \phi_{j\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_j),$$

$$U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} = e^2 \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{\phi_{i\alpha}^*(\mathbf{x} - \mathbf{X}_i) \phi_{j\beta}^*(\mathbf{x}' - \mathbf{X}_j) \phi_{k\gamma}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_k) \phi_{l\delta}(\mathbf{x}' - \mathbf{X}_l)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad (1.8)$$

здесь $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ - индексы орбиталей, i, j, k, l - индексы узлов. Уравнение (1.7) представляет общий вид гамильтониана для описания квантовой решеточной модели.

В 1963 году Джон Хаббард (John Hubbard) предложил модель для изучения движения электронов проводимости в переходных $3d$ -металлах. В этих элементах радиальная волновая функция $3d$ -электронов имеет очень малую пространственную протяженность. Когда $3d$ -оболочка занята несколькими электронами, частицы вынуждены находиться близко друг к другу, в результате чего электростатическая энергия сильно увеличивается. Поэтому энергия иона переходного металла сильно изменяется в зависимости от количества содержащихся в нем электронов. Вырождение $3d$ -орбитали и наличие других энергетических зон в твердом теле не учитываются. В итоге, рассматривается решетка с одной s -подобной орбиталью на каждом узле [69].

Таким образом, **гамильтониан модели Хаббарда** в формализме второго квантования может быть представлен следующим образом [70; 71]:

$$H_{\text{latt}} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1.9)$$

где t_{ij} является интегралом перескока между узлами решетки i и j , $c_{i\sigma}^\dagger$ и $c_{i\sigma}$ операторы рождения и уничтожения электрона со спином σ на узлах i и j соответственно, U – параметр локального кулоновского взаимодействия (на узле). Модель Хаббарда является минимальной моделью, в которой возможен учет сильных электрон-электронных корреляций, на рисунке 1.1 приведено ее схематическое представление. Использование такой модели напрямую для описания реальных материалов ограничивается вычислительными мощностями расчетных машин, так как количество учитываемых атомов решетки становится огромным. Приближенное решение модели Хаббарда бесконечной размерности возможно в рамках *теории динамического среднего поля*, речь о которой пойдет ниже.

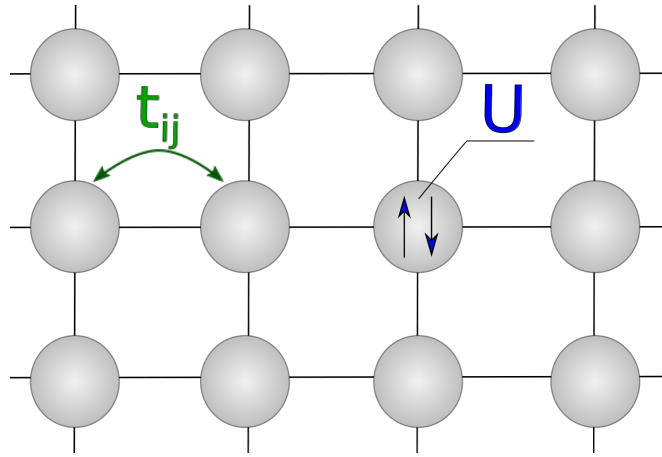


Рисунок 1.1 — Схематическое представление модели Хаббарда на квадратной решетке.

Здесь t_{ij} - значение интеграла перескока электрона между узлами i и j , U - величина кулоновского отталкивания, возникающая в случае, если на узле находятся одновременно два электрона.

Все взаимодействия электронов (на узле или между узлами) записываются в полной матрице кулоновских взаимодействий U_{ijkl} (орбитальные индексы опущены). Дж. Хаббардом был произведен анализ оценочных величин локального (на узле) и нелокальных (межузельных) кулоновских взаимодействий для $3d$ -переходных металлов, которые представлены в таблице 1.1. В диссертационном исследовании наибольший интерес представляют элементы U_{ijij} , соответствующие межузельному кулоновскому взаимодействию между ближайшими соседями в пределах первой координационной сферы, которое будет рассмотрено далее в рамках расширенной теории динамического среднего поля. Из таблицы 1.1 можно видеть, что величина U_{ijij} значительно превышает значения других нелокальных взаимодействий. Элемент U_{ijji} представляет собой обменное взаимодействие, поскольку соответствующая комбинация операторов рож-

Таблица 1.1 — Оценочные значения нелокальных кулоновских взаимодействий для $3d$ -переходных металлов [10].

U_{iii}	20 эВ
U_{ijij}	6 эВ
U_{iiij}	$\frac{1}{2}$ эВ
U_{ijik}	$\frac{1}{10}$ эВ
U_{iijj}	$\frac{1}{40}$ эВ
U_{ijji}	$\frac{1}{40}$ эВ

дения и уничтожения может быть сведена к комбинации спиновых операторов $\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j$. Для соединений переходных металлов оно мало вследствие сильной локализации активных частично заполненных магнитных орбиталей на атомах. Однако, в случае рассматриваемых в данной диссертации материалов с s - и p -электронами, играет важную роль, конкурирует с кинетическим обменным взаимодействием, обусловленным процессами переноса электронов с узла на узел, и не является пренебрежимо малым. В результате, было предложено ограничить полную матрицу кулоновских взаимодействий только локальными элементами [10; 72].

Недавние исследования показали, что отношение между величинами параметров локального U и нелокального U_{ijij} кулоновских взаимодействий оказывает влияние на многие свойства основного состояния коррелированного материала. Примерами могут являться формирование режимов зарядовой и спиновой плотности [73], магнитный порядок [74; 75], возникновение возможного разделения фаз [76]. В работах [77; 78] было определено, что межузельное взаимодействие (между d состояниями) является важным при определении основного состояния в фазе зарядового упорядочения в смешанных валентных системах. Поэтому для подобных систем необходимо использовать **расширенную модель Хаббарда**. Ее применение также весьма широко: от изучения проводимости и структурных свойств электропроводящих сопряженных полимеров (conjugated polymers) [79] и углеродных наноструктур до моделирования графеновых нанолент в зависимости от параметров взаимодействия [80].

Расширенная модель Хаббарда с учетом нелокальных зарядовых и обменных взаимодействий схематически представлена на рисунке 1.2 и задается га-

МИЛЬТОНИАНОМ

$$H = \underbrace{\sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}}_{H_{\text{кин}}} + U \underbrace{\sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}_{H_{\text{пот}}} + \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} n_i n_j + \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j}_{H_{\text{спин}}}, \quad (1.10)$$

где t_{ij} является интегралом перескока между узлами решетки i и j , $c_{i\sigma}^\dagger$ и $c_{i\sigma}$ операторы рождения и уничтожения электрона со спином σ на узле i соответственно. U – параметр локального кулоновского взаимодействия, V_{ij} является параметром нелокального взаимодействия между зарядами $n_i = \sum_\sigma c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ на различных узлах i и j , параметр J_{ij} характеризует взаимодействие спинов на узлах решетки i и j , $\mathbf{S}_i = \sum_{\sigma\sigma'} (c_{i\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma,\sigma'} c_{i\sigma'})$ является оператором спина и каждая компонента представляется в следующем виде:

$$\begin{aligned} S_i^z &= \frac{1}{2} \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \right) \\ S_i^x &= \frac{1}{2} \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \right) \\ S_i^y &= \frac{1}{2i} \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \right). \end{aligned} \quad (1.11)$$

Расширенная модель Хаббарда обычно рассматривается с отталкивающим взаимодействием, то есть при величинах параметров $V_{ij} > 0$ и $U > 0$. Данный выбор объясняется физическими соображениями, поскольку кулоновские взаимодействия между электронами являются отталкивающими. Использование данной модели мотивировано тем, что сильное отталкивание между ближайшими соседями приводит к формированию зарядового упорядочения. Граница фазового перехода из состояния ферми-жидкости в фазу зарядового упорядочения была определена в ряде работ [81–93] и является согласованным результатом. Воспроизведение данной границы служит хорошим способом проверки новых численных схем. В режиме взаимодействия, когда электроны притягиваются (при $V < 0$), фазовый переход представляет собой переход в фазу разделения состояний с высокой и низкой зарядовой плотностью [89; 94]. С точки зрения экспериментальной физики, расширенная модель Хаббарда с учетом притягивающих электронных взаимодействий реализована в исследованиях ультрахолодных атомов [95], а также при изучении конденсированного состояния вещества [96–98].

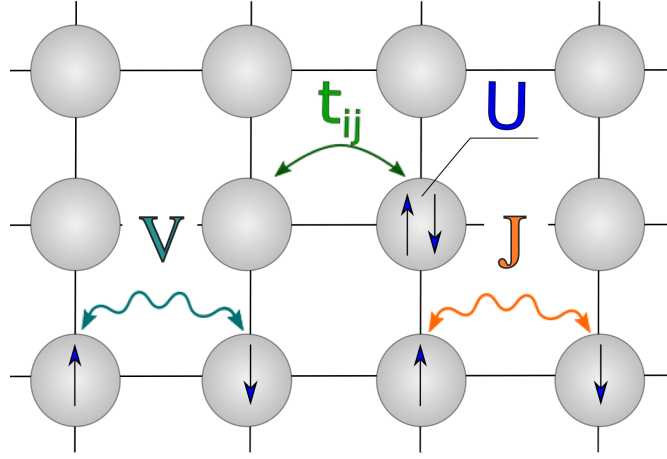


Рисунок 1.2 — Схематическое представление расширенной модели Хаббарда. Здесь t_{ij} — значение интеграла перескока электрона между узлами i и j , U — величина кулоновского отталкивания, возникающая в случае, если на узле находятся одновременно два электрона, V — кулоновское и J — обменное нелокальное (межузельное) взаимодействия.

1.2 Методы решения квантовых электронных гамильтонианов

1.2.1 Теория динамического среднего поля

Теория динамического среднего поля (Dynamical Mean-Field Theory, DMFT) [48; 99] может быть представлена как квантовый аналог классических теорий поля, использующих приближённое описание эффектов многочастичных взаимодействий в задачах многих тел. Основная идея данной теории состоит в том, чтобы сосредоточиться на некотором узле решетки и оценить эффективное поле, создаваемое другими узлами [6]. Вывод уравнения действия, по аналогии с классическим случаем, в результате дает нетривиальную теорию среднего поля, полностью учитывающую локальные временные квантовые флуктуации, что и определяет «динамику» в данной теории [32].

DMFT основывается на отображении квантовой решеточной задачи, рассматривающей только локальные взаимодействия электронов, на эффективную примесную модель. Предполагается, что отдельный узел решетки можно описать как существующий в некотором среднем динамическом фермионном поле, создаваемым окружающими узлами. *Результатом является согласованное решение модели Хаббарда, в процессе получения которого итеративно определенным образом подбираются параметры эффективной примесной модели.* Итоговые функции, описывающие примесь, и функции, характеризующие отдельный

узел решетки, должны совпадать с заданной точностью. Примесная модель в данном контексте используется в качестве вспомогательного инструмента и называется *эффективной примесной моделью Андерсона*.

Примесная модель Андерсона

Изначально примесная модель Андерсона (Anderson Impurity Model, AIM) была разработана для изучения примесей с частично заполненной d -оболочкой (таких как Fe, Co и Ni) в немагнитных металлах [100; 101]. Модель предполагает наличие таких объектов как, непосредственно, примесь и фермионный невзаимодействующий резервуар, образованный электронами проводимости. Предполагается, что электроны взаимодействуют друг с другом только на орбиталях примеси и не взаимодействуют в резервуаре. С течением времени данная модель получила широкое распространение и была применена при описании разного рода систем: от адатомов на металлических подложках [102] до квантовых точек в равновесном и неравновесном состояниях [103] и при изучении Кондо эффекта [3].

Решение модели Андерсона является квантовой многочастичной задачей, в которой гильбертово пространство растет экспоненциально с увеличением числа степеней свободы задачи. Например, при увеличении количества орбиталей примеси необходимо учитывать намного больше возможных переходов электрона: из резервуара на примесную орбиталь, между орбиталями примеси и так далее. Из-за возрастающего количества параметров модели, ее решение становится нетривиальным. Используя модель Андерсона в качестве эффективной примесной модели, ее гамильтониан может быть представлен в виде

$$H = \underbrace{\sum_{\sigma} \varepsilon_0 d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}}_{\text{примесь}} + U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} + \underbrace{\sum_{k,\sigma} (\mathcal{V}_k d_{\sigma}^{\dagger} f_{k\sigma} + h.c.)}_{\text{гибридизация}} + \underbrace{\sum_{k,\sigma} \varepsilon_k f_{k\sigma}^{\dagger} f_{k\sigma}}_{\text{резервуар}}, \quad (1.12)$$

где ε_0 и ε_k являются энергетическими уровнями примеси и фермионного резервуара соответственно; $d_{\sigma}^{\dagger} (d_{\sigma})$ определяют оператор рождения (уничтожения) фермиона со спином σ на примеси; $f_{k\sigma}^{\dagger} (f_{k\sigma})$ – аналогичные операторы фермион-

ного резервуара; $n_{0\sigma} = d_{\sigma}^{\dagger}d_{\sigma}$ – оператор числа частиц на примесном уровне; $\mathcal{V}_k$ – параметр, характеризующий переход между примесью и эффективными уровнями резервуара. В общем случае количество орбиталей примеси может быть сколь угодно большим, но в данной работе рассматривается одноорбитальная примесная модель (рисунок 1.3), которая на уровне теории динамического среднего поля позволяет описывать соединения, в электронном спектре которых наблюдается хорошо отделенная зона на уровне Ферми.



Рисунок 1.3 — Схематическое представление одноорбитальной примесной модели Андерсона. Здесь ϵ_k – энергетические уровни фермионного резервуара, ϵ_0 – энергия орбитали примеси, $\mathcal{V}_k$ – параметр гибридизации, характеризующий переход электрона между примесью и эффективными уровнями резервуара.

Цикл самосогласования в теории динамического среднего поля

Цикл согласования квантовой решеточной и эффективной примесной моделей может быть реализован в двух вариантах, один из которых предполагает *пересчет собственно-энергетической части энергии*. В качестве стартового может быть выбран невзаимодействующий предел, в котором задается $\Sigma(i\omega_m) = 0$. Общий вид формулы, по которой рассчитывается решеточная функция Грина, выглядит следующим образом:

$$G(i\omega_m, \mathbf{k}) = \frac{1}{i\omega_m + \mu - t(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega_m)}, \quad (1.13)$$

где $\omega_m = (2m + 1)\pi/\beta$ - фермионные мацубаровские частоты, β - обратная температура, $\mathbf{k}$ -вектор в обратном пространстве, μ - химический потенциал, $\Sigma(i\omega_m)$ - собственно-энергетическая часть, которая несет информацию об электронных корреляциях на узле. Локальная функция Грина может быть получена суммированием (интегрированием) по всем $\mathbf{k}$ -точкам в первой зоне Бриллюэна:

$$G_{loc}(i\omega_m) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G(i\omega_m, \mathbf{k}), \quad (1.14)$$

где N - количество k -точек. Из уравнения Дайсона

$$\mathcal{G}^{-1}(i\omega_m) = \Sigma(i\omega_m) + G_{loc}^{-1}(i\omega_m) \quad (1.15)$$

восстанавливается поле Вейсса $\mathcal{G}(i\omega_m)$, описывающее динамику переходов электрона между резервуаром и примесью и используемое при решении примесной задачи. Новое значение собственно-энергетической части определяется из уравнения Дайсона. Далее повторяется расчет локальной решеточной функции Грина, и, таким образом, итерация заканчивается.

Для того, чтобы улучшить сходимость, новые (с индексом *new*) и старые (с индексом *old*) функции поля Вейсса смешиваются. Для большинства случаев линейное смешивание является достаточным и представляется формулой

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{new}^{-1}(i\omega_m) &= (1 - \xi)\mathcal{G}_{old}^{-1}(i\omega_m) + \xi[\Sigma(i\omega_m) + G_{loc}^{-1}(i\omega_m)] = \\ &= \mathcal{G}_{old}^{-1}(i\omega_m) + \xi[\Sigma(i\omega_m) + G_{loc}^{-1}(i\omega_m) - \mathcal{G}_{old}^{-1}(i\omega_m)]. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Параметр смешивания $\xi > 0$ контролирует отношение старой и новой функции поля Вейсса, входящей в следующую итерацию. При слишком малом ξ сходимость может замедляться, в то время как при слишком большом ξ могут возникать колебания вокруг согласованного решения. Разумным выбором значения параметра является $\xi = 0.7 - 0.9$ [32]. При согласованном решении старая и новая собственно-энергетические части совпадают с заданной точностью. Полагая $\Sigma_{old} = \Sigma_{new}$, уравнение (1.16) переписывается в виде

$$\mathcal{G}_{new}^{-1}(i\omega_m) = \mathcal{G}_{old}^{-1}(i\omega_m) - \xi[G(i\omega_m) - g_{old}^{-1}(i\omega_m)], \quad (1.17)$$

где $g_{old}^{-1}(i\omega_m) = \mathcal{G}_{old}(i\omega_m) - \Sigma_{old}(i\omega_m)$ - функция Грина примеси. Критерием завершения цикла является получение согласованного решения, в котором с заданной точностью $g(i\omega_m) \approx G_{loc}(i\omega_m)$.

Второй вариант построения решения уравнений динамического среднего поля основывается на *пересчете гибридизационной функции*. Используя замену

$$g^{-1}(i\omega_m) = i\omega_m + \mu - \Delta(i\omega_m) - \Sigma(i\omega_m), \quad (1.18)$$

где $\Delta(i\omega_m)$ - гибридизационная функция примеси с фермионным резервуаром, уравнение (1.13) переписывается в виде

$$G(i\omega_m, \mathbf{k}) = \frac{1}{g^{-1}(i\omega_m) + \Delta(i\omega_m) - t(\mathbf{k})}. \quad (1.19)$$

Новая гибридизационная функция при помощи *линейного смешивания* может быть получена следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta_{new}(i\omega_m) &= (1 - \xi)\Delta_{old}(i\omega_m) + \xi[i\omega_m + \mu - t(\mathbf{k}) - \Sigma_{old}(i\omega_m) - G^{-1}(i\omega_m)] = \\ &= \Delta_{old}(i\omega_m) + \xi[g^{-1}(i\omega_m) - G^{-1}(i\omega_m)]. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Далее, как и в первом случае, рассчитывается функция поля Вейсса

$$\mathcal{G}_{new}^{-1}(i\omega_m) = i\omega_m + \mu - \Delta_{new}(i\omega_m). \quad (1.21)$$

Схематически описываемый цикл представлен на рисунке 1.4. Оба подхода для построения цикла согласования являются эквивалентными и приводят к одному решению. Стартовое значение гибридизационной функции $\Delta_{init}(i\omega_m)$, соответствующее случаю $\Sigma(i\omega_m) = 0$, может быть вычислено по формуле

$$\Delta_{init}(i\omega_m) = i\omega_m + \mu - G_{0,loc}^{-1}(i\omega_m), \quad (1.22)$$

где $G_{0,loc}(i\omega_m)$ - локальная функция Грина решетки при $\Sigma(i\omega_m) = 0$.

В зависимости от выбранного численного метода для решения примесной задачи цикл согласования будет отличаться способом обработки данных для новой итерации. Общий вид цикла согласования схематически представлен на рисунке 1.4.

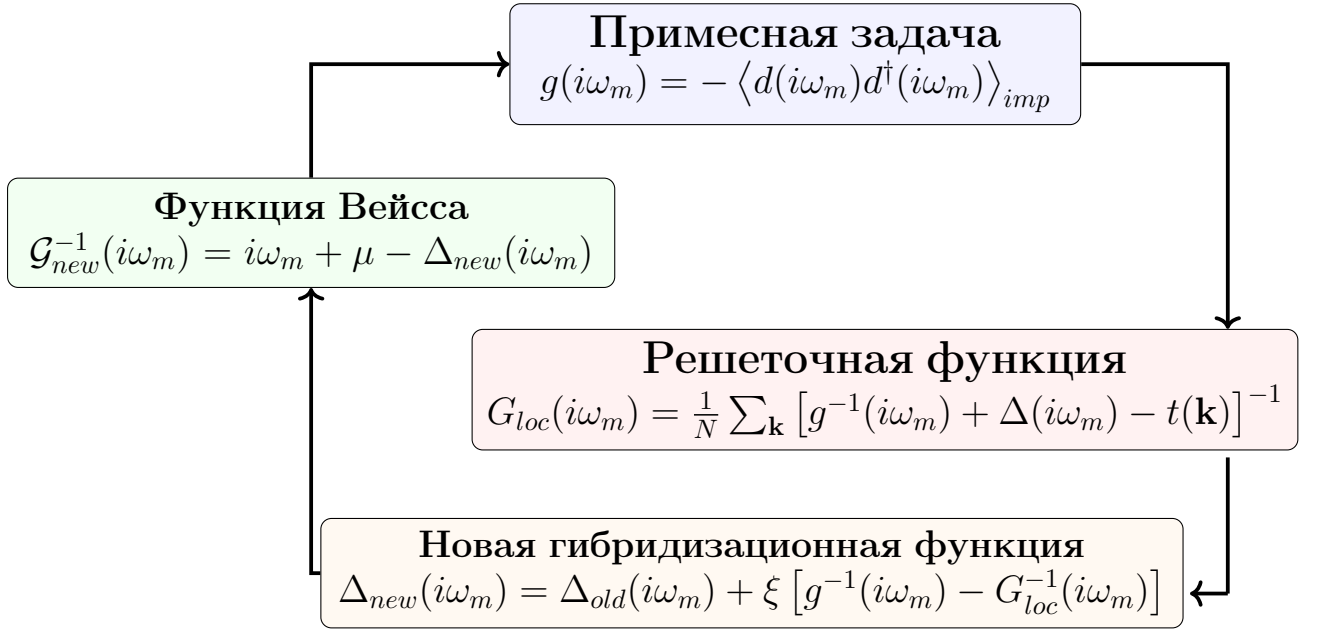


Рисунок 1.4 — Схематическое представление цикла согласования модели Хаббарда и эффективной одноузельной примесной модели Андерсона для решения уравнений теории динамического среднего поля, основанного на пересчете функции гибридизации.

1.2.2 Расширенная теория динамического среднего поля

Как можно видеть из описания, в теории динамического среднего поля корреляции и взаимодействия между электронами исключительно локальны. Другими словами, DMFT можно представить как теорию, в которой замораживаются пространственные флуктуации [104]. Для их учета необходимо использовать расширенную модель Хаббарда (1.10), решение которой может быть получено при помощи расширенной теории динамического среднего поля (Extended Dynamical Mean-Field Theory, EDMFT). Идея EDMFT была разработана и использована при изучении систем с нелокальным кулоновским взаимодействием [52; 53], спиновых стекол [49; 50] и тяжелых фермионов [54–56].

Эффективная примесная модель

В расширенной теории динамического среднего поля в качестве эффективной примесной используется модель [105], которая описывается гамильтонианом (1.23) и схематически представлена на рисунке 1.5.

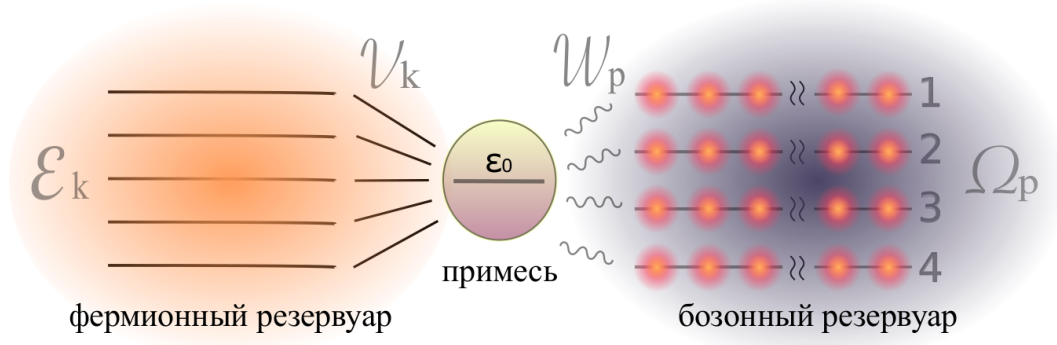


Рисунок 1.5 — Схематическое представление эффективной примесной модели в расширенной теории динамического среднего поля. Здесь ε_k , ε_0 , Ω_p - энергетические уровни фермионного резервуара, примеси и бозонного резервуара, соответственно; $\mathcal{V}_k$, $\mathcal{W}_p$ - взаимодействие между примесью и эффективными уровнями фермионного и бозонного резервуаров, соответственно.

$$H_{\text{imp}} = \sum_{\sigma} \varepsilon_0 d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} + \sum_{k\sigma} (\mathcal{V}_k d_{\sigma}^{\dagger} f_{k\sigma} + h.c.) + \underbrace{\sum_{k,\sigma} \varepsilon_k f_{k\sigma}^{\dagger} f_{k\sigma} + \sum_p \Omega_p b_p^{\dagger} b_p + \sum_p \mathcal{W}_p \mathbf{O}(b_p^{\dagger} + b_p)}_{\text{бозонная часть}}, \quad (1.23)$$

здесь сохранены обозначения, использованные в уравнении (1.12). Объектом в примесной модели, который описывает нелокальные взаимодействия в расширенной модели Хаббарда, является бозонный резервуар. Символом $b_p^{\dagger} (b_p)$ обозначен оператор рождения (уничтожения) бозона с энергией (частотой) Ω_p на энергетическом уровне p . $\mathcal{W}_p$ описывает взаимодействие между бозонным уровнем и орбиталью примеси. Оператор $\mathbf{O} = (\bar{n}_0, \bar{S}^z, \bar{S}^x, \bar{S}^y)$, где $\bar{n}_0 = \sum_{\sigma} (n_{0\sigma} - \langle n_{0\sigma} \rangle)$ описывает флуктуации зарядовой плотности примеси, $\bar{S}^{\nu} = S^{\nu} - \langle S^{\nu} \rangle$ - спиновые флуктуации, здесь $S^{\nu} = \sum_{\alpha\alpha'} (d_{\alpha}^{\dagger} \sigma_{\alpha,\alpha'}^{\nu} d_{\alpha'})$ (в данном случае α и α' - спиновые индексы, σ^{ν} - матрицы Паули).

1.2.3 Цикл согласования расширенной теории динамического среднего поля

В случае EDMFT цикл согласования выполняется для двух величин: одночастичной (фермионный пропагатор) и двучастичной (восприимчивость, функция отклика системы) функций Грина. Схематически цикл согласования для

решения EDMFT на основе переопределения гибридизационных функций представлен на рисунке 1.6.

В данном случае были определены функция Грина примесной модели и локальная часть (connected part) зарядовой восприимчивости расширенной модели Хаббарда, представленной гамильтонианом (1.10). Корреляционные функции гамильтониана эффективной примесной модели (1.23) определяются как

$$\begin{aligned} g_\sigma(i\omega_m) &= -\langle d_\sigma(i\omega_m)d_\sigma^\dagger(i\omega_m) \rangle_{imp}, \\ X(i\nu_m) &= -\langle \mathbf{O}(i\nu_m)\mathbf{O}(i\nu_m) \rangle_{imp}, \end{aligned} \quad (1.24)$$

где индекс *imp* обозначает больцмановское усреднение в примесной модели; $d_\sigma^\dagger$ (d_σ) – оператор рождения (уничтожения) электрона на орбитали примеси. Здесь $\nu_m = 2m\pi/\beta$ – бозонные мацубаровские частоты, β – обратная температура. Спиновый индекс σ в функции Грина опускается и рассматривается только парамагнитное решение. В соответствии с вышеописанными определениями,

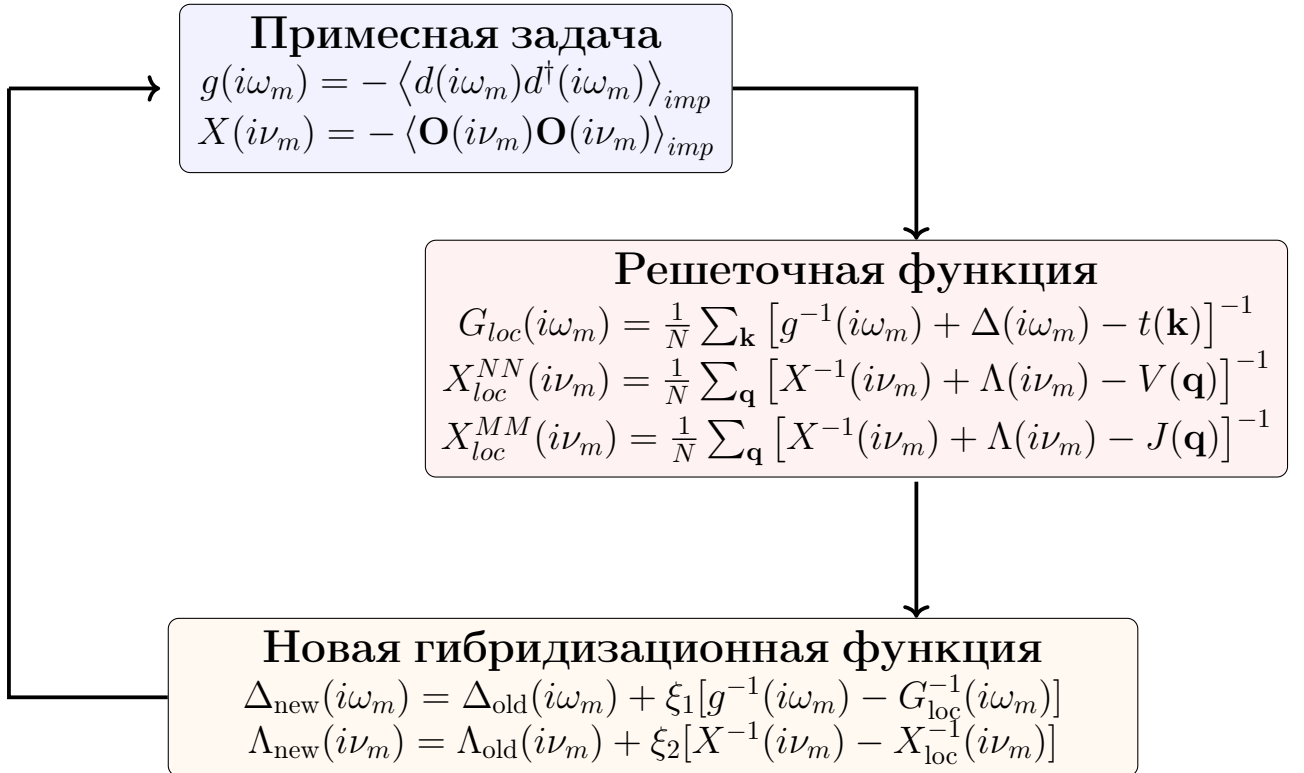


Рисунок 1.6 — Схематическое представление цикла согласования расширенной модели Хаббарда для метода точной диагонализации.

уравнения для локальных решеточных функций в результате принимают вид:

$$\begin{aligned} G_{\text{loc}}(i\omega_m) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [g^{-1}(i\omega_m) + \Delta(i\omega_m) - t(\mathbf{k})]^{-1}, \\ X_{\text{loc}}^{NN}(i\nu_m) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} [X^{-1}(i\nu_m) + \Lambda(i\nu_m) - V(\mathbf{q})]^{-1}, \\ X_{\text{loc}}^{MM}(i\nu_m) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} [X^{-1}(i\nu_m) + \Lambda(i\nu_m) - J(\mathbf{q})]^{-1}, \end{aligned} \quad (1.25)$$

где N – число k -точек. Для данных выражений необходимо ввести Фурье преобразования для величины интеграла перескока электронов $t(\mathbf{k})$ и нелокальных параметров взаимодействия $V(\mathbf{q})$ и $J(\mathbf{q})$ расширенной модели Хаббарда (1.10), соответственно.

Для решения уравнений EDMFT (1.25) гибридизационные функции Δ и Λ должны изменяться в ходе согласования. Подбираются стартовые значения для Δ и Λ , после чего решается примесная задача (1.23). Новые гибридизационные функции могут быть получены при помощи формул

$$\Delta_{\text{new}}(i\omega_m) = \Delta_{\text{old}}(i\omega_m) + \xi_1 [g^{-1}(i\omega_m) - G_{\text{loc}}^{-1}(i\omega_m)], \quad (1.26)$$

$$\Lambda_{\text{new}}(i\nu_m) = \Lambda_{\text{old}}(i\nu_m) + \xi_2 [X^{-1}(i\nu_m) - X_{\text{loc}}^{-1}(i\nu_m)], \quad (1.27)$$

где $0 < \xi_1 \leq 1$, $0 < \xi_2 \leq 1$ – параметр смешивания, контролирующий сходимость, задается произвольно, ближе к согласованному решению должен быть уменьшен. Примесная модель решается итеративно, данный процесс повторяется до получения согласованного решения, когда

$$\begin{aligned} g(i\omega_m) &\approx G_{\text{loc}}(i\omega_m), \\ X(i\nu_m) &\approx X_{\text{loc}}(i\nu_m). \end{aligned} \quad (1.28)$$

В контексте DMFT идея отображения сплошного спектра на дискретный была описана в работе [106]. В формуле (1.29) представлено отображение фермионной гибридизационной функции на дискретную функцию ограничением числа уровней в фермионном резервуаре K . Аналогично происходит отображение бозонной гибридизационной функции Λ с ограничением числа уровней в

бозонном резервуаре P в уравнении (1.30).

$$\Delta(i\omega_m) \approx \sum_{k=1}^K \frac{|\mathcal{V}_k|^2}{i\omega_m - \varepsilon_k} \quad (1.29)$$

$$\Lambda(i\nu_m) \approx \sum_{p=1}^P \frac{2|\mathcal{W}_p|^2 \Omega_p}{(i\nu_m)^2 - \Omega_p^2} \quad (1.30)$$

После проведения перерасчета новых гибридизационных функций, производится расчет новых параметров ε_k ; $\mathcal{V}_k$ и Ω_p ; $\mathcal{W}_p$, являющихся стартовыми для следующей итерации.

1.2.4 Численные методы решения эффективных примесных моделей

На данный момент существует несколько алгоритмов, позволяющих получить численное решение эффективной примесной задачи Андерсона: квантовый метод Монте-Карло (Quantum Monte Carlo, QMC) [107], метод точной диагонализации (Exact Diagonalization, ED) [108], итеративная теория возмущений (Iterative Perturbation Theory, IPT) [109] и метод ренорм-групп (Numerical Renormalization Group, NRG) [48]. Ниже представлено описание численных методов, использованных в данной работе: метод точной диагонализации, квантовый метод Монте-Карло на непрерывном времени (Continuous-time Quantum Monte Carlo, CTQMC).

Метод точной диагонализации

В случае точной диагонализации рассчитываются собственные векторы и собственные значения матрицы гамильтониана примесной задачи (1.12). Для этого непрерывный спектр плотности состояний приближается некоторым дискретным набором энергетических уровней, что схематически представлено на

рисунке 1.7. Основное ограничение данного метода заключается в количестве

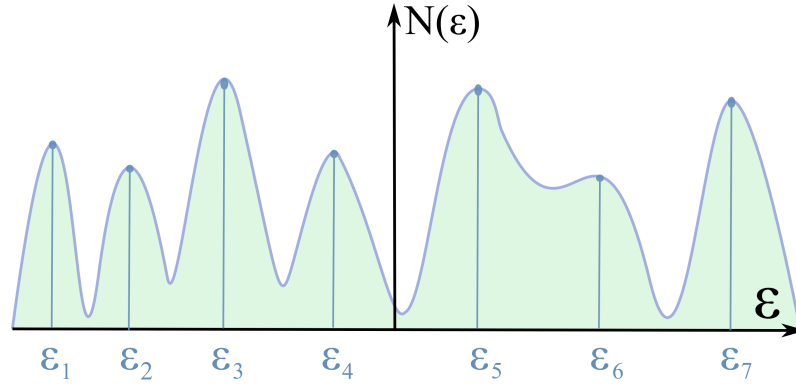


Рисунок 1.7 — Схематическое представление дискретизации сплошного энергетического спектра дискретным набором уровней.

используемых орбиталей: размерность задачи напрямую связана с количеством энергетических уровней.

Для объяснения работы метода ниже рассмотрена фермионная система, состоящая из N_i орбиталей примеси и N_c уровней резервуара. В базисе чисел заполнения состояние системы будет описываться вектором следующего вида:

$$|\psi\rangle = |n_{1i}^\uparrow, \dots, n_{N_i}^\uparrow, n_{1c}^\uparrow, \dots, n_{N_c}^\uparrow, n_{1i}^\downarrow, \dots, n_{N_i}^\downarrow, n_{1c}^\downarrow, \dots, n_{N_c}^\downarrow\rangle, \quad (1.31)$$

где $n = 0, 1$ - число заполнения для фермионов. Крайне важно учитывать симметрию системы. В данном случае необходимо, чтобы суммарный спин системы S_z и общее число частиц $\langle N \rangle = \langle N_\uparrow \rangle + \langle N_\downarrow \rangle$ и соответствующие операторы коммутировали с гамильтонианом:

$$[N_\uparrow, H] = [N_\downarrow, H] = [S^z, H] = 0. \quad (1.32)$$

Из этого условия следует, что не происходит перемешивания состояний с разным числом частиц и разными значениями общего спина. $N_\uparrow, N_\downarrow$ и S^z определяют симметричный сектор. В результате матрица гамильтониана будет иметь блочно-диагональный вид. С точки зрения численной реализации такая структура является удобной, так как каждый блок можно диагонализировать отдельно. В зависимости от рассматриваемой задачи может быть учтена дальнейшая симметрия, например, трансляционная, и сохранение импульса в периодическом кластере [32]. Процедура построения фермионного гильбертова пространства была представлена в работе [108].

Для описания заполнения матрицы гамильтониана можно рассмотреть простой случай для одной орбитали примеси ($N_i = 1$) и одной орбитали фермионного резервуара ($N_c = 1$). В результате, гамильтониан (1.12) принимает вид

$$H = \varepsilon_0(n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow}) + Un_{0\uparrow}n_{0\downarrow} + V \left(d_{\uparrow}^{\dagger}f_{\uparrow} + d_{\downarrow}^{\dagger}f_{\downarrow} \right) + V^* \left(f_{\uparrow}^{\dagger}d_{\uparrow} + f_{\downarrow}^{\dagger}d_{\downarrow} \right) + \varepsilon_1(n_{1\uparrow} + n_{1\downarrow}), \quad (1.33)$$

где ε_0 - энергия примесного уровня, и ε_1 - энергия эффективной орбитали фермионного резервуара, $d^{\dagger}(d)$ - оператор рождения (уничтожения) на орбитали примеси, $f^{\dagger}(f)$ - оператор рождения (уничтожения) на фермионном уровне, $n_{0\uparrow(\downarrow)} = d_{0\uparrow(\downarrow)}^{\dagger}d_{0\uparrow(\downarrow)}$ - оператор числа частиц на примесном уровне, $n_{1\uparrow(\downarrow)} = f_{1\uparrow(\downarrow)}^{\dagger}f_{1\uparrow(\downarrow)}$ - на фермионном, V - параметр энергии при перескоке электрона из резервуара на орбиталь примеси, V^* - параметр энергии при перескоке электрона с орбитали примеси обратно в резервуар. В данном случае набор базисных состояний представляет из себя все возможные конфигурации заполнения электронами орбиталей в системе и выглядит так, как представлено в таблице 1.2. Двоичное представление, описанное в таблице, соответствует представленному в формуле (1.31), и для рассматриваемой задачи выглядит следующим образом

$$|\psi\rangle = |\underbrace{\text{примесь, резервуар}}_{\text{спин } \uparrow}, \underbrace{\text{примесь, резервуар}}_{\text{спин } \downarrow}\rangle. \quad (1.34)$$

Наличие электрона с определенным спином на конкретной орбитали обозначается 1, в случае отсутствия ставится 0. В итоге, каждую конфигурацию можно представить в виде двоичной записи. Также базисные векторы группируются по суммарному спину и количеству частиц, в результате формируются блоки, помеченные в таблице определенным номером. В итоге матрица гамильтониана будет иметь блочно-диагональный вид (рисунок 1.8), что позволяет обрабатывать каждый блок независимо.

Таблица 1.2 — Представление в двоичной системе счисления базисных состояний системы, состоящей из двух орбиталей, представленной уравнением (1.33).

Блок	Конфигурация	Двоичное представление	Блок	Конфигурация	Двоичное представление
1	$ \emptyset, \emptyset\rangle$	$ 0000\rangle$	5	$ \uparrow, \downarrow\rangle$	$ 1001\rangle$
4	$ \emptyset, \downarrow\rangle$	$ 0001\rangle$	5	$ \downarrow, \uparrow\rangle$	$ 0110\rangle$
4	$ \downarrow, \emptyset\rangle$	$ 0010\rangle$	5	$ \uparrow\downarrow, \emptyset\rangle$	$ 1010\rangle$
8	$ \downarrow, \downarrow\rangle$	$ 0011\rangle$	5	$ \emptyset, \uparrow\downarrow\rangle$	$ 0101\rangle$
3	$ \emptyset, \uparrow\rangle$	$ 0100\rangle$	6	$ \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle$	$ 1101\rangle$
3	$ \uparrow, \emptyset\rangle$	$ 1000\rangle$	7	$ \downarrow, \uparrow\downarrow\rangle$	$ 0111\rangle$
2	$ \uparrow, \uparrow\rangle$	$ 1100\rangle$	6	$ \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle$	$ 1110\rangle$
9	$ \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle$	$ 1111\rangle$	7	$ \uparrow\downarrow, \downarrow\rangle$	$ 1101\rangle$

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_0 + \varepsilon_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_0 & V & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V^* & \varepsilon_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_0 & V & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & V^* & \varepsilon_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U + 2\varepsilon_0 & V & V & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V^* & \varepsilon_0 + \varepsilon_1 & 0 & V & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V^* & 0 & \varepsilon_0 + \varepsilon_1 & V & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V^* & 2\varepsilon_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U + 2\varepsilon_0 + \varepsilon_1 & V & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V^* & \varepsilon_0 + 2\varepsilon_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U + 2\varepsilon_0 + \varepsilon_1 & V & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V^* & \varepsilon_0 + 2\varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_0 + \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U + 2\varepsilon_0 + 2\varepsilon_1 \end{pmatrix}$$

Рисунок 1.8 — Матрица гамильтониана (1.33) упрощенной эффективной примесной модели Андерсона.

Квантовый метод Монте-Карло

Под QMC понимается семейство методов, используемых для исследования квантовых задач с большим количеством частиц. Для решения данным методом одноузельная примесная модель Андерсона может быть представлена следующим эффективным действием на мнимом времени:

$$S_{eff} = - \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_{\sigma} c_{\sigma}(\tau) \Delta_{\sigma}(\tau - \tau') c_{\sigma}^{\dagger}(\tau') - \int_0^\beta d\tau [\mu(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) - U n_{\uparrow} n_{\downarrow}], \quad (1.35)$$

где μ - химический потенциал, U - кулоновское отталкивание на узле, F - гибридизационная функция, описывающая переходы в резервуар и обратно, которая

соотносится с функцией среднего поля $\mathcal{G}_0$ как

$$\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(i\omega_m) = i\omega_m + \mu - F_\sigma(-i\omega_m). \quad (1.36)$$

Одночастичная функция Грина рассчитывается как

$$G(\tau - \tau') = -\langle \mathcal{T}_\tau c(\tau) c^\dagger(\tau') \rangle_{S_{eff}} = -\frac{Tr \mathcal{T}_\tau e^{-S_{eff}} c(\tau) c^\dagger(\tau')}{Tr \mathcal{T}_\tau e^{-S_{eff}}} \quad (1.37)$$

для данной гибридизационной функции, здесь $\mathcal{T}_\tau$ - упорядочение по времени.

Эффективное действие может быть преобразовано несколькими способами в зависимости от конкретного выбранного метода QMC. Например, может быть использован алгоритм Хирша-Фая на дискретном времени $\Delta\tau = \beta/N$, где N - количество « срезов » по времени [110], или на непрерывном времени [111; 112]. Учитывая, по какой части интеграла действия будет производиться дальнейшее разложение, выделяют метод слабой связи (weak coupling) [102; 113; 114] и сильной связи (strong coupling) или иначе гибридизационное разложение (hybridization expansion) [114].

Квантовый метод Монте-Карло имеет преимущество при рассмотрении задач многих тел, поскольку позволяет рассчитывать интегралы больших размерностей и не сталкивается с проблемой роста Гильбертова пространства и, как следствие, потребностью в большом количестве выделяемой для задачи памяти. Метод основан на многократной генерации случайных чисел. Для достижения высокой точности, количество генерируемых значений велико, что, с другой стороны, также увеличивает потребность в вычислительных ресурсах.

Учитывая плюсы и минусы используемых численных методов, описанных в данном разделе, в таблице 1.3 представлено их сравнение. Произведенный сравнительный анализ доступных методов позволяет выдвинуть предположение о том, что при прочих равных условиях для исследования фазовых переходов с учетом ограниченных вычислительных ресурсов метод точной диагонализации является эффективным.

Как упоминалось ранее, DMFT основывается на получении согласованного решения для двух моделей: решеточной и эффективной примесной. Данное решение получается итеративно, то есть в процессе решения уравнений в неко-

Таблица 1.3 — Сравнительная таблица численных методов для решения примесной задачи в EDMFT.

Метод	Плюсы	Минусы
Квантовый метод Монте-Карло (QMC)	1. Бесконечное количество учитываемых степеней свободы	1. Проблема расчета в режиме глубокого изолятора. 2. Стохастический шум 3. Ограниченность температур 4. Проблема знака
Метод диагонализации (diagonalization)	1. Широкий диапазон используемых температур 2. Суммарное время согласования меньше	1. Артефакты дискретизации 2. Экспоненциальный рост Гильбертова пространства при увеличении системы

тором цикле, называемым *циклом согласования*. Для его построения необходимо определить порядок выполнения расчетов и критерии, по которым будет оцениваться сходимость.

В данной главе были рассмотрены теоретические модели, лежащие в основе диссертационной работы. Далее будет представлен предлагаемый метод их численного решения.

Глава 2. Разработка численной схемы для решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля на основе метода точной диагонализации

При моделировании реальных кристаллов используются различные решеточные модели, например, одномерная [115] и двумерная [116] модели Изинга, модель Гейзенберга [117], модель Ашкина-Теллера [118], модель Тода [119] и их расширения. Для рассмотрения электронных и магнитных свойств сильно коррелированных материалов широко используется модель Хаббарда [10]. В данной части работы представлен алгоритм, позволяющий численно решать расширенную модель Хаббарда, учитывающую нелокальные взаимодействия между узлами решетки в рамках расширенной теории динамического среднего поля.

Разработка схемы была разделена на два этапа: *во-первых*, решение примесной модели и, как результат, получение соответствующих функций Грина; и, *во-вторых*, ее согласование с решеточной задачей. Для реализации первого пункта могут быть использованы различные численные подходы. Среди них на сегодняшний день самым популярным является квантовый метод Монте-Карло (QMC), особенно можно выделить его реализацию на непрерывном времени, построенную на гибридизационном разложении (СТ-НУВ [120] и СТ-НУВ SEGMENT [121]). Однако, QMC обладает рядом таких особенностей как стохастический шум, большое время расчета, требовательность к ресурсам и получение корреляционных функций исключительно на мнимых временах. Преимуществом QMC является учет бесконечного числа степеней свободы, и, как следствие, обработка непрерывных энергетических спектров. Зачастую при изучении материалов оценивается не конкретное состояние при заданных параметрах взаимодействий, а граница перехода между фазовыми состояниями. Незначительный шум может затруднять согласование и корректное определение перехода. В том и другом случаях в определенный момент использование QMC становится слишком ресурсоемким. Перспективу для решения этой проблемы открывает метод точной диагонализации (ED) [106; 122], позволяющий получать корреляционные функции, свободные от стохастического шума. Кроме того, при низких температурах существует возможность ограничить спектр учи-

тываемых собственных значений и использовать только низкоэнергетические возбуждения (алгоритм Ланцоша [123]), что сильно сокращает продолжительность расчета. Эти особенности были использованы при разработке численной схемы для решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля на основе метода точной диагонализации, представленной в данной главе.

Результаты, полученные методом СТQМС, выполнены Фридрихом Крином (университет Гамбурга, Германия) с использованием двух схем: для случая расширенной модели Хаббарда с учетом зарядовых взаимодействий был использован код, реализованный в открытой библиотеке [121], с учетом обменных взаимодействий - численная схема, описанная в работе [124].

2.1 Применение метода точной диагонализации в рамках расширенной теории динамического среднего поля

Схема решения уравнений DMFT, основанная на методе точной диагонализации, и подробное описание процедуры построения фермионного гильбертова пространства представлены в работе [108] и в упрощенном виде - в части 1.2.4. Поэтому в данном разделе особое внимание уделено рассмотрению особенностей описания бозонного резервуара в эффективной примесной модели, описываемой следующим гамильтонианом:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{imp}} = & \underbrace{\sum_{\sigma} \varepsilon_0 d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow}}_{\text{примесь}} + \underbrace{\sum_{k\sigma} (\mathcal{V}_k d_{\sigma}^{\dagger} f_{k\sigma} + h.c.) + \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k f_{k\sigma}^{\dagger} f_{k\sigma}}_{\text{фермионный резервуар}} + \\
 & + \underbrace{\sum_p \Omega_p b_p^{\dagger} b_p + \sum_p \mathcal{W}_p \mathbf{O}(b_p^{\dagger} + b_p)}_{\text{бозонный резервуар}}, \tag{2.1}
 \end{aligned}$$

где первые четыре слагаемых соответствуют эффективной примесной модели Андресона, представленной в части 1.2.1 уравнением (1.12). В формуле (2.1) используются следующие обозначения: k - индекс орбитали в фермионном резервуаре; ε_0 и ε_k являются энергетическими уровнями примеси и фермионного резервуара соответственно; $d_{\sigma}^{\dagger}(d_{\sigma})$ определяют оператор рождения (уничтоже-

ния) фермиона со спином σ на примеси; $f_{k\sigma}^\dagger(f_{k\sigma})$ – аналогичные операторы фермионного резервуара; $n_{0\sigma} = d_\sigma^\dagger d_\sigma$ – оператор числа частиц на примесном уровне; $\mathcal{V}_k$ – параметр гибридизации примеси с k -ой орбиталью в фермионном резервуаре. Последние два слагаемых гамильтониана (2.1) описывают бозонный резервуар, где $b_p^\dagger(b_p)$ – оператор рождения (уничтожения) бозона с энергией (частотой) Ω_p на энергетическом уровне p . $\mathcal{W}_p$ описывает взаимодействие между бозонным уровнем и орбиталью примеси. Оператор $\mathbf{O} = (\bar{n}_0, \bar{S}^z, \bar{S}^x, \bar{S}^y)$, где $\bar{n}_0 = \sum_\sigma (n_{0\sigma} - \langle n_{0\sigma} \rangle)$, $\bar{S}^\nu = S^\nu - \langle S^\nu \rangle$, $S^\nu = \sum_{\alpha\alpha'} (d_\alpha^\dagger \sigma_{\alpha,\alpha'}^\nu d_{\alpha'})$ (в данном случае α и α' – спиновые индексы, символом σ^ν обозначены матрицы Паули). Чтобы сделать гамильтониан конечным, количество уровней в бозонном резервуаре и их заселенности должны быть ограничены.

2.1.1 Дискретное представление бозонного резервуара эффективной примесной модели

Первоначально необходимо построить гильбертово пространство модели, представленной уравнением (2.1). Как было сказано ранее, бозонный резервуар аппроксимируется дискретным набором из P энергетических уровней. Кроме ограничения количества уровней, необходимо определить максимальное число бозонов N_p , которые могут находиться на каждом из них. В результате, число заполнения n_{bp} бозонов на каждом эффективном уровне в резервуаре составляет $0 \leq n_{bp} \leq N_p$. Заселенность орбитали с индексом k в фермионном резервуаре, состоящем из K уровней, обозначена n_{fk} и принимает значения 1 или 0. Заселенность примесной орбитали обозначена n_0 . Согласно данным определениям, состояние эффективной примесной модели в базисе чисел заполнения может быть записано следующим образом:

$$|\psi\rangle = \underbrace{|n_{b1}, n_{b2}, \dots, n_{bp}, \dots\rangle}_{\text{бозонная часть}} \otimes \underbrace{|n_0^\uparrow, n_{f1}^\uparrow, \dots, n_{fk}^\uparrow, \dots, n_0^\downarrow, n_{f1}^\downarrow, \dots, n_{fk}^\downarrow, \dots\rangle}_{\text{фермионная часть}}. \quad (2.2)$$

Матрица гамильтониана примесной модели является эрмитовой размерности $n \times n$. Для ее диагонализации используется метод Ланцоша [123]. Это итеративный алгоритм, в результате выполнения которого мы получаем трех-

диагональную матрицу коэффициентов T размерности $k \times k$, где k - количество произведенных итераций. Для удобства можно выбрать $k = n$.

Алгоритм 1 Алгоритм Ланцоша

- 1: На начальном этапе выбирается произвольный вектор $\mathbf{r} = \mathbf{q}_0$ и параметр $\beta_0 = \|\mathbf{q}_0\|$.
 - 2: **if** сходимость не достигнута **then**
 - 3: $\mathbf{q}_j = \frac{\mathbf{r}}{\beta_{j-1}}$
 - 4: $\mathbf{r} = H\mathbf{q}_j$
 - 5: $\mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{q}_{j-1}\beta_{j-1}$
 - 6: $\alpha_j = \mathbf{q}_j^T \mathbf{r}$
 - 7: $\mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{q}_j\alpha_j$
 - 8: $\beta_j = \|\mathbf{r}\|$
 - 9: **end if**
 - 10: Векторы Ланцоша $\mathbf{q}_j$ образуют ортонормированный базис и входят в состав ортонормированной матрицы $Q = [\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_k]$. Матрица гамильтониана H может быть приведена к трехдиагональной матрице T с помощью преобразования: $Q^T H Q = T$, где матрица T имеет вид, представленный в уравнении (2.3).
 - 11: На каждой итерации находятся собственные значения и собственные векторы матрицы T .
-

$$T_k = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \beta_{k-1} \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

Если $\beta_{k-1} = 0$, то, используя простой QR-метод [125—127], можно диагонализировать матрицу T_k : ($T_k = S_k \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k) S_k^T$) и найти ее собственные векторы и собственные значения. Собственные значения матрицы H приблизительно равны собственным значениям λ_j матрицы T_k , а ее собственные векторы записываются в столбцах матрицы Y :

$$Y = Q_k S_k, \quad (2.4)$$

где S_k - ортонормированная матрица собственных векторов матрицы T_k . Здесь и далее индекс k в случае матриц указывает на размерность.

Если $\beta_{k-1} \neq 0$, то $T_k = S_k \text{diag}(\Theta_1, \dots, \Theta_k^T) S_k^T$, где собственные значения $\Theta_j \rightarrow \lambda_j$ при $\beta_{k-1} \rightarrow 0$. В этом случае критерием сходимости является выражение $|\beta_k| |S_{kj}| < \varepsilon$, где ε должно принимать малое значение для реализации хорошего приближения.

Метод Ланцоша может применяться в два этапа. На первом этапе - с неявной схемой перезапуска [128]. Сначала определяются основные состояния $|\Psi_0\rangle$ внутри каждого блока матрицы гамильтониана H в линейном пространстве $|q_0\rangle, H|q_0\rangle, \dots, H^{n_L}|q_0\rangle$. Начальный вектор следует взять в виде $|q_0\rangle = c^\dagger |g.s.\rangle$, где g.s. - основное состояние гамильтониана. Преимуществом данного алгоритма является то, что небольшое количество векторов позволяет вычислить собственные векторы и собственное значение основного состояния [48]. Также необходимо учитывать возможность вырождения, когда несколько блоков имеют одинаковые собственные значения основного состояния.

На втором этапе, используя алгоритм Ланцоша, можно найти функцию Грина при нулевой температуре, записывая ее в виде суммы частичной ($\omega > 0$) и дырочной ($\omega < 0$) функций Грина:

$$g(\omega) = g^p(\omega) + g^h(\omega), \quad (2.5)$$

где

$$g^p(\omega) = \frac{\langle g.s. | cc^\dagger | g.s. \rangle}{\omega - \alpha_0^p - \frac{\beta_1^{p2}}{\omega - \alpha_1^p - \frac{\beta_2^{p2}}{\omega - \alpha_2^p - \dots}}}, \quad (2.6)$$

$$g^h(\omega) = \frac{\langle g.s. | c^\dagger c | g.s. \rangle}{\omega - \alpha_0^h - \frac{\beta_1^{h2}}{\omega - \alpha_1^h - \frac{\beta_2^{h2}}{\omega - \alpha_2^h - \dots}}}. \quad (2.7)$$

Коэффициенты α и β могут быть найдены следующим образом:

$$\alpha_i^{p(h)} = \langle q_i^{p(h)} | H | q_i^{p(h)} \rangle, \quad (2.8)$$

$$\beta_i^{p(h)^2} = \frac{\langle q_i^{p(h)} | q_i^{p(h)} \rangle}{\langle q_{i-1}^{p(h)} | q_{i-1}^{p(h)} \rangle}, \quad (2.9)$$

$$|q_{i+1}\rangle = H|q_i^{p(h)}\rangle - \alpha_i^{p(h)}|q_i^{p(h)}\rangle - \beta_i^{p(h)^2}|q_i^{p(h)}\rangle, \quad (2.10)$$

где $q_0^p = c^\dagger |g.s.\rangle$, $q_0^h = c |g.s.\rangle$.

Недостатком данного метода является потеря ортогонализации векторов Ланцоша в процессе диагонализации, в результате чего на каждом шаге требуется проводить их реортогонализацию [129]. С другой стороны, как упоминалось выше, время расчета сокращается, поскольку при построении корреляционных функций используется ограниченное количество собственных значений, соответствующих низкоэнергетическим возбуждениям. Вклад каждого собственного значения определяется согласно рассчитываемому значению больцман-фактора.

Для общего числа эффективных уровней P базис бозонных состояний имеет размерность $(N_1 + 1)(N_2 + 1) \cdots (N_P + 1)$. Для K уровней в фермионном резервуаре и одного уровня на примеси с учетом спина размерность фермионного базиса составляет $(2 \cdot 2^K)^2$. Таким образом, размер усеченного гамильтониана эффективной примесной модели (2.1) может быть рассчитан как $[2^{2K+2}(N_1 + 1)(N_2 + 1) \cdots (N_P + 1)]^2$.

Благодаря сохранению числа частиц и спина гамильтониан имеет блочную структуру. Размер наибольшего блока вычисляется по формуле $[(K + 1)!(\frac{K+1}{2})!^{-2}]^2[(N_1 + 1)(N_2 + 1) \cdots (N_P + 1)]^2$ [108]. Для сравнения, при параметрах $K = 7$, $P = 3$ и $N_p = 7$ количество элементов в наибольшем блоке составляет $\sim 2.5 \times 10^6$, для записи и хранения которых необходимо порядка $\sim 1 - 1.5$ Gb.

2.1.2 Особенности вычисления корреляционных функций для эффективной примесной модели

После диагонализации матрицы гамильтониана (2.1), имея набор собственных векторов $|l\rangle$ и собственных значений E_l , одночастичная функция Грина при конечной температуре может быть рассчитана при помощи леманновского представления как

$$g_\sigma(i\omega_m) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{ll'} \frac{|\langle l' | d_\sigma^\dagger | l \rangle|^2}{i\omega_m + E_l - E_{l'}} (e^{-\beta E_l} + e^{-\beta E_{l'}}), \quad (2.11)$$

где $\mathcal{Z} = \sum_l e^{-\beta E_l}$ - статистическая сумма. Аналогично могут быть получены зарядовая и магнитная двухчастичные функции Грина (восприимчивости):

$$\begin{aligned} X^{NN}(i\nu_m) &= -\frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{ll'} \frac{|\langle l' | \bar{n}_0 | l \rangle|^2}{i\nu_m + E_l - E_{l'}} (e^{-\beta E_l} - e^{-\beta E_{l'}}), \\ X^{MM}(i\nu_m) &= -\frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{ll'} \frac{|\langle l' | \bar{S} | l \rangle|^2}{i\nu_m + E_l - E_{l'}} (e^{-\beta E_l} - e^{-\beta E_{l'}}). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Согласно формулам (2.11) и (2.12), при низких температурах вклад возбужденных состояний с бóльшей энергией уменьшается. Схема решения, предложенная в данной работе, основывается на использовании низкоэнергетической части спектра собственных значений, о чем речь пойдет ниже. Энергия бозонного состояния Ω_p является положительной величиной, а конфигурациям резервуара с большим числом бозонов соответствуют состояния с бóльшими энергиями. Таким образом, поскольку рассматриваются только низкоэнергетические возбуждения, рассматриваемое количество бозонов в системе может быть ограничено некоторым числом сверху.

2.1.3 Ограничение заселенности бозонного резервуара в эффективной примесной модели

Как было сказано выше, усечение гильбертова пространства производится посредством ограничения бозонной заселенности N_p на энергетическом уровне p с энергией Ω_p . Для оценки качества аппроксимации бозонного резервуара были рассчитано вероятностное распределение среднего числа бозонов на одном эффективном уровне резервуара.

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}P} \sum_l \sum_{p=1}^P \langle l | b_p^\dagger b_p | l \rangle e^{-\beta E_l}, \quad (2.13)$$

здесь где $|l\rangle$ является собственным состоянием примесного гамильтониана, $\mathcal{Z}$ - статистическая сумма, P - общее число эффективных уровней в бозонном резервуаре. Поскольку количество бозонов на уровне является параметром в расчетной схеме, ниже рассматриваются вклады для определенных задаваемых значений от 0 до 6, обозначенных i . Здесь также происходит селекция собственных векторов, таким образом, что среднее количество частиц на уровне равно i .

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}P} \sum_{l_i} \sum_{p=1}^P \langle l_i | b_p^\dagger b_p | l_i \rangle e^{-\beta E_{l_i}}, \quad (2.14)$$

Полученный результат для самосогласованного расчета расширенной модели Хаббарда с использованием эффективной примесной модели, в которой рассматривались $P = 3$ уровня в бозонном, $K = 5$ орбитали в фермионном резервуарах и одна орбиталь примеси, представлен на рисунке 2.1 для параметров взаимодействий, соответствующим нескольким корреляционным режимам, которые будут описаны далее.

Было выявлено, что собственные состояния, соответствующие наименьшим собственным энергиям, характеризуются малым числом бозонов на каждом уровне. Данный факт может быть объяснен тем, что каждый дополнительный бозон увеличивает энергию приблизительно на значение Ω_p , что вводит термическое усреднение с дополнительным фактором $\sim e^{-\beta \Omega_p}$.

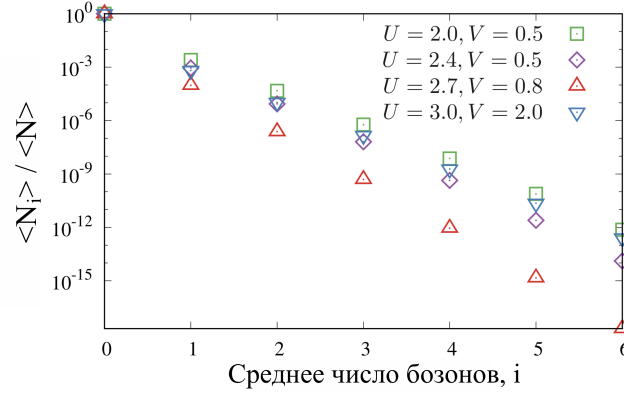


Рисунок 2.1 — Вероятностное распределение $\langle N_i \rangle / \langle N \rangle$ для конфигурации бозонного резервуара со средним числом бозонов i . Полученные зависимости соответствуют экспоненциальному распределению. Величины параметров взаимодействий приведены в эВ.

Если среднее число бозонов в собственном состоянии с малой энергией является обычно малым при рассматриваемых температурах, то в случае динамической корреляционной функции ситуация обратна. Существование матричного элемента $\langle l' | b^\dagger b | l \rangle$ в леманновском представлении приводит к тому, что в конечную спектральную функцию могут вносить вклады состояния с большими бозонными заселенностями, соответствующие большим энергиям. Стоит подчеркнуть, что при высоких температурах можно ожидать, что расчет на базе ED становится неосуществимым вследствие большой бозонной заселенности $\langle b_p^\dagger b_p \rangle \sim [e^{\beta \Omega_p} - 1]^{-1}$, которая, в свою очередь, требует увеличения максимальной заселенности N_p . Таким образом, необходимо с осторожностью подходить к расчетам при большой температуре, но на практике предполагаемые проблемы выявлены не были.

После определения структуры резервуаров в эффективной примесной модели, необходимо перейти к построению цикла самосогласования в расширенной теории динамического среднего поля.

2.2 Анализ дискретизации фермионного и бозонного резервуаров при решении эффективной примесной модели

В данной части работы проанализирована корректность приближений дискретизации фермионного и бозонного резервуаров при решении эффективной примесной модели методом точной диагонализации. Для этого предварительно

производилось решение расширенной модели Хаббарда при помощи расширенной теории динамического среднего поля на основе метода QMC. После получения самосогласованного решения выполнялась параметризация гибридных функций фермионного (1.29) и бозонного (1.30) резервуаров. Полученные параметры гибридизации далее использовались при решении эффективной примесной задачи методом точной диагонализации. Расчеты выполнялись независимо для двух видов бозонного резервуара: при описании нелокального кулоновского и обменного взаимодействия в расширенной модели Хаббарда.

2.2.1 Решение эффективной примесной модели для учета нелокального кулоновского взаимодействия

В данном разделе оцениваются эффекты, возникающие вследствие дискретизации резервуаров и ограничения гильбертова пространства в разработанной расчетной схеме. В гамильтониан эффективной примесной модели (2.1) входит слагаемое с оператором $\mathbf{O}$, которое описывает флуктуации зарядовой плотности и записывается в следующем виде:

$$\mathbf{O} = \bar{n}_0 = \sum_{\sigma} (n_{0\sigma} - \langle n_{0\sigma} \rangle). \quad (2.15)$$

При проведении расчетов, *во-первых*, необходимо ограничить параметр K фермионных энергетических уровней ε_k . В данном случае рассматривается схема, аналогичная применяемой при решении уравнений DMFT (схема 1.4). Вследствие того, что вблизи от фазового перехода система характеризуется возбуждениями различных масштабов энергии, фермионный резервуар должен содержать дополнительные эффективные уровни, представляющие разные части электронного спектра, из-за чего использование метода точной диагонализации становится более ресурсоемким [106]. На практике было использовано конечное число орбиталей в фермионном резервуаре $K = 7$. Вследствие большого размера гильбертова пространства системы, где также участвуют бозонные степени свободы, $K = 10$ является предельным для расчетов в настоящее время.

Во-вторых, число P уровней энергии бозонного резервуара Ω_p также было ограничено. Поскольку изначально их необходимое и достаточное количество не было известно, уравнения EDMFT были численно решены для $P = 1, 2, 3$ в нескольких корреляционных режимах (точки выделены на фазовой диаграмме 3.1 и обозначены римскими символами I-IV в данной секции, обсуждение самой диаграммы будет представлено далее):

- слабых корреляций – (ферми-жидкость, I) с малыми значениями $U = 1.0$ эВ и $V = 0.15$ эВ;
- средних корреляций – (коррелированный металл, II и III) при средних $U = 2.0$ эВ, $U = 2.4$ эВ и малых $V = 0.5$ эВ;
- сильных корреляций – (изолятор Мотта, IV) при значениях $U = 2.7$ эВ и $V = 0.8$ эВ, близких к фазовому переходу ферми-жидкость – изолятор Мотта.

На графиках 2.2 и 2.3 изображены локальные корреляционные функции на мацубаровских частотах. Результаты расчетов методом ED представлены треугольниками и квадратами для $P = 1, 2$ и 3 уровней в бозонном резервуаре; результаты, полученные методом QMC – в виде окружностей. На вставках дополнительно изображены кривые для наименьших мацубаровских частот ω_0 и ν_0 , радиус окружности соответствует статистической ошибке метода QMC для каждого расчета.

Согласно рисунку 2.2 в режимах слабых и средних корреляций при увеличении количества уровней P в бозонном резервуаре наблюдается очевидное согласие кривых ED и QMC. На вставках графиков в левой и правой частях рисунка 2.2 видно, что при $P = 3$ обе функции Грина очень близко к результатам QMC. Также на верхней части рисунка 2.3, показано, что как в режиме сильно коррелированного металла (III), так и в режиме изолятора (IV) количество $P = 2$ энергетических уровней является достаточным для достижения практически полного совпадения зависимостей, полученных разными методами.

Таким образом, *увеличение количества бозонных уровней с $P = 1$ до 2 приводит к хорошему согласию корреляционных функций, полученных методами QMC и ED, $P = 3$ бозонных уровней в большинстве случаев не требуется.* Это также можно видеть из таблицы 2.1, где представлены параметры бозонного резервуара при расчете методом точной диагонализации. При $P = 3$ константа взаимодействия $\mathcal{W}_3$, соответствующая наименьшей энергии Ω_3 , становится

очень малой. Поэтому вклад отношения $\sim \mathcal{W}_3^2/\Omega_3$ данного бозонного уровня в бозонную функцию гибридизации $\Lambda(i\nu_n)$ становится малым и количество уровней $P = 2$ является достаточным. С другой стороны, как будет описано ниже, наличие по крайней мере одной низкоэнергетической моды Ω_r важно в режимах с широким спектром зарядовых возбуждений, поэтому одного бозонного уровня недостаточно. Необходимо подчеркнуть, что при увеличении числа бозонных энергетических уровней не должно приводить к идеальному совпадению с QMC результатами, так как итоговая точность ED расчета ограничена определенным количеством энергетических уровней фермионного резервуара $K = 7$.

Отличительный признак метода ED заключается в возможности построения спектральных функций на действительных частотах, не применяя аналитическое продолжение, что необходимо делать в случае метода QMC. Таким примером является плотность состояний (density of states, DOS), которая может быть получена из локальной решеточной $G_{loc}(\omega + i\delta)$ либо примесной $G(\omega + i\delta)$ функций Грина, где δ - температурное размытие. В зависимости от использо-

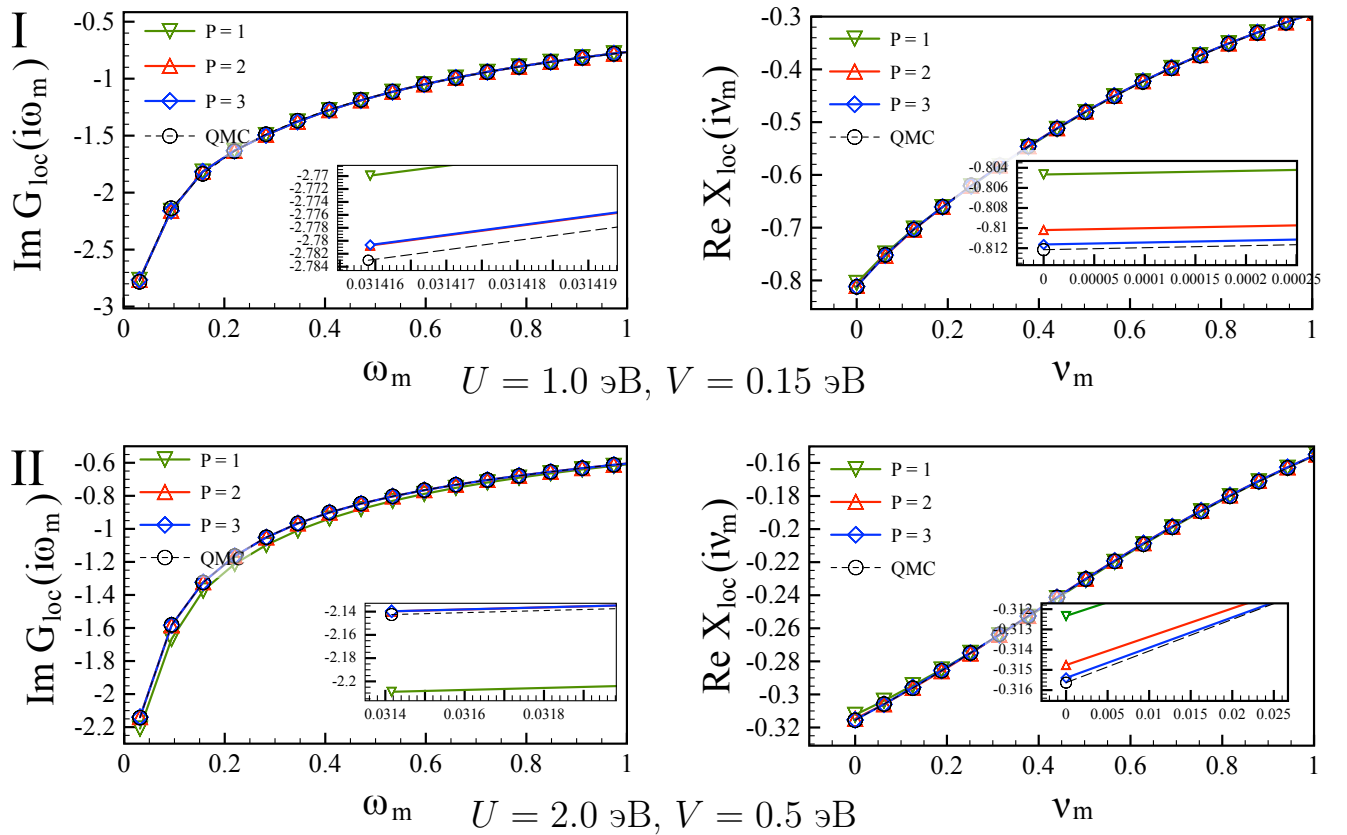


Рисунок 2.2 — Решение эффективной примесной модели методами ED и CTQMC в режимах слабых (сверху) и средних (снизу) корреляций. Расчеты проводились при величине обратной температуры $\beta = 100$ эВ $^{-1}$. Все величины приведены в единицах эВ.

ванной функции (в методе ED) график плотности состояний будет отличаться вследствие дискретизации фермионного резервуара. Однако, только локальная решеточная функция Грина

$$G_{loc}(\omega + i\delta) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [\omega + i\delta + \mu - t(\mathbf{k}) - \Sigma(\omega + i\delta)]^{-1} \quad (2.16)$$

имеет невзаимодействующую систему как точный предел, то есть при значении собственно-энергетической части $\Sigma \rightarrow 0$, чего не происходит в случае примесной функции

$$G(\omega + i\delta) = [\omega + i\delta + \mu - \Delta(\omega + i\delta) - \Sigma(\omega + i\delta)]^{-1}, \quad (2.17)$$

которая страдает от артефактов, привносимых дискретизацией гибридизационной функции $\Delta(i\omega)$ даже при $\Delta(i\omega) \rightarrow 0$.

На рисунке 2.4 показана плотность состояний $\text{DOS}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{loc}(\omega + i\frac{\pi}{2\beta})/\pi$, полученная при расчете методом ED при разных параметрах, описанных выше. Необходимо отметить, что ED результаты были рассчитаны с $K = 7$

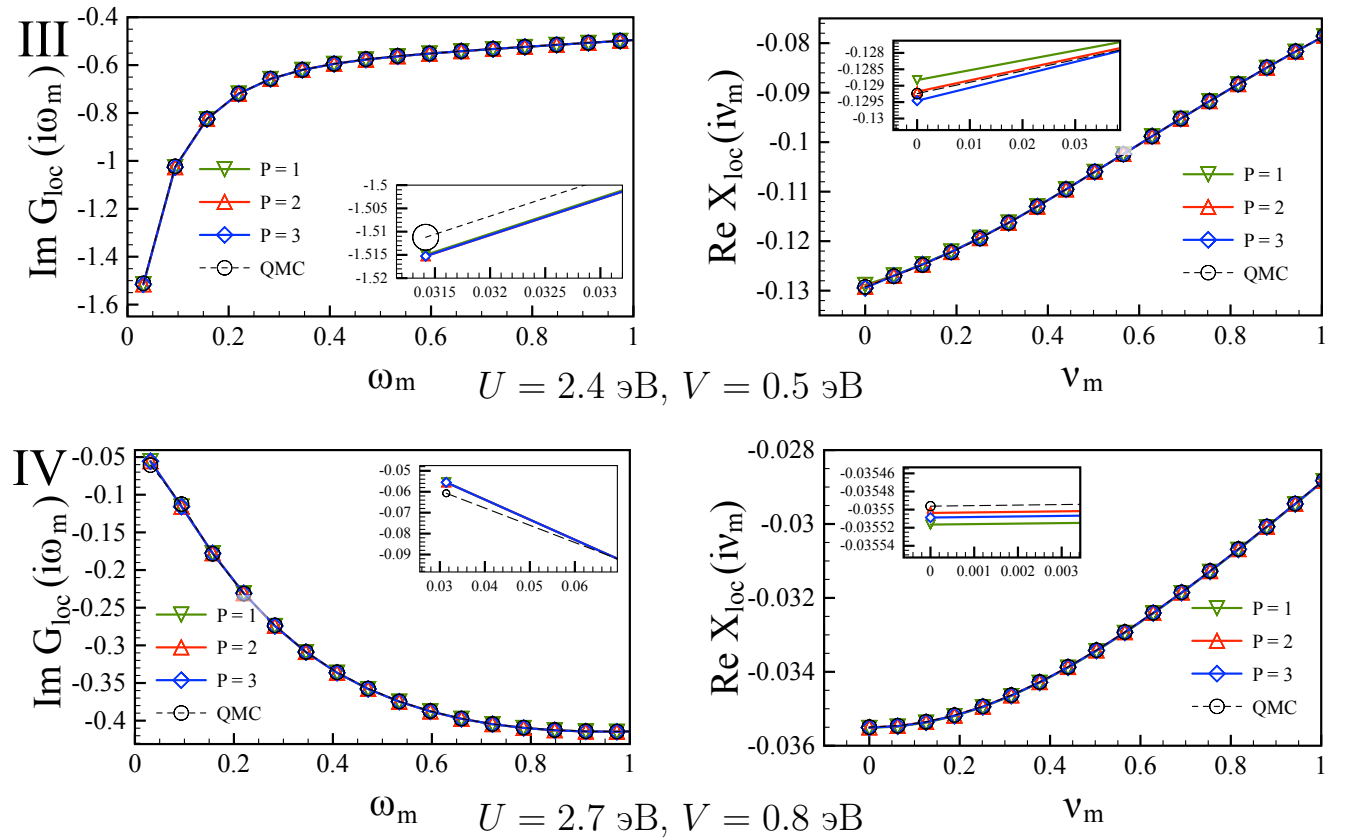


Рисунок 2.3 — Решение эффективной примесной модели методами ED и CTQMC в режимах средних (сверху) и сильных (снизу) корреляций. Расчеты проводились при величине обратной температуры $\beta = 100$ эВ $^{-1}$. Все величины приведены в единицах эВ.

Таблица 2.1 — Энергии Ω_p и константы взаимодействия $\mathcal{W}_p$ с различным числом $P = 1, 2, 3$ уровней бозонного резервуара. Римские числа обозначают индексы точек, обозначенных соответственно на фазовой диаграмме, изображенной на рисунке 3.1. Параметры резервуара Ω_p и $\mathcal{W}_p$ определяются из уравнения (1.23). Все величины приведены в единицах эВ.

		p	$P = 1$	$P = 2$		$P = 3$		
			1	1	2	1	2	3
I	U = 1	Ω_p	0.857	1.103	0.222	1.275	0.459	0.067
	V = 0.15	$\mathcal{W}_p$	0.165	0.161	0.0525	0.149	0.082	0.019
II	U = 2	Ω_p	1.126	1.462	0.447	1.704	0.717	0.107
	V = 0.5	$\mathcal{W}_p$	0.407	0.385	0.158	0.342	0.238	0.038
III	U = 2.4	Ω_p	1.464	1.900	0.697	2.117	0.930	0.127
	V = 0.5	$\mathcal{W}_p$	0.298	0.277	0.128	0.253	0.171	0.019
IV	U = 2.7	Ω_p	2.263	2.709	1.421	3.098	1.946	0.979
	V = 0.8	$\mathcal{W}_p$	0.319	0.290	0.144	0.229	0.222	0.057

фермионными и $P = 3$ бозонными уровнями в резервуарах. Графики плотности состояний, соответствующие QMC расчету, были получены методом максиму-

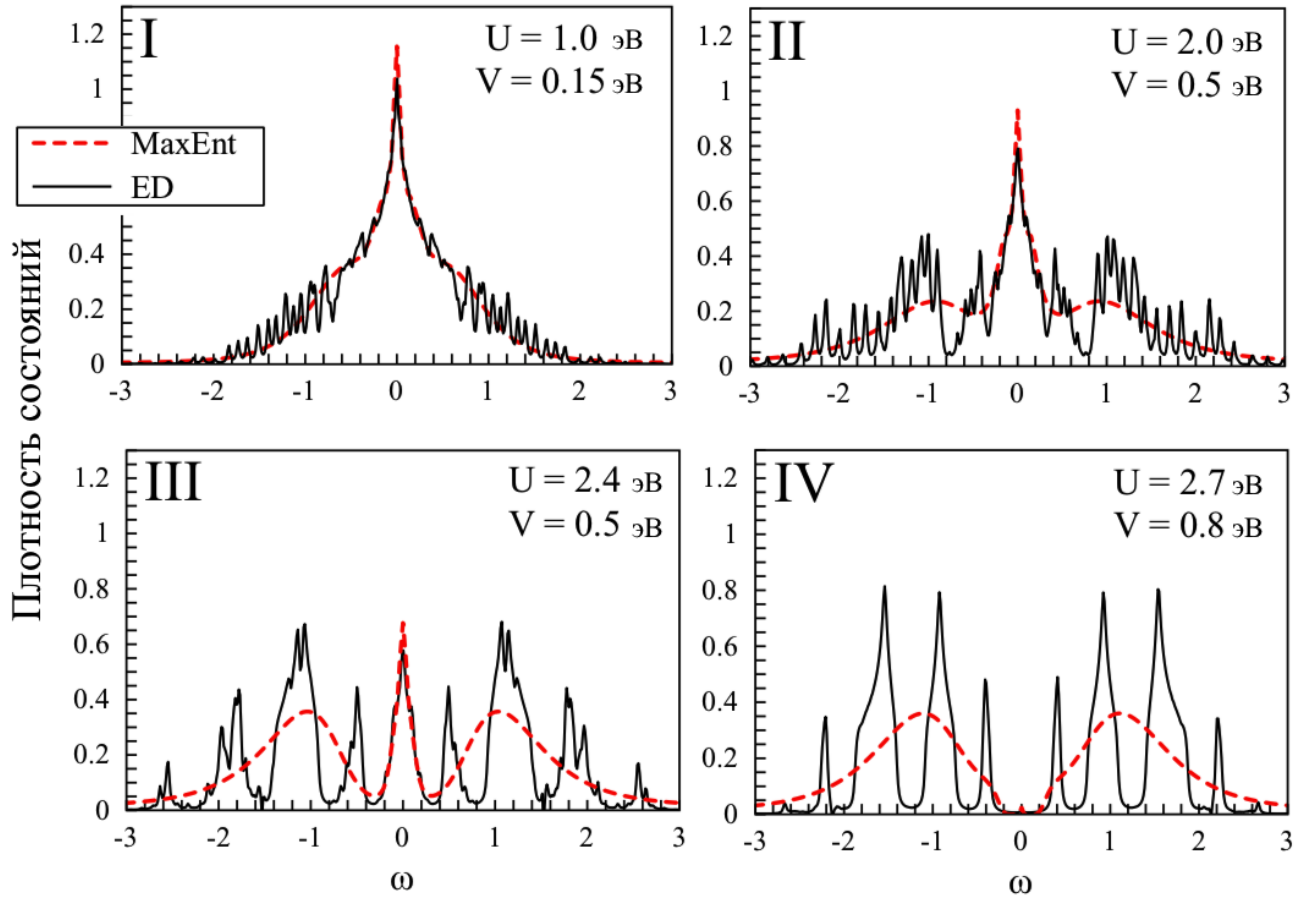


Рисунок 2.4 — Плотность состояний $-\text{Im}G_{loc}(\omega + i\frac{\pi}{2\beta})/\pi$, полученная при помощи ED (сплошная линия) и QMC с использованием метода максимума энтропии (пунктирная линия). Расчеты проводились при величине обратной температуры $\beta = 100$ эВ $^{-1}$. Значения U и V соответствуют точкам I-IV на фазовой диаграмме, изображенной на рисунке 3.1. Все величины приведены в единицах эВ, плотность состояний - в форм. ед. / эВ.

ма энтропии [130]. Чтобы достичь хорошего согласия спектральных функций в области уровня Ферми, при расчетах методом ED было выбрано температурное размытие $\delta = \frac{\pi}{2\beta}$. Стоит отметить, что в случае ED множество пиков обусловлено дискретизацией фермионного резервуара, которые малы только там, где мала собственно-энергетическая часть Σ , что было описано ранее. В случае применения QMC и построения плотности состояний при помощи метода максимума энтропии возможно возникновение проблем в определении плазмонных сателлитов, как это ранее было показано в работах [131; 132].

2.2.2 Решение эффективной примесной модели для учета нелокального обменного взаимодействия

Ниже представлены результаты расчетов, в которых показано влияние дискретизации фермионного и бозонного резервуаров в эффективной примесной модели, представленной уравнением (2.1), при рассмотрении спиновых флуктуаций на эффективной орбитали примеси. В этом случае оператор $\mathbf{O}$ записывается в виде

$$\mathbf{O} = \mathbf{S} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha'} (d_{\alpha}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha,\alpha'} d_{\alpha'}), \quad (2.18)$$

где $\boldsymbol{\sigma}_{\alpha,\alpha'}$ - матрицы Паули, α, α' - индекс спина. Дискретизация бозонного резервуара в данном случае основывается на использовании эффективных уровней, связанных с разными компонентами оператора $\mathbf{S}$ на примеси, которые имеют одинаковую энергию Ω и параметр гибридизации $\mathcal{W}$. В данной модели бозонный резервуар описывает спиновые флуктуации на примесной орбитали, которые возникают как следствие влияния окружающих спинов на спин орбитали выделенного узла в решеточной модели. Изначально необходимое количество уровней также было неизвестно, поэтому вычисления проводились из расчета 1 или 2 уровня на каждую компоненту. Максимальное общее количество эффективных уровней, с которым проводились расчеты, составляло 6.

По аналогии с пунктом 2.2.1 для применения метода ED, *во-первых*, необходимо определить количество K фермионных энергетических орбиталей. Для текущих расчетов рассматривалось конечное число орбиталей $K = 3, 4$ и 5 .

Наилучшее совпадение с фермионной гибридационной функцией, полученной методом QMC, достигалось при $K = 4$. Предельными значениями для расчетов являлись $K = 5$ при $P = 3$ и $K = 3$ при $P = 6$, поскольку при увеличении количества фермионных орбиталей K размерность Гильбертова пространства растет быстрее, чем при увеличении количества бозонных уровней P .

Во-вторых, вследствие ограниченности размера рассматриваемой задачи необходимо определить максимальную бозонную заселенность N_p . Для результатов, представленных ниже, значение параметра N_p также принималось равным 7. Дополнительно численно было получено, что уменьшение максимальной заселенности до $N_p = 3$ приводит к изменению значений одночастичной и двухчастичной функций Грина в нулевой мацубаровской частоте на 0.1%. Увеличение максимальной заселенности до значений $N_p = 15$ и $N_p = 63$ не привносит изменений в значения корреляционных функций.

В-третьих, как упоминалось выше, количество эффективных уровней в бозонном резервуаре принималось $P = 3$ и $P = 6$. Было показано и объяснено, что во всех корреляционных режимах достаточно использовать $P = 3$, то есть один эффективный уровень на каждую компоненту оператора спина на примеси.

Ниже представлены результаты, соответствующие следующим режимам локальных корреляций и параметрам обменного взаимодействия с ближайшими соседями в пределах первой координационной сферы J :

- слабые корреляции при значении $U = 1.0$ эВ и наибольшей в данных расчетах величине $J = 0.05$ эВ;
- средние корреляции (коррелированный металл) при $U = 2.0$ эВ в непосредственной близости от фазового перехода и меньшем, относительно предыдущего режима, $J = 0.03$ эВ;
- сильные корреляции (изолятор) при $U = 2.4$ эВ также вблизи фазового перехода и наименьшей в данных расчетах величине $J = 0.01$ эВ;
- сильные корреляции (изолятор) при наибольших значениях $U = 2.7$ эВ и $J = 0.01$ эВ.

Для указанных наборов параметров были проведены расчеты с использованием разработанной численной схемы решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля. На рисунках 2.5 и 2.6 представлены примесные одночастичные и двухчастичные корреляционные функции на мацуба-

ровских частотах. Результаты ED представлены треугольниками и ромбами для различных конфигураций резервуаров. Данные, полученные методом QMC, представлены в виде окружностей, статистическая ошибка не рассчитывалась. Согласно графикам, во всех режимах локальных корреляций, как в металличе-

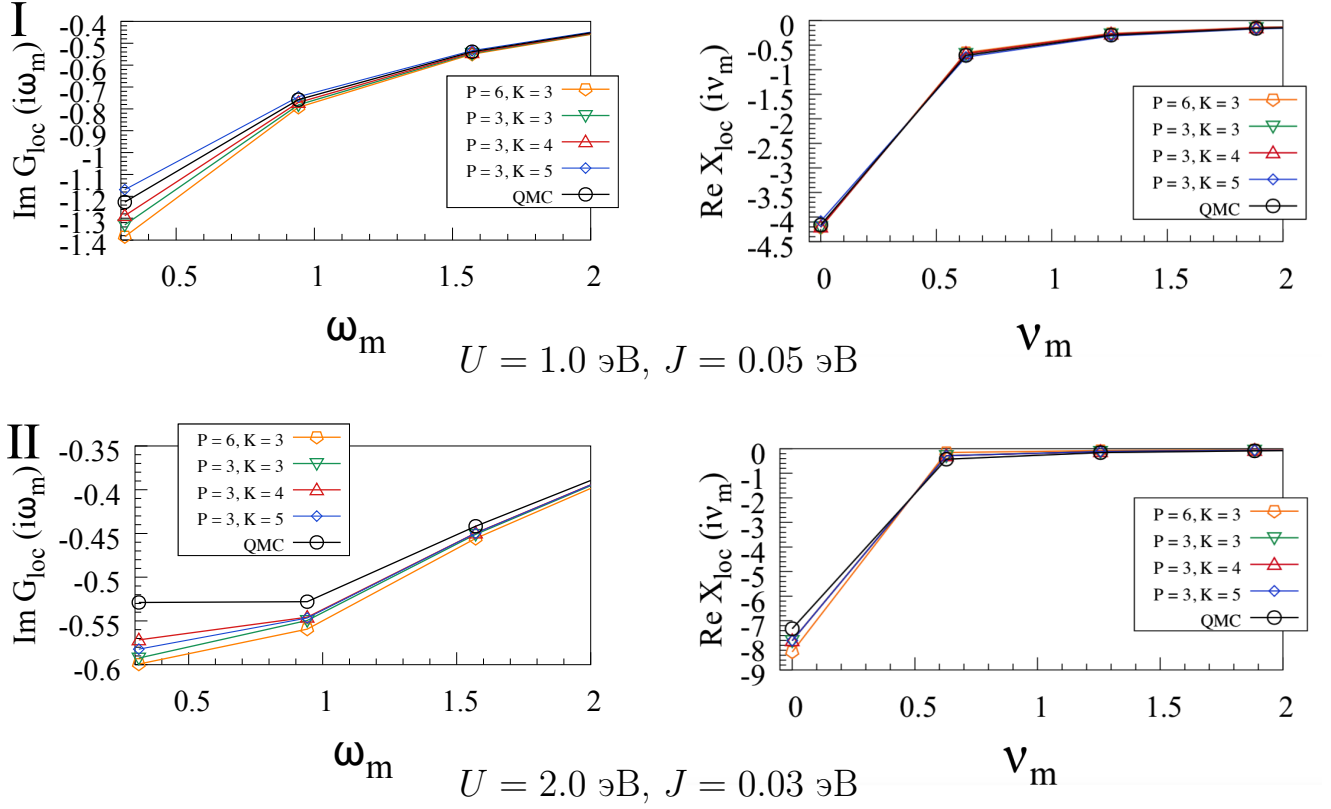


Рисунок 2.5 — Решение эффективной примесной задачи методами ED и QMC в режимах слабых (сверху) и умеренных (снизу) корреляций. Расчеты проводились при величине обратной температуры $\beta = 10 \text{ эВ}^{-1}$. Все величины приведены в единицах эВ.

ской фазе, так и в фазе изолятора, лучшая согласованность кривых ED с результатами QMC наблюдается при увеличении числа фермионных орбиталей. Увеличение числа бозонных уровней дает слабый эффект, кривые с одинаковым параметром K и разным параметром P лежат в непосредственной близости друг от друга. На рисунке 2.5 в нижней части можно видеть, что для параметров локального кулоновского взаимодействия $U = 2.0 \text{ эВ}$ и нелокального обменного взаимодействия $J = 0.03 \text{ эВ}$ в случае QMC расчета $Im G_{loc}(i\omega_0) \approx Im G_{loc}(i\omega_1)$, что соответствует фазовому переходу из металлической фазы в изоляторную. Расчет в данной области возможен, однако, при непосредственном приближении к самой границе, расчетная схема становится нестабильна, самосогласованность достигается при крайне большом количестве итераций. Разница между результатами QMC и ED становится тем больше, чем ближе к границе фазово-

го перехода выбраны параметры расчета. Этим объясняется бóльшая разница между кривыми $Im G_{loc}(i\omega_m)$ на рисунке 2.5 для состояния II , по сравнению с графиками для других параметров. По той же самой причине можно наблюдать разницу между ED и QMC результатами для кривых восприимчивости $Re X_{loc}(i\nu_m)$ для этого состояния.

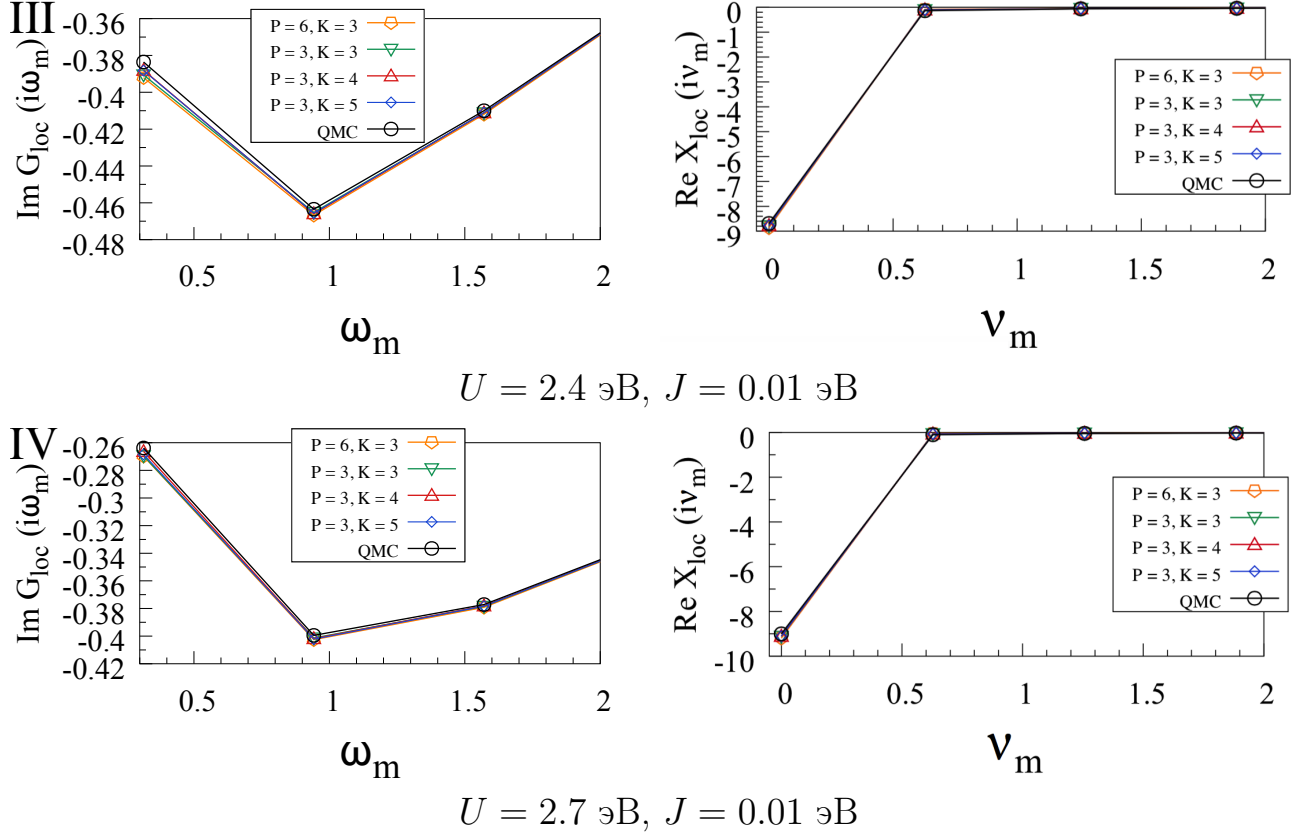


Рисунок 2.6 — Решение эффективной примесной задачи методами ED и QMC в режимах умеренных (сверху) и сильных (снизу) корреляций. Расчеты проводились при величине обратной температуры $\beta = 10 \text{ эВ}^{-1}$. Все величины приведены в единицах эВ.

В общем случае увеличение количества фермионных орбиталей в резервуаре приводит к лучшему согласию результатов ED и QMC. При использовании нечетного их количества более устойчивым становится металлическое решение. В случае описания центрального пика двумя близкими энергетическими уровнями, при переходе в режим изолятора его расщепление на две части для последующего формирования хаббардовских зон происходит за меньшее количество итераций.

Согласно уравнению (1.30), в нулевой частоте $i\nu_0 = 0$ значение бозонной гибридизационной функции пропорционально отношению:

$$\Lambda(i\nu_0) \approx - \sum_p \frac{2|\mathcal{W}_p|^2}{\Omega_p}. \quad (2.19)$$

В случае $P = 6$ дополнительные уровни приобретают бóльшую энергию Ω_p при малом параметре $\mathcal{W}_p$, таким образом, значение дроби $\frac{\mathcal{W}_p^2}{\Omega_p}$ становится малым. В таблице 2.2 приведены значения параметров бозонного резервуара для расчетов, представленных выше, и можно видеть, что значение параметра $\mathcal{W}_p$ на 2-3 порядка меньше значения Ω_p . Таким образом, вклад дополнительных уровней не существен, и *трех эффективных бозонных уровней в примесной модели достаточно для описания обменного взаимодействия*. На рисунке 2.7 наглядно продемонстрирован вклад каждого уровня в общий вид функции гибридизации, где видно, что уровень с бóльшим значением энергии Ω_p вносит меньший вклад.

Таблица 2.2 — Энергии Ω_p и константы взаимодействия $\mathcal{W}_p$ с различным количеством эффективных бозонных эффективных уровней на каждую проекцию в спиновом пространстве. Римские числа обозначают порядковые номера представленных выше расчетов. Все величины приведены в единицах эВ.

		p	1 – 3	1 – 3	4 – 6
I	$U = 1.0$	Ω_p	0.289	1.138	0.208
	$J = 0.05$	$\mathcal{W}_p$	0.046	0.028	0.037
II	$U = 2.0$	Ω_p	0.157	1.496	0.132
	$J = 0.03$	$\mathcal{W}_p$	0.027	0.011	0.024
III	$U = 2.4$	Ω_p	0.081	1.878	0.060
	$J = 0.01$	$\mathcal{W}_p$	0.007	0.003	0.006
IV	$U = 2.7$	Ω_p	0.067	2.203	0.054
	$J = 0.01$	$\mathcal{W}_p$	0.006	0.002	0.006

2.3 Цикл самосогласования в расширенной теории динамического среднего поля на основе метода точной диагонализации

Как упоминалось ранее в разделе 1.2.1, самосогласование в теории динамического среднего поля может быть реализовано двумя способами: в первом пересчитывается собственно-энергетическая часть $\Sigma(i\omega_m)$, во втором - гибридизационные функции $\Delta(i\omega_m)$ и $\Lambda(i\nu_m)$. В данной работе предлагается расчетная схема, основанная на самосогласовании по гибридизационным функциям. Уравнения EDMFT, используемые при построении цикла самосогласования, описаны в пункте 1.2.3, а также продублированы в схеме 2.8 для наглядности. Логически цикл согласования можно разделить на 4 этапа:

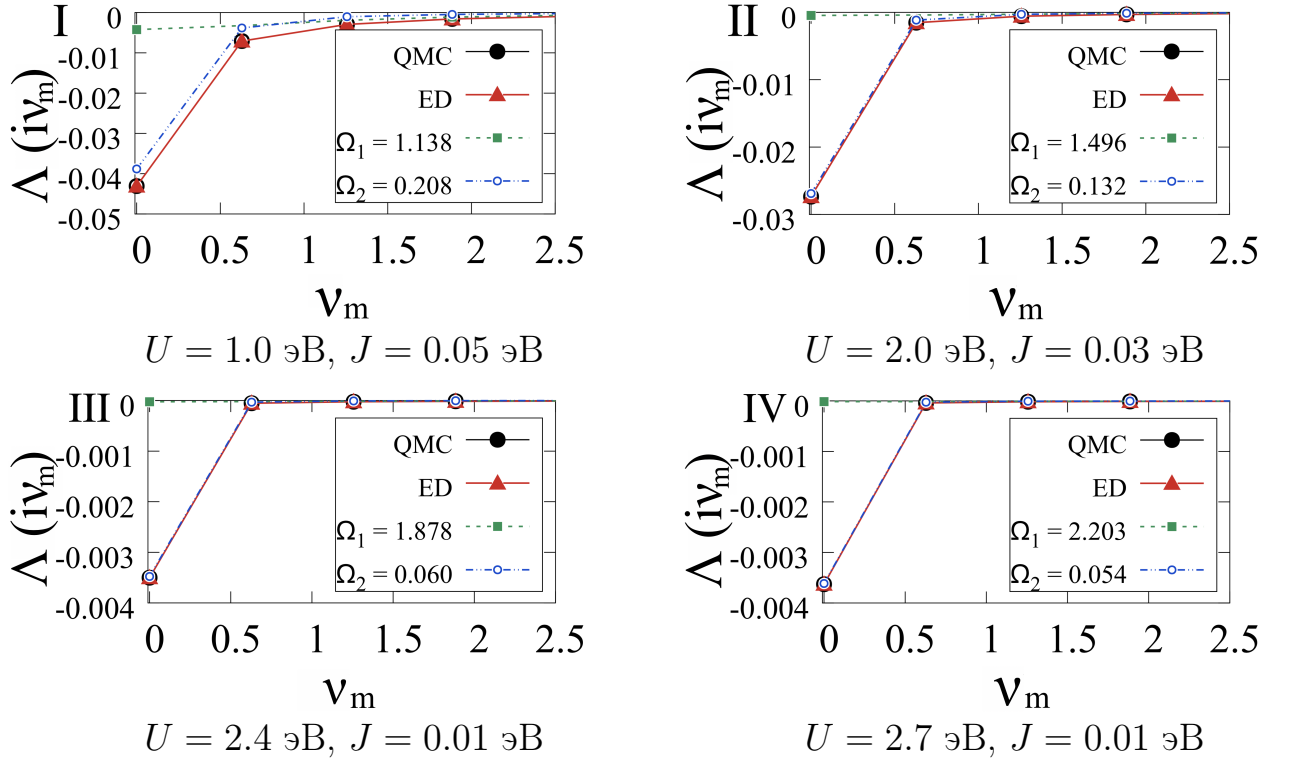


Рисунок 2.7 — Гибридизационные функции, полученные для расчетов при помощи метода точной диагонализации. Отдельно выделен вклад каждого набора бозонных орбиталей.

Расчет проводился при величине обратной температуры $\beta = 10$ эВ⁻¹. Все величины приведены в единицах эВ.

- инициализация стартовых параметров (блоки I - II);
- построение и диагонализация матрицы примесного гамильтониана (блок IV);
- согласование с решеточной моделью (блоки V и VI);
- перерасчет параметров для следующей итерации (блок VII).

Стартовые параметры для инициализации цикла могут быть выбраны несколькими способами: первым вариантом является использование невзаимодействующего предела (то есть $\Sigma(i\omega_m) = 0$), во втором - некоторых произвольных значений для параметров гибридизации. Необходимо отметить, что количество итераций цикла напрямую зависит от начальных параметров, однако точного метода их предсказания не существует.

После определения стартовых значений производится расчет гибридизационной функции для каждого резервуара. Также подготовительными вычислениями можно считать расчет интеграла перескока и параметров нелокального взаимодействия в обратном пространстве. Самыми ресурсоемкими являются построение и диагонализация примесного гамильтониана. В части 1.2.4 представлена идея заполнения матрицы примесного гамильтониана.

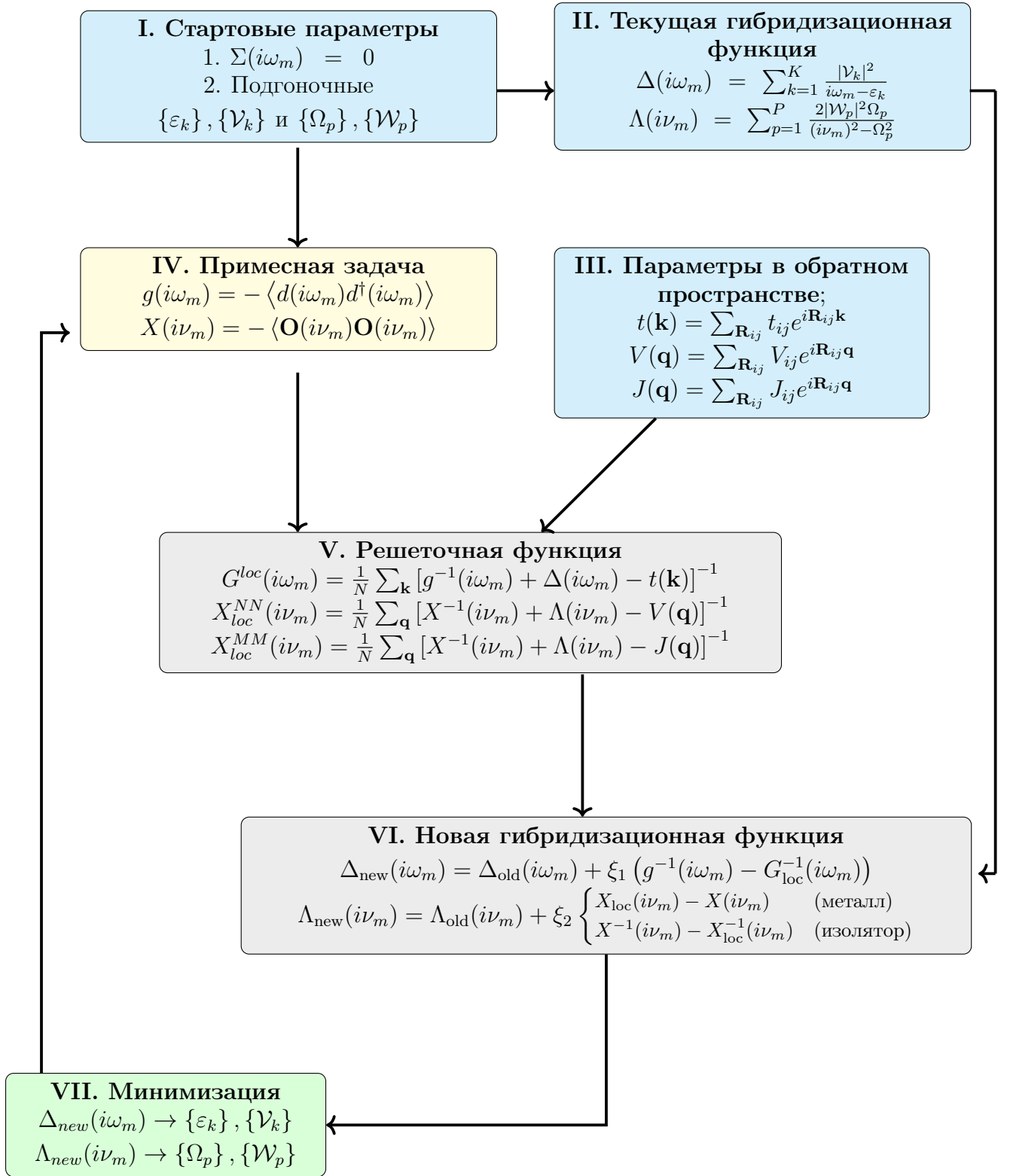


Рисунок 2.8 — Схематическое представление цикла самосогласования расширенной теории динамического среднего поля для метода точной диагонализации.

После диагонализации и получения примесных корреляционных функций рассчитываются локальные решеточные функции Грина, далее - новая гибридационная функция. Формула для вычисления бозонной функции гибридазации выбирается в соответствии с фазовым состоянием системы для ускорения

согласования по данному параметру. Далее, используя нелинейный метод наименьших квадратов [133; 134], минимизируя отличие $\mathcal{X}_F^2$ и $\mathcal{X}_B^2$ подбираемых по формулам (1.29) и (1.30) функций и полученных новых гибридизационных функций, мы получаем новые параметры гибридизации согласно следующим уравнениям:

$$\mathcal{X}_F^2 = \frac{1}{N_\omega + 1} \sum_n^{N_\omega} [\Delta_{new}(i\omega_m) - \Delta_{new}^K(i\omega_m)]^2, \quad (2.20)$$

$$\mathcal{X}_B^2 = \frac{1}{N_\nu + 1} \sum_n^{N_\nu} [\Lambda_{new}(i\nu_m) - \Lambda_{new}^P(i\nu_m)]^2, \quad (2.21)$$

где N_ω и N_ν - количество фермионных и бозонных мацубаровских частот соответственно. Поскольку данная операция является исключительно математической и не учитывает физику рассматриваемых процессов, принимаемая в качестве аргумента функция должна иметь вид, удобный для обработки. Это также обуславливает использование мацубаровских частот, поскольку в этом случае график функции является гладким.

В результате выполнения цикла мы получаем самосогласованное с заданной точностью решение расширенной модели Хаббарда при помощи расширенной теории динамического среднего поля. В области, близкой к фазовому переходу металл - изолятор, принималось достаточным совпадение функций Грина на 96%, в областях, удаленных от перехода, - 98%.

2.4 Особенности проведения численных экспериментов

В процессе проведения расчетов был выявлен ряд особенностей. *Во-первых*, формулы пересчета новой гибридизационной функции для бозонного резервуара $\Lambda_{old}(i\nu_m) \rightarrow \Lambda_{new}(i\nu_m)$. В режиме металла быстрая сходимость при низких энергиях является более важной. Использование формулы (1.27) способствует более быстрой сходимости при высоких энергиях и используется в изоляторном режиме. В результате формула пересчета бозонной гибридизаци-

онной функции выглядит следующим образом:

$$\Lambda_{\text{new}}(i\nu_m) = \Lambda_{\text{old}}(i\nu_m) + \xi_2 \begin{cases} X_{\text{loc}}(i\nu_m) - X(i\nu_m) & , \text{ металл} \\ X^{-1}(i\nu_m) - X_{\text{loc}}^{-1}(i\nu_m) & , \text{ изолятор} \end{cases} \quad (2.22)$$

Во-вторых, проведение расчетов в области больших $U \gg U_{\text{фазового перехода}}$ (изолятор с большой щелью) методом QMC затруднительно. Это связано с большой дисперсией собственно-энергетической части $\Sigma(i\omega_m)$, поведение которой при половинном заполнении и больших U схоже с атомным пределом $\Sigma(i\omega_m) \approx 1/i\omega_m$, что приводит к возникновению большого шума при пересчете фермионной функции гибридизации $\Delta(i\omega_m)$. Необходимо подчеркнуть, что численная схема на основе метода точной диагонализации устойчива в режиме глубоко изолятора.

2.5 Выводы к главе

В данной главе представлена численная схема для решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля на основе метода точной диагонализации. Для этого было предложено дискретное представление бозонного резервуара в эффективной примесной модели. Результаты проведенного анализа позволяют сделать некоторые частные выводы, представляющие интерес для исследования: для двух типов взаимодействий было определено минимальное необходимое количество используемых энергетических уровней в бозонном и фермионном резервуарах, а также заселенность бозонных уровней. В случае зарядовых флуктуаций было выявлено, что для определения состояния системы качественно достаточно одного эффективного уровня в бозонном резервуаре и пяти в фермионном. Однако для получения точного решения, а также вблизи фазового перехода, минимальное необходимое количество равно двум в бозонном резервуаре и семи в фермионном. При рассмотрении магнитных флуктуаций достаточными являются три эффективных уровня в бозонном резервуаре и четыре орбитали - в фермионном. Для того, чтобы определить необходимую бозонную заселенность, было рассмотрено вероятностное распределение сред-

него числа бозонов на одном эффективном уровне в резервуаре, и в результате определено, что достаточным является семь частиц на уровне.

Изложенные в данной главе результаты опубликованы в статье [135].

Глава 3. Изучение влияния межузельных взаимодействий на электронные свойства модельной системы в расширенной модели Хаббарда на квадратной решетке

Исследования последних лет в области сильно коррелированных электронных систем в значительной мере концентрируются на изучении так называемых квантовых фазовых переходов или квантовых критических явлений. Несмотря на то что данной проблеме посвящен ряд монографий и многочисленные обзоры [136—144], она весьма далека от полного разрешения. Квантовыми фазовыми переходами называются переходы непрерывного типа (второго рода), возникающие в результате нетепловых квантовых флуктуаций, существование которых обусловлено принципом неопределенности. По сути происходит разрушение порядка пространственного расположения атомов или молекул в системе при $T = 0$ в результате вариации нетепловых параметров, таких как, например, давление, концентрация или магнитное поле, которые контролируют уровень квантовых флуктуаций. В чистом виде квантовые фазовые переходы наблюдаются только при $T = 0$, хотя их влияние на свойства вещества может простираться и на область конечных температур [145]. Среди них одну из ключевых ролей при изучении свойств сильно коррелированных систем играет переход между металлической и изоляторной фазами [146]. Его наличие обусловлено конкуренцией между электронным взаимодействием на узле решетки, которое стремится локализовать электроны, и кинетическими эффектами, которые благоприятствуют движению электронов [147]. Слабые же межузельные взаимодействия при решении решеточной модели на практике часто учитывают в модифицированных («экранированных») определенным образом параметрах локальных взаимодействий. В результате чего физика системы описывается «эффективным» гамильтонианом, содержащим только локальные члены [10].

При увеличении силы межузельных взаимодействий, их вклад в общую энергию становится достаточно большим, что меняет физику коррелированных систем до такой степени, что энергетически выгодно, чтобы система находилась в состоянии с нарушенной симметрией, где заряды упорядочены некоторым образом. За счет повышения энергии взаимодействия на узле, межузельное электронное отталкивание сводится к минимуму [91]. Такие зарядово-упорядочен-

ные состояния широко распространены в различных материалах. Изначально они были обнаружены Вервей в магнетитах [148], позже найдены в вигнеровских кристаллах [149; 150], высокотемпературных купратных сверхпроводниках [151—154], манганитах [155—158], кобальтатах [159], никелатах [160—163], двумерных органических материалах [164—167], соединении $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ [168; 169], слоистых дихалкогенидах [170] и многих других соединениях, в том числе в квазиодномерных системах [171; 172]. Изучение материалов с такими свойствами является привлекательной областью, поскольку открывает простор для развития технологий производства различных датчиков и элементной базы устройств современной электроники.

В данной главе рассматривается применимость подхода численного решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля с использованием метода точной диагонализации в различных режимах локальных корреляций для изучения систем с сильными нелокальными кулоновскими и обменными взаимодействиями. В предыдущей главе было показано, что разработанная расчетная схема хорошо применима в различных корреляционных режимах и широком диапазоне значений локального кулоновского отталкивания U в расширенной модели Хаббарда, определенной на квадратной решетке. В данной части работы представлена и подробно проанализирована диаграмма фазовых переходов в зависимости от величины кулоновских взаимодействий между узлами V и на узле U в расширенной модели Хаббарда, а также экранирование локального параметра U . Также показано влияние учета нелокального обменного взаимодействия на спектральную функцию системы. Все расчеты проводились при величине интеграла перескока между ближайшими соседями, равным $t = 0.25$ эВ, обратной температуре $\beta = 100$ эВ $^{-1}$ в случае зарядовых взаимодействий и $\beta = 10$ эВ $^{-1}$ при учете обменных.

3.1 Построение фазовой диаграммы U - V расширенной модели Хаббарда, определенной на квадратной решетке

Поскольку дискретизация резервуаров является одним из самых важных вопросов при использовании метода точной диагонализации, ниже приведено

число орбиталей в бозонном резервуаре, использованное при построении диаграммы:

- $P = 1$ на границе фазового перехода ферми-жидкость - зарядовое упорядочение. Аналогично при переходе ферми-жидкость - изолятор Мотта достаточно далеко от фазы зарядового упорядочения;
- $P = 2$ использовалось при изучении переходной области между фазами ферми-жидкости, изолятора Мотта и зарядового упорядочения (детально рассмотрено и описано на рисунке 3.2);
- Использование $P = 3$ вместо $P = 2$ бозонных уровней необходимо при определении фазовой границы между фазами изолятора Мотта и зарядового упорядочения. При $P = 1$ метод точной диагонализации предсказывает значения V для границы перехода ферми-жидкость - зарядовое упорядочение в 1.5 - 2 раза больше, чем QMC.

В фазе зарядового упорядочения расчеты не проводились, поскольку согласование по нескольким подрешеткам не рассматривается. Среди рассмотренных фаз можно выделить следующие:

- ферми-жидкость для небольших $U \lesssim 10t$ и $V \lesssim U/4$;
- изолятор Мотта для больших $U \gtrsim 10t$ и небольших V ;
- фаза зарядового упорядочения при больших V .

Результат расчетов представлен на рисунке 3.1 в виде диаграммы, описывающей фазовые переходы в зависимости от величины локального U и межузельного V кулоновского отталкивания при половинном заполнении в расширенной модели Хаббарда, построенной на квадратной решетке. Границы переходов в фазу зарядового упорядочения рассчитывались в два этапа: изначально подбирались такие значения параметров U и V , что рассчитываемое значение зарядовой восприимчивости в точке $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ было близко к расходимости (смене знака), затем параметр V увеличивался с малым шагом. Переход из фазы ферми-жидкости в фазу изолятора Мотта (и из изолятора Мотта в зарядовое упорядочение) оценивался по изменению угла наклона графика $ImG(i\omega)$ на малых мацубаровских частотах. Примером может служить рисунок 2.3, где на верхней левой панели при значении $U = 2.4$ эВ изображена одночастичная функция Грина в состоянии ферми-жидкости, на нижней левой при $U = 2.7$ эВ - в режиме изолятора Мотта. Для проверки результатов, полученных методом точной диагонализации, на рисунке 3.1 также приведены графики, полученные

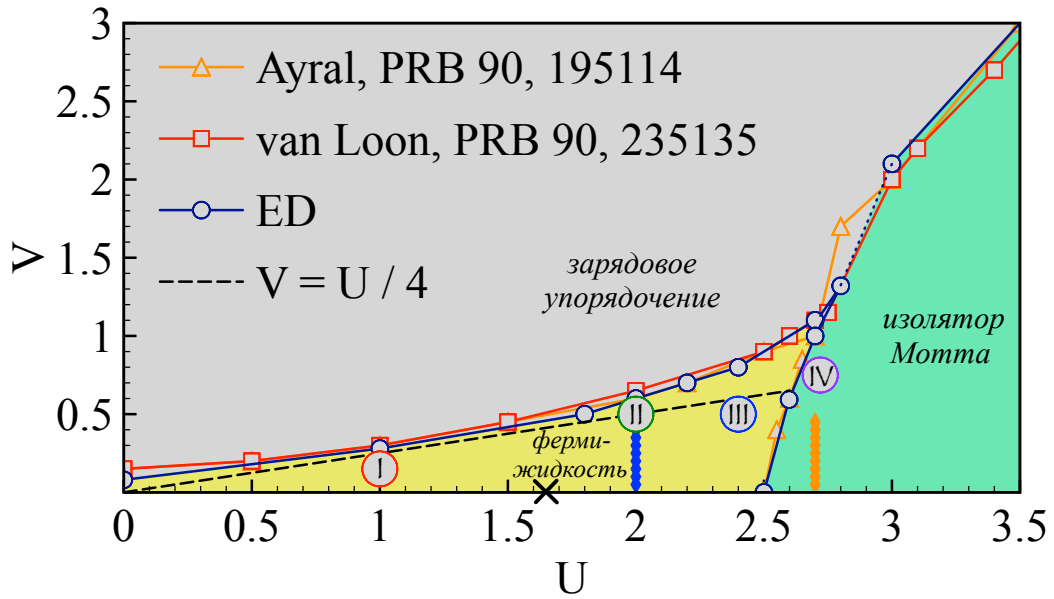


Рисунок 3.1 — Фазовая диаграмма расширенной модели Хаббарда в плоскости $U - V$. Кругами обозначена фазовая граница, полученная методом точной диагонализации. Треугольниками и квадратами обозначены границы фазовых переходов, представленные в работах [87] и [173], соответственно. Римскими цифрами обозначены расчеты для параметров, представленных на рисунках 2.2 и 2.3. Пунктирная черная линия $V = U/4$ является грубой оценкой перехода ферми-жидкость – зарядовое упорядочение. Голубые и желтые точки представляют две серии расчетов в фазах ферми-жидкость и изолятор Мотта. Черным крестом обозначен переход ферми-жидкость – изолятор Мотта двумерной модели Хаббарда, предсказываемом в работе [174]. Все величины приведены в единицах ЭВ.

ранее в работах [87] и [173], в которых для решения эффективной примесной модели был использован метод СТQМС. Идеальное совпадение кривых не предполагается в том числе вследствие независимого проведения указанных расчетов. Было выявлено, что *в методе точной диагонализации сходимость уравнений к самосогласованному решению становится медленнее в тех же областях, что и при использовании метода QМС*. В основном это происходит в окрестности фазовой границы [173].

На рисунке 3.2 переход из ферми-жидкостного состояния был изучен более детально: граница перехода в фазу зарядового упорядочения обозначена синей линией и ограничивает область сверху, толстая красная граница справа соответствует переходу в состояние моттовского изолятора. Двигаясь со стороны изолятора Мотта, пунктирной черной линией обозначена граница с фазой зарядового упорядочения, находящейся также сверху, и толстой зеленой линией - с фазой ферми-жидкости, располагающейся слева. Данное расположение границ выявляет типичную сосуществующую область фазовых переходов первого рода металл-изолятор. А также существует узкая полоса над желтой областью, соответствующая изоляторному решению, расположенная между переходом в заря-

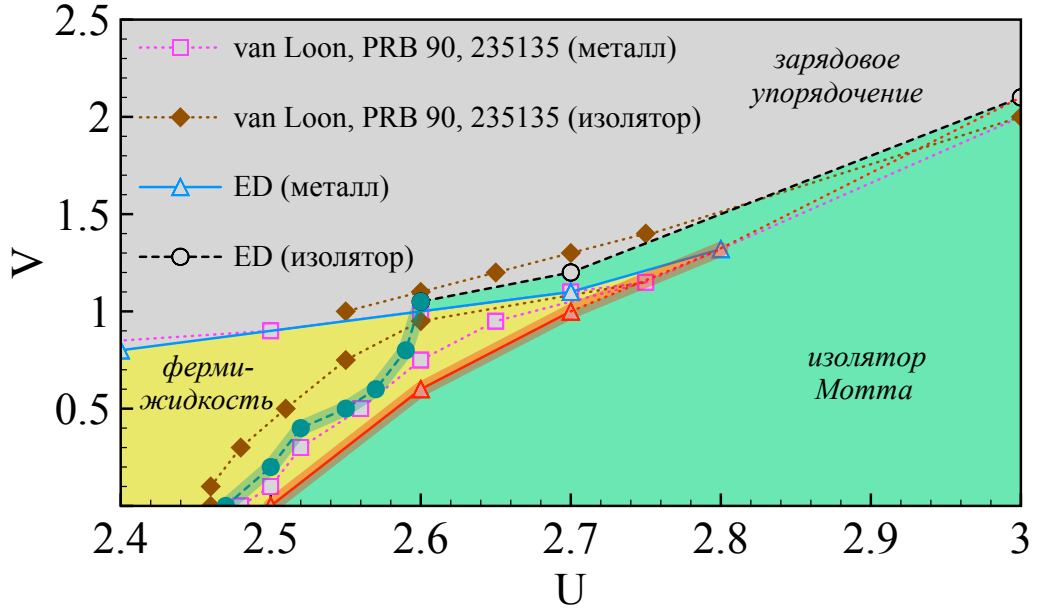


Рисунок 3.2 — Увеличенное изображение перехода из ферми-жидкостного состояния в фазовой диаграмме, изображенной на рисунке 3.1. Треугольниками изображена граница, полученная методом точной диагонализации при инициализации расчета в металлической фазе, окружностями - в изоляторной. Квадратами и ромбами обозначены фазовые границы, полученные при инициализации в металлической и изоляторной фазах, соответственно, приведенные в работе [173]. Все величины приведены в единицах эВ.

довое упорядочение при выходе из ферми-жидкостного состояния. В принципе, данный факт может наблюдаться как косвенное доказательство *сосуществования фаз изолятора Мотта и зарядового упорядочения*, но проверка перехода первого рода между данными фазами невозможна, так как серия расчетов (с вариацией одного из параметров) не может быть инициирована (начата) в фазе зарядового упорядочения.

В целом, на рисунках 3.1 и 3.2 продемонстрировано хорошее численное согласие с результатами предыдущих работ, упомянутых выше. Однако, было обнаружено, что в *ED-расчете сосуществующие области ферми-жидкости и изолятора Мотта сдвинуты в область несколько больших значений U по сравнению с *QMC* результатами*, представленными в [173]. Данный сдвиг может быть ассоциирован с конечным числом уровней в фермионном резервуаре ($K = 5$), использованном при построении фазовой диаграммы, и тем, что данное число является нечетным. Плотность состояний при половинном заполнении расширенной модели Хаббарда на квадратной решетке симметрична в окрестности уровня Ферми [87]. Также фермионная гибридационная функция $\Delta(\omega + i\delta)$ является симметричной в области $\omega = 0$ и, как следствие, имеет тенденцию становиться более изоляторной, если дискретизация резервуара

осуществляется четным числом орбиталей, и более металлической, если нечетным. Чтобы получить оценку ошибки дискретизации, была рассчитана фазовая граница между металлической фазой и фазой изолятора также с четным числом фермионных уровней в резервуаре ($K = 4$). Данная оценка приведена как утолщенные зеленая (изолятор Мотта - ферми-жидкость) и красная (ферми-жидкость - изолятор Мотта) линии на рисунке 3.2. Однако, переход ферми-жидкость - изолятор Мотта при $V = 0$, полученный из DCA (Dynamical Cluster Approximation) расчетов [174], имеет значение приблизительно $U_c \cong 1.6$ эВ, показывая то, что ошибка EDMFT аппроксимации намного больше, чем дополнительная ошибка дискретизации ED. Также приближение EDMFT как таковое не позволяет идеально предсказать фазовые границы расширенной модели Хаббарда, благодаря существованию нелокальных диаграмм Фока [92], а также из-за пренебрежения межузельными корреляциями [91]. Различие в последней точке при $U = 3.0$ эВ может быть уменьшено за счет рассмотрения нескольких подрешеток. Еще один вариант устранения этих недостатков заключается в использовании схематических расширений, таких как GW + EDMFT [87] или метода дуальных бозонов [173; 175], которые могут быть рассмотрены как модели, в которых данная расчетная схема может быть применена в будущем.

Несмотря на то что изучение фазы зарядового упорядочения при помощи данной расчетной схемы невозможно, граница перехода, как уже было сказано, может быть определена. Физически наличие данного состояния обусловлено доминирующим межузельным кулоновским взаимодействием. В областях, где основной вклад в энергию имеет слагаемое гамильтониана (1.10), в которое входит интеграл перескока электронов t (металлическое состояние) дополнительный учет V приводит к усилению делокализации электронов. Но, увеличивая параметр межузельного взаимодействия, при некотором его значении электронам становится выгоднее образовать две подрешетки: полностью заполненную и пустую, - что приводит к нарушению симметрии.

3.2 Оценки нелокальных кулоновских взаимодействий для реальных систем

Расширенная модель Хаббарда может применяться для описания свойств совершенно разных классов сильно коррелированных соединений. На рисунке 3.3 приведена классификация различных материалов в зависимости от величин одноузельного и межузельного кулоновских взаимодействий: квазидвумерные слоистые (NaV_2O_5 , Sr_2IrO_4 , Sr_2RhO_4), аллотропные двумерные соединения C и Si (графен и силицен), системы адатомов на полупроводниковой подложке ($\text{Si}(111)$: Si, C, Sn, Pb) и функционализированная графеновая структура C_2F , представляющая из себя плоский слой, с осажденными с одной стороны атомами фтора. Все указанные системы описываются моделями разной геометрии: квадратной, гексагональной или треугольной решеткой, но их связывает наличие значительных межузельных кулоновских корреляций. Для удобства параметры для каждого соединения и методы их оценки приведены в таблице 3.1.

Для каждого материала элементы матрицы кулоновского взаимодействия в простейшем случае могут быть рассчитаны через интегралы по волновым функциям. Кроме того при помощи подхода cRPA (constrained Random Phase Approximation) [178; 179] учитывается экранирование взаимодействий, определенных для состояния на уровне Ферми, всеми другими состояниями электрон-

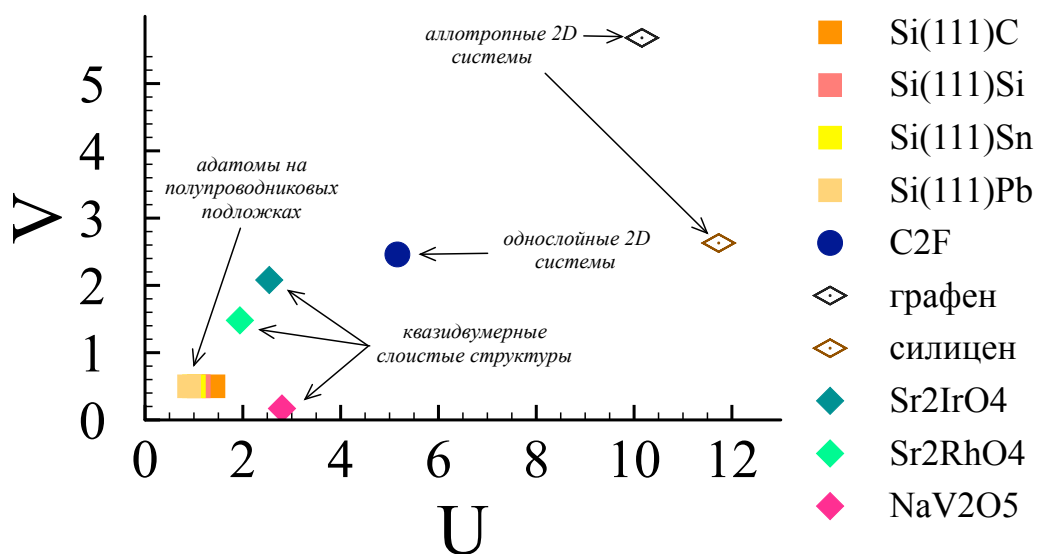


Рисунок 3.3 — Классификация соединений, в которых наблюдаются сильные нелокальные кулоновские взаимодействия. Все величины приведены в единицах эВ.

Таблица 3.1 — Величины интеграла перескока t , локального U и нелокального V кулоновских взаимодействий для систем, отмеченных на рисунке 3.3.

Соединение	t , эВ	U , эВ	V , эВ	Метод	Источник
NaV ₂ O ₅	0.4	2.8	0.17	Параметризация LDA+U расчетов	[176]
Sr ₂ IrO ₄		2.54	2.08	cRPA	[177]
Sr ₂ RhO ₄		1.94	1.48	cRPA	[177]
графен	2.8	10.16	5.68	cRPA	[11; 60]
силицен	1.14	11.73	2.63	cRPA	[11]
C ₂ F	0.23	5.16	2.46	cRPA	[7]
Si(111):C	0.038	1.4	0.5	cRPA	[8]
Si(111):Si	0.050	1.1	0.5	cRPA	[8]
Si(111):Sn	0.042	1.0	0.5	cRPA	[8]
Si(111):Pb	0.042	0.9	0.5	cRPA	[8]

ного спектра. В случае решеточных моделей мы используем базис функций Ванье (1.8). Из этого уравнения можно видеть, что сильная делокализация функций Ванье приводит к их большому взаимному перекрытию, и, как следствие, к большому значению параметра нелокального кулоновского взаимодействия V . Величина же локального параметра U , напротив, увеличивается, когда функция Ванье локализована на одном узле. Это подтверждается наблюдаемой закономерностью при рассмотрении класса квазидвумерных структур, элементы которого (NaV₂O₅, Sr₂RhO₄, Sr₂IrO₄) изображены ромбами на рисунке 3.3. V является $3d$ -металлом, Rh - $4d$, а Ir - $5d$, и чем выше главное квантовое число, тем более протяженной будет электронная орбиталь. Как следствие, при большем перекрытии функций Ванье соединения будут лежать выше по оси V на диаграмме.

Максимальные значения U и V среди рассмотренных можно наблюдать у графена и силицена, относящихся к аллотропным 2D структурам. Было показано, что в графене электроны обладают самой высокой подвижностью среди известных материалов [180] и большой оценочной величиной кулоновских параметров [11; 60]. Последующая функционализация, то есть осаждение атомов на поверхность, является критически важной для итогового использования материала, поскольку позволяет управлять различными физическими и химическими свойствами [181]. Вследствие функционализации графена, например, атомами фтора, электронная структура материала меняется, и в результате на уровне Ферми можно наблюдать четко отделенную зону (рисунок 3.4 (г)), что

является нетипичным, поскольку подобные особенности электронного спектра ранее наблюдались только в соединениях переходных металлов. Также функционализация приводит к формированию функции Ванье иного вида, что представлено на рисунке 3.4(б). В результате, на диаграмме можно видеть, что значения U и V функционализированной структуры становятся в 2 раза меньше по сравнению с чистым графеном.

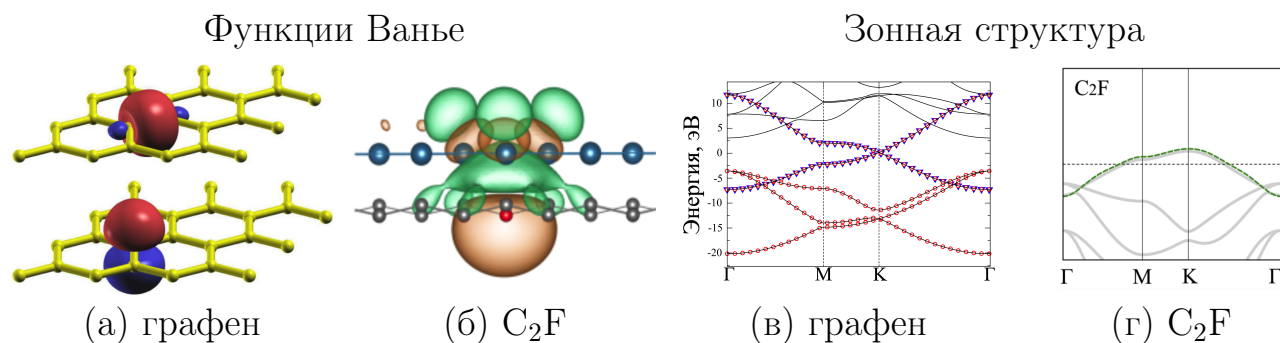


Рисунок 3.4 — Изображение функций Ванье и зонной структуры (а), (в) — чистого графена [182] и (б), (г) — графена, функционализированного атомами фтора C₂F [7]. На рисунке (в) сплошными линиями показаны зоны, полученные из DFT расчета, треугольниками обозначены зоны, рассчитанные проецированием на атомные p_z орбитали и окружностями — проецирование на атомные p_z орбитали на каждом атоме и sp^2 на каждом другом атоме. На рисунке (г) серыми линиями показаны зоны, полученные из LDA расчета, зеленой линией выделена зона, полученная при помощи однозонной модели.

Другой группой материалов, отмеченной на диаграмме, являются адатомные системы на полупроводниковой подложке. Данные материалы также отличаются зонной структурой, в которой на уровне Ферми наблюдается одна выделенная зона, в то время как чистая подложка является полупроводниковой и имеет узкую щель. В результате, на диаграмме данные соединения находятся в области с малыми значениями U и V относительно остальных. Данный класс отличается от предыдущих, поскольку является единственным, имеющим объемную кристаллическую решетку, что отчасти объясняет вид функции Ванье.

Таким образом, рассмотрев диаграмму 3.3 и особенности электронной структуры соединений разных видов, можно сделать ряд выводов о том, что а) в объемных материалах величина параметров кулоновского взаимодействия намного меньше, чем в двумерных, б) функционализация поверхности может значительно изменить свойства материала.

Максимально локализованные функции Ванье могут быть использованы в качестве базиса при решении решеточной модели. Данный подход позволяет применять DMFT и ее расширения для широкого спектра сильно коррелированных материалов. Однако, создание теоретических моделей так или иначе

сводится к рассмотрению идеализированных систем. Несмотря на постоянное совершенствование используемых подходов, для получения полноценного инструмента необходимы проверки выдвигаемых гипотез экспериментально. Это приводит нас к необходимости синтезировать материал с заданными свойствами, что является колоссально сложной задачей [183] на текущий момент времени.

В работе [184] Р. Фейнманом было показано, что для моделирования квантовых явлений необходимо использовать квантовый симулятор, так как при использовании классической машины Тьюринга [185] время выполнения алгоритма будет экспоненциально замедляться. В качестве квантовых симуляторов активно изучаются системы *ультрахолодных атомов в оптических решетках* [186; 187]. Оптическая решетка создается при помощи двух лазерных лучей. Когда атомы освещаются лазерными лучами, электрическое поле лазера создает дипольный момент в атомах, который в свою очередь взаимодействует с электрическим полем. Данное взаимодействие изменяет энергию состояний атомов в зависимости от интенсивности и частоты лазера. Оптическую решетку можно представить как периодический «ландшафт» потенциальной энергии, получаемый в результате образования стоячей волны вследствие интерференции. Геометрия решетки определяется конфигурацией лучей, а глубина потенциальных ям регулируется интенсивностью лазера. Однако, существуют некоторые важные отличия между кристаллическим твердым телом и оптической решеткой, которые необходимо подчеркнуть. Прежде всего масштаб рассматриваемых энергий очень разный: в то время как типичный параметр решетки в системах с холодными атомами составляет порядка 1 мкм, в кристалле он равен примерно 0.1 нм [188]. Это означает, что для наблюдения аналогичных процессов, происходящих в твердом теле при температуре порядка 100 К, в системах с холодными атомами необходимо использовать температуры порядка мкК или нК [189; 190]. Преимуществом использования оптических решеток является удобство зондирования, поскольку ультрахолодные атомы не требуют сверхбыстрых зондов и позволяют проследить не только статические эффекты, но и динамические свойства в масштабах мс или даже секунд [191]. Более того, в отличие от электронов, которые являются заряженными частицами и сильно связаны со сложной твердотельной средой, атомы электронейтральны и почти полностью отделены от своей среды. Также, в отличие от реальных материалов,

где нарушение порядка, колебания решетки и структурные дефекты неизбежны, *решетки, создаваемые светом, являются жесткими (без вибраций), без дефектов и полностью контролируемые* [188].

На сегодняшний день выполнены основополагающие эксперименты, в которых были воссозданы двумерная [192] и трехмерная оптические решетки [193], рассмотрены различные фазовые состояния и воспроизведен переход металл-изолятор [16], что подтверждает возможность моделировать свойства твердых тел, используя атомные газы [194].

В подавляющем большинстве работ взаимодействие между атомами являлось короткодействующим, то есть достаточно было учитывать взаимодействие только с соседними атомами [195]. Данный факт показывает, что *расширенная модель Хаббарда может быть экспериментально реализована в данного рода искусственно синтезируемых системах* и открывает возможность изучать квантовые эффекты и проверять теоретические гипотезы.

3.3 Экранирование локального кулоновского отталкивания при учете межузельного зарядового взаимодействия

Вопрос об экранировании локального параметра U в модели Хаббарда межузельным потенциалом V широко обсуждался и ранее, например, в работах [11; 87; 132; 196]. Анализ посредством вариационного принципа [11] предсказывает в простом приближении механизм линейного экранирования, где результирующее взаимодействие представляется как

$$U^* = U - V. \quad (3.1)$$

С данной точки зрения, межузельное взаимодействие способствует созданию парной заселенности [11]. Дальнейшее исследование [197] показало, что эффективность экранирования зависит от силы кулоновских корреляций в конкретной системе и экранированное взаимодействие должно определяться как

$$U^* = U - \alpha V. \quad (3.2)$$

Ренормализующий фактор α стремится к 1 с увеличением хаббардовского отталкивания U , то есть, согласно вариационному принципу, максимальное экранирование реализуется в режиме изолятора Мотта.

С другой стороны в EDMFT экранированное взаимодействие задается следующим образом [56]:

$$U(i\nu_m) = U + \Lambda(i\nu_m), \quad (3.3)$$

где бозонная гибридизационная функция $\Lambda(i\nu_m)$, введенная в уравнении (1.30), является динамическим взаимодействием, возникающим вследствие наличия бозонного резервуара в эффективной примесной модели. EDMFT аппроксимация, представленная в части 1.2.2, может быть получена в точном пределе большой размерности D , когда на решетке Бете с ближайшими соседними взаимодействиями $v_0/\sqrt{2D}$ (где v_0 некоторый фиксированный параметр) эффективное динамическое взаимодействие представляется примесной восприимчивостью [56]:

$$\Lambda(i\nu_m) = v_0^2 X(i\nu_m). \quad (3.4)$$

Таким образом, экранирование квадратично подавляется при малых v_0 и типичный энергетический масштаб экранирования, частота экранирования [196] представляется как

$$\Omega_s = \frac{\int_0^\infty d\nu \text{Im}\Lambda(\nu + i\delta)/\nu}{\int_0^\infty d\nu \text{Im}\Lambda(\nu + i\delta)/\nu^2} \quad (3.5)$$

и определяется величиной локальных зарядовых возбуждений. Из-за расщепления квазичастичного пика в режиме изолятора Мотта зарядовые возбуждения соответствуют исключительно переходам между зонами выше и ниже уровня Ферми. Таким образом, *зарядовые возбуждения сдвигаются в область высоких энергий, в результате получается большая частота экранирования порядка запрещенной зоны*. Аналогичное поведение наблюдается при конечных размерностях, где было обнаружено, что *EDMFT предсказывает только слабые экранирующие эффекты в режиме изолятора* [87]. Поскольку метод ED можно применять как численную схему для решения примесной задачи в различных корреляционных режимах, обсуждение в [87] и [132] может быть дополнено путем сравнения экранирования в фазах ферми-жидкости и изолятора Мотта.

На рисунке 3.5 изображен график плотности состояний в металлической фазе в области средних корреляций при $U = 2.0$ эВ. Результаты серии вычислений для $0 \leq V \leq 0.5$ эВ на правой панели рисунка 3.5 демонстрируют увеличение спектрального веса на уровне Ферми при увеличении V . Как видно на левой панели, на которой приведено сравнение $V = 0.0$ эВ и $V = 0.5$ эВ, *межузельное взаимодействие экранирует хаббардовское отталкивание, и пики, соответствующие верхней зоне, смещаются в сторону квазичастичного пика.*

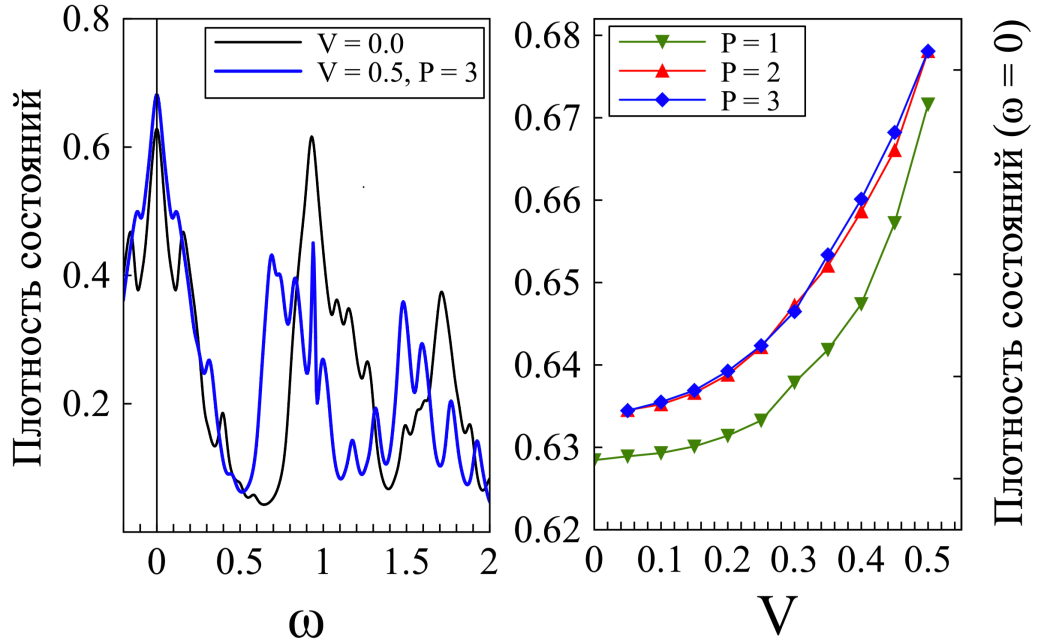


Рисунок 3.5 — Левая часть: особенности плотности состояний, соответствующие квазичастичному пику и верхней хаббардовской зоне. Расчеты были выполнены для $U = 2$ конечным и нулевым межузельным кулоновским взаимодействием V . Правая часть: значение плотности состояний на уровне Ферми для различных значений параметра V (соответствует голубым ромбам на рисунке 3.1). P обозначает количество энергетических уровней, использованных для дискретизации бозонного резервуара. Расчеты были выполнены с температурным размытием $\delta = \pi/\beta$. Все величины приведены в единицах эВ, плотность состояний - в форм. ед. / эВ.

Чтобы оценить влияние дискретизации бозонного резервуара на вид корреляционных функций на действительных частотах, были проведены расчеты с разным количеством энергетических уровней $P = 1, 2$ и 3 при фиксированном количестве орбиталей в фермионном ($K = 5$). На правой панели рисунка 3.5 можно видеть, что количество уровней, равное $P = 1$ или $P = 2$, оказывает заметное влияние на спектральный вес на уровне Ферми, в то время как разница между решениями с $P = 2$ и $P = 3$ незначительна.

На рисунке 3.6 показан спектр локальных зарядовых возбуждений $\text{Im}X_{\text{loc}}(\nu + i\delta)$ на действительных частотах. Как обсуждалось выше, в EDMFT

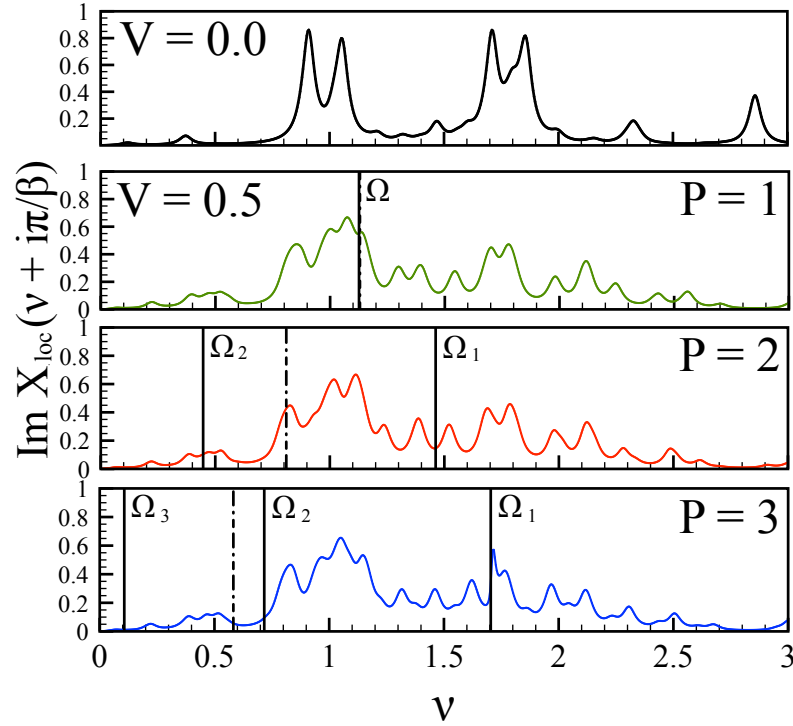


Рисунок 3.6 — Спектр локальных зарядовых возбуждений для $U = 2.0$ эВ без учета межузельного взаимодействия (первых график) и при $V = 0.5$ эВ (нижние графики).

Толстые вертикальные линии показывают самосогласованные моды Ω_p в бозонном резервуаре, они учитывают количество P использованных уровней в бозонном резервуаре. Вертикальные пунктирные линии обозначают экранированную частоту Ω_s , определяемую уравнением (3.5). Все величины приведены в единицах эВ.

можно ожидать, что энергетический масштаб экранирующих мод Ω_p , которые вносят вклад в динамическое взаимодействие Λ , определяется типичными энергиями локальных зарядовых возбуждений. Как становится ясно из второй панели для $P = 1$, единственной энергии бозонного резервуара Ω недостаточно для учета широкого спектра зарядовых возбуждений в фазе ферми-жидкости при $U = 2.0$ эВ и $V = 0.5$ эВ. Однако, уже при $P = 2$ гораздо меньшие Ω_2 учитывают низкоэнергетические зарядовые возбуждения (данные представлены на третьем графике рисунка 3.6 и во второй строке таблицы 2.1). Этот вклад в Λ является важным, поскольку малые энергетические моды усиливают экранирующий эффект [132]. Моды с малой энергией учитывались при $P > 1$, следовательно, ответственны за разницу в спектральном весе на уровне Ферми в правой панели рисунка 3.5 при переходе от $P = 1$ к $P = 2,3$ уровней бозонного резервуара. Сравнивая верхнюю панель рисунка 3.6 при $V = 0.0$ с нижними панелями при $V = 0.5$ эВ, можно также видеть, что сами низкоэнергетические возбуждения усиливаются межузельным взаимодействием V . Это соответствует смещению спектрального веса ближе к уровню Ферми в левой панели рисунка 3.5 из-за экранирования отталкивания Хаббарда $U = 2.0$ эВ на

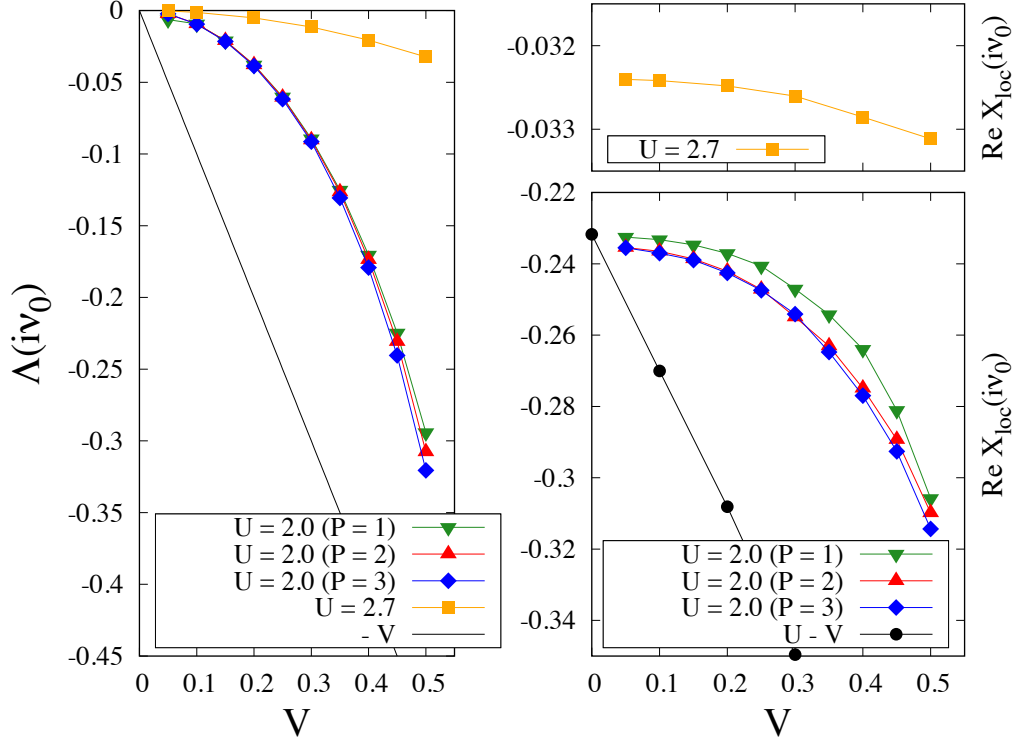


Рисунок 3.7 — Левый график: значение бозонной гибридизационной функции Λ при наименьшей мацубаровской частоте $i\nu_0 = 0$ как функция V в металлической фазе (обозначены треугольниками и ромбами) и в фазе изолятора (обозначены желтыми квадратами в соответствии с символикой, использованной на рисунке 3.1). Линия $-V$ характеризует статическое экранирование согласно упрощенной оценке при помощи вариационного принципа, представленной в работе [11]. Верхний правый график: локальная восприимчивость $X_{\text{loc}}(i\nu_0)$ в фазе изолятора. Нижний правый график: $X_{\text{loc}}(i\nu_0)$ в металлической фазе, символы, обозначенные черным, соответствуют расчетам при $U^* = U - V$. $P = 1$ бозонных уровней были использованы при расчете в фазе моттовского изолятора, в фазе Ферми жидкости сравнивались результаты для $P = 1, 2, 3$. Все величины приведены в единицах эВ.

$\Lambda(i\nu_0) \sim -0.3$, что делает энергии перехода между квазичастичным пиком и верхней хаббардовской зоной меньше.

Вертикальные пунктирные линии на рисунке 3.6 обозначают частоту экранирования в уравнении (3.5), которое для конечного числа уровней бозонного резервуара аналитически может быть представлено как

$$\Omega_s = \frac{\sum_p (\mathcal{W}_p^2 / \Omega_p)}{\sum_p (\mathcal{W}_p^2 / \Omega_p^2)}. \quad (3.6)$$

Можно видеть, что значение Ω_s сильно привязано к наименьшей моде Ω_p .

Чтобы сравнить эффекты экранирования в фазах Ферми жидкости и изолятора Мотта, динамическое взаимодействие $\Lambda(i\nu)$ при $i\nu_0 = 0$ как функция V изображено в левой панели на рисунке 3.7. В металлической фазе при $U = 2.0$

эВ поведение $\Lambda(i\nu_0)$ не согласуется с вариационной оценкой в уравнении (3.1). Это расхождение еще больше ощутимо для экранирования в изоляторном режиме при $U = 2.7$ эВ, где $\Lambda(i\nu_0)/(-V) \ll 1$. В отличие от фазы ферми-жидкости, где низкоэнергетические зарядовые возбуждения служат медиатором для значительных экранирующих эффектов V на графике плотности состояний, зарядовые возбуждения в фазе изолятора смещаются в область высоких энергий. Поэтому энергии бозонного резервуара Ω_p остаются большими в фазе изолятора для разного количества уровней бозонного резервуара (для сравнения данные представлены в последней строке таблицы 2.1). Расчеты подтверждают, что для значений U и V , соответствующим режиму глубокого изолятора, то есть достаточно далеко от границ фазовых переходов, изменение спектральной функции вследствие экранирования наблюдается только в высокоэнергетической области. В верхней правой части рисунка 3.7 можно видеть, что в таком случае низкоэнергетические зарядовые возбуждения в свою очередь почти не испытывают усиления от V . С другой стороны, в фазе ферми-жидкости низкоэнергетические зарядовые возбуждения усиливаются за счет V , что видно на нижней правой панели рисунка 3.7. Уже при малых V требуется хотя бы одна низкоэнергетическая мода Ω_p и, следовательно, $P > 1$ для учета этих возбуждений (данные представлены на рисунке 3.6 и во второй строке таблицы 2.1).

Предполагается, что EDMFT недооценивает экранирование в фазе изолятора при половинном заполнении: динамически экранированное взаимодействие в локальной примесной задаче EDMFT учитывает лишь средний эффект нелокального потенциала, создаваемого зарядами на соседних узлах решетки на саму примесь. Следовательно, когда на примеси создается двойное заполнение, локальная часть задачи EDMFT полностью учитывает прирост потенциальной энергии на примеси из-за слабо экранированного локального взаимодействия, но одновременно игнорирует уменьшение потенциальной энергии за счет создания вакансии на соседнем участке. Этот механизм, однако, является физической интерпретацией вариационного принципа и приводит в первом приближении к экранированию, которое является линейным по нелокальному потенциалу. EDMFT, мы предполагаем, игнорирует этот эффект и не предсказывает линейный характер экранирования ни в фазе ферми-жидкости, ни в фазе изолятора Мотта.

Доказательства плохого описания изолятора EDMFT были даны в недавней публикации, в которой подчеркивается важность диаграммы обмена Фока на границе фаз между фазой зарядового упорядочения и фазой изолятора Мотта [92]. *При диаграммном расширении EDMFT можно ожидать, что для достижения другого механизма локального экранирования необходима согласованная перенормировка динамически экранированного локального взаимодействия.* Действительно, в фазе ферми-жидкости был обнаружен механизм линейного экранирования с помощью согласованной версии метода дуальных бозонов [175]. Очевидной является необходимость дальнейшего исследования экранирования локальных параметров в изоляторе, и предложенная численная схема на базе метода точной диагонализации может способствовать входу в изоляторный режим.

3.4 Влияние учета нелокального кулоновского взаимодействия в пределах нескольких координационных сфер на собственно-энергетическую часть

Результаты, представленные ранее в диссертационном исследовании, были получены для расширенной модели Хаббарда, характеризующейся межузельным кулоновским взаимодействиями с соседями в пределах первой координационной сферы. Поэтому интерес представляет изучение влияния кулоновского взаимодействия с дальними соседями на корреляционные характеристики, такие как собственно-энергетическая часть функции Грина. Был исследован эффект учета нелокального зарядового взаимодействия V_{ij} для трех координационных сфер. Для этого параметр V_{ij} был проскалирован как $V_{ij}/V = a/|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, где a - параметр решетки. На рисунке 3.8 (б) и (в) изображены графики мнимой части собственно-энергетической части $\Sigma(i\omega_n)$ на мацубаровских частотах, рассчитанные при значениях локального кулоновского параметра $U = 2.0$ эВ и $U = 2.4$ эВ. Параметр межузельного кулоновского взаимодействия был выбран равным $V = 0.5$ эВ, соответствующим фазе сильно коррелированного металла. Параметры расположены вблизи точек, изображенным римскими цифрами II и III на рисунке 3.1. Значения V_{ij} рассчитывались как $V_{ij} = V_{01}/r_{ij}$.

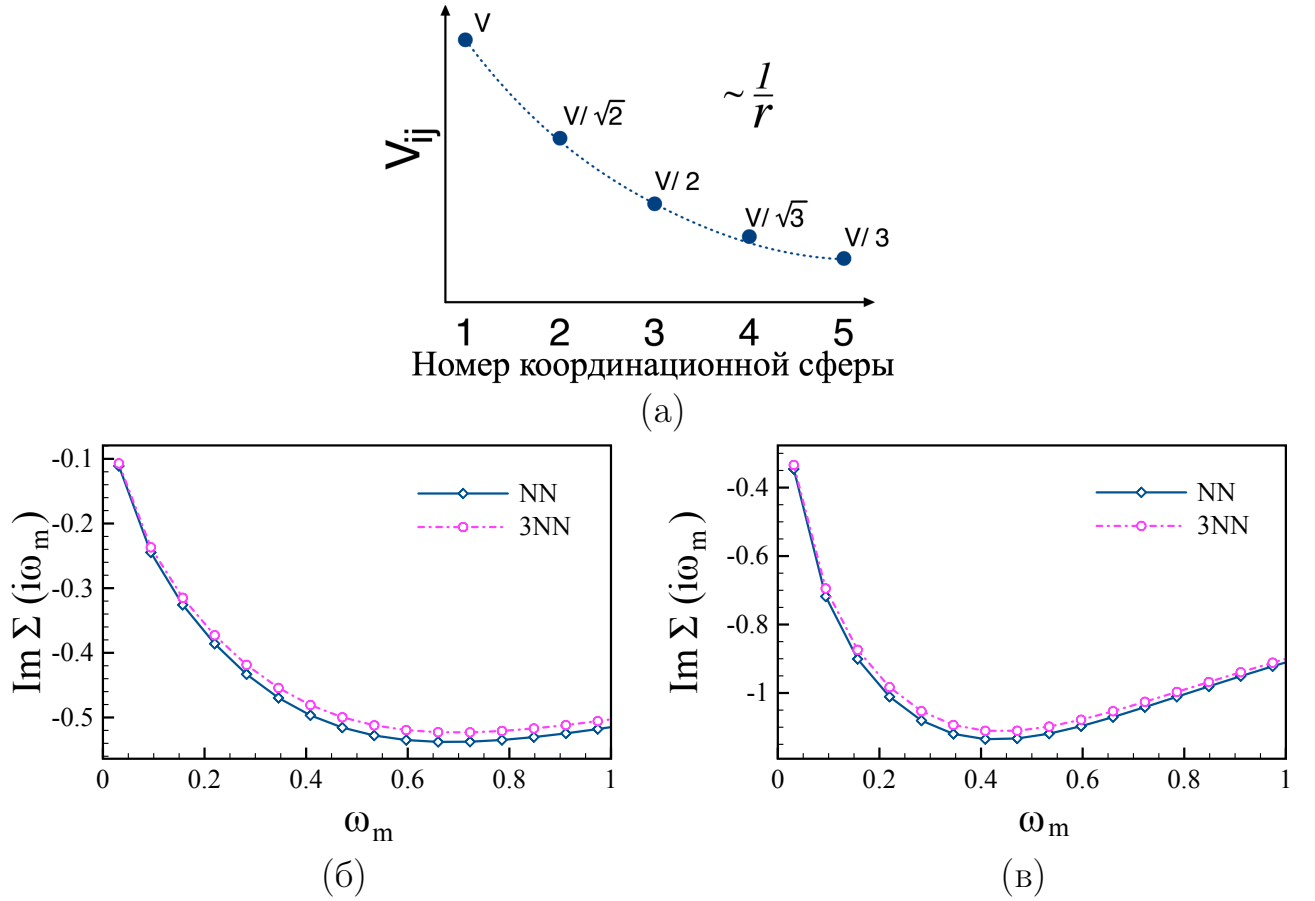


Рисунок 3.8 — (а) График зависимости межузельного кулоновского взаимодействия V от порядкового номера координационной сферы, (б) мнимая компонента собственно-энергетической части $\text{Im}\Sigma(i\omega_m)$, рассчитанная для параметров $U = 2.0$ эВ, $V_{01} = 0.5$ эВ, (в) мнимая компонента собственно-энергетической части $\text{Im}\Sigma(i\omega_m)$ расчеты для параметров $U = 2.4$ эВ, $V_{01} = 0.5$ эВ. Все величины на рисунках (а) и (б) приведены в единицах эВ.

На данных графиках можно видеть, что при увеличении количества учтенных координационных сфер, значение собственно-энергетической части уменьшается. Данное поведение может быть объяснено дополнительным экранированием локального кулоновского параметра U . Таким образом, можно заключить, что учет большего количества координационных сфер, приводит к ослаблению электронных корреляций. Данный результат согласуется с приведенным в работе [132], где исследовалось влияние нелокальных корреляций на поведение системы в методе GW+EDMFT. Различие между полученными графиками является незначительным, однако, стоит ожидать, что при рассмотрении соединений с большей величиной параметра нелокального кулоновского взаимодействия V_{ij} изменение станет более существенным.

Таблица 3.2 — Параметры локального кулоновского отталкивания U и межузельного обменного взаимодействия J , выбранные для анализа влияния учета последних на электронные и магнитные свойства системы.

	U , эВ	J , эВ
I	1.0	0.05
II	2.0	0.03
III	2.4	0.01
IV	2.7	0.01

3.5 Влияние учета нелокальных магнитных взаимодействий на одночастичные и двухчастичные спектральные функции

В данном параграфе рассматривается влияние учета межузельных обменных взаимодействий на электронные свойства системы в различных режимах локальных корреляций в расширенной модели Хаббарда, определенной на квадратной решетке при половинном заполнении, и сравнение с результатами, полученными методом СТQМС. Расчеты для всех конфигураций параметров, представленных в таблице 3.2, проводились при значении интеграла перескока между ближайшими соседями в пределах первой координационной сферы, равным $t = 0.25$ эВ, и обратной температуре $\beta = 10$ эВ $^{-1}$. Данная температура лучше всего подходит для определения основной тенденции и не является близкой к температуре Нееля.

На рисунке 3.9 представлены графики плотности состояний, полученные при различной дискретизации фермионного и бозонного резервуаров. Конфигурация I соответствует фазе ферми-жидкости, значение U — слабым корреляциям, снижение интенсивности пика мало. Конфигурация II также находится в режиме металла, а значение U соответствует умеренным корреляциям, изменение интенсивности центрального пика функции плотности состояний становится значительным. Это может быть объяснено тем, что решение находится в окрестности фазового перехода металл - изолятор. Конфигурации III и IV соответствуют фазе изолятора Мотта, соответственно, величина параметра U — сильным корреляциям. В данных точках при учете межузельного обменного взаимодействия наблюдается изменение вида спектральной функции: пики, находящиеся ближе к уровню Ферми, либо теряют интенсивность, либо происходит перенос спектральной плотности в область хаббардовских зон. Это гово-

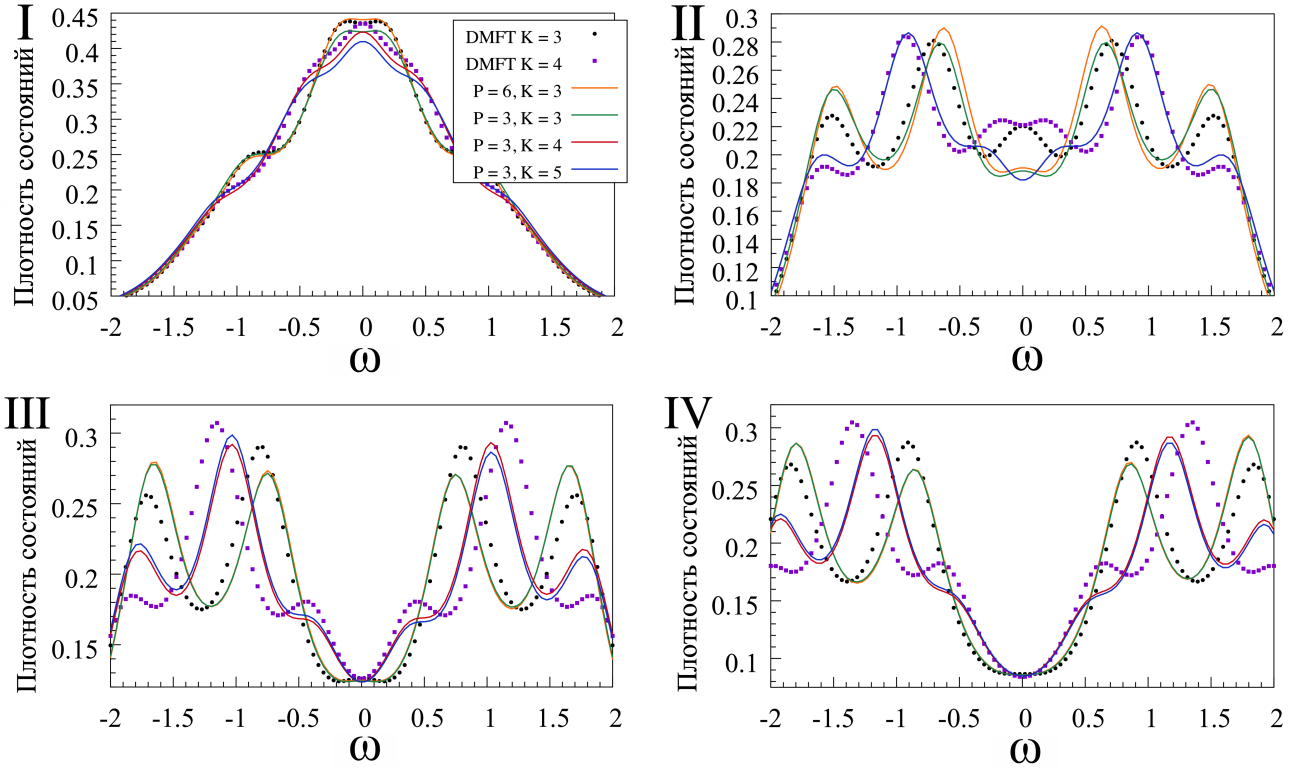


Рисунок 3.9 — Графики плотности состояний, соответствующих конфигурациям параметров I - IV с учетом (сплошные линии) и без учета (пунктирные линии) межузельного взаимодействия. Все величины приведены в единицах эВ, плотность состояний - в форм. ед. / эВ.

рит о том, что *при учете межузельного обменного взаимодействия в EDMFT система имеет тенденцию к более изоляторному поведению по сравнению с DMFT расчетом.*

В ходе проведения численного эксперимента было выявлено, что при увеличении количества эффективных орбиталей в фермионном резервуаре с $K = 3$ до $K = 4$ наблюдается изменение вида функции плотности состояний. Это связано с тем, что аппроксимация пика в области уровня Ферми одним энергетическим уровнем является недостаточной, что было описано в предыдущей главе. Увеличение количества эффективных орбиталей в бозонном резервуаре P при неизменном K не влияет на результат.

На рисунке 3.10 представлены графики двучастичной функции Грина (функции восприимчивости) на действительных частотах. При учете нелокальных обменных взаимодействий можно наблюдать формирование низкоэнергетического пика в режиме сильных корреляций (конфигурации III и IV).

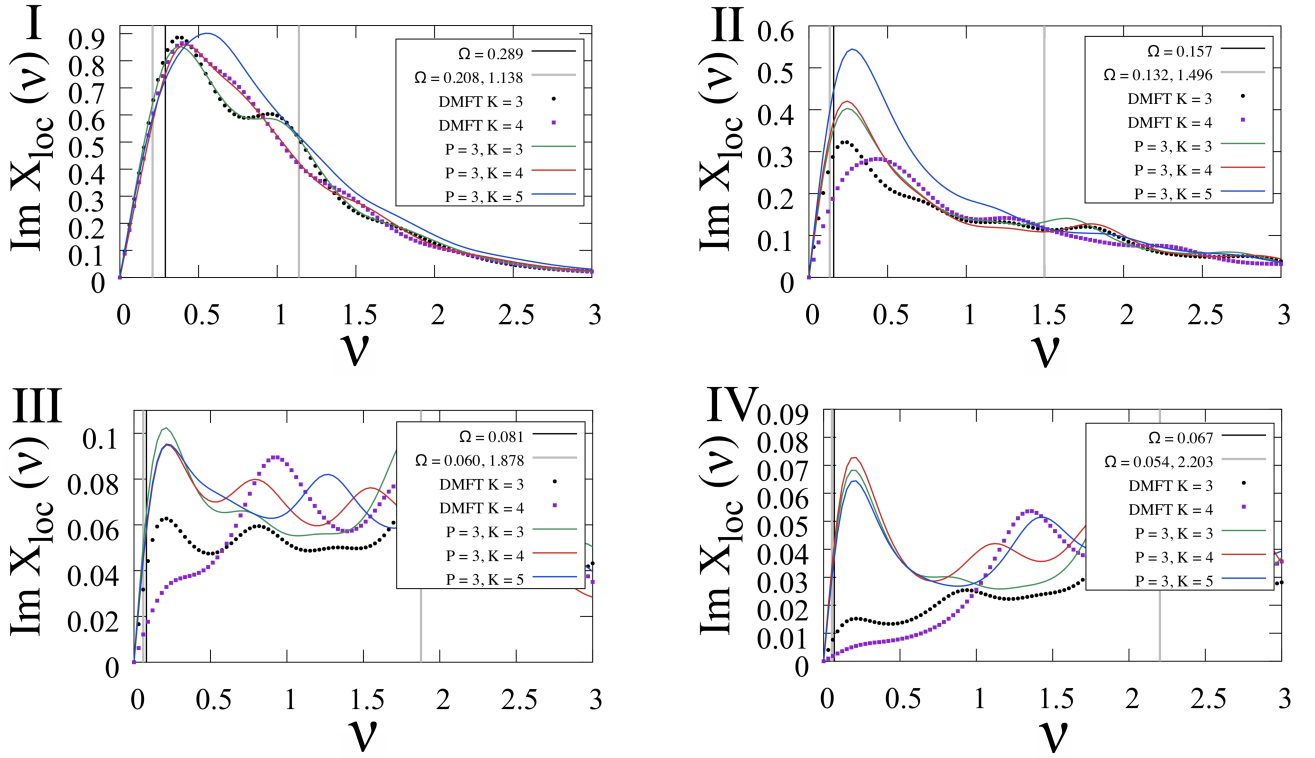


Рисунок 3.10 — Графики функции восприимчивости, соответствующие конфигурациям параметров I - IV с учетом (сплошные линии) и без учета (пунктирные линии) межузельного взаимодействия. Все величины приведены в единицах эВ.

3.6 Выводы к главе

В данной главе был проведен анализ применимости разработанного численного подхода для решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля. Было рассмотрено, как предложенная численная схема воспроизводит границы фазовых переходов при учете нелокальных зарядовых взаимодействий и подробно обсуждено экранирование локального кулоновского параметра в решеточной модели. Было представлено, как количество учитываемых координационных сфер влияет на силу электронных корреляций в системе: вследствие дополнительного экранирования локальных параметров сила корреляций уменьшается. Также было рассмотрено изменение спектральных функций при учете межузельных обменных взаимодействий. Все расчеты проводились для расширенной модели Хаббарда, определенной на квадратной решетке, при половинном заполнении.

Проведение сравнительных расчетов для ED и QMC в разных корреляционных режимах подтверждает, что в большинстве случаев для дискретизации бозонного резервуара достаточно двух экранирующих мод при учете зарядо-

вых взаимодействий. Это согласуется с результатами из работы [132], в которых обнаруживаются два доминирующих режима экранирования в разных областях диаграммы EDMFT. Исключением является граница между фазами изолятора и зарядового упорядочения, где требуется не менее двух энергетических уровней из-за широкого спектра зарядовых возбуждений вблизи перехода. При рассмотрении межузельных обменных взаимодействий подтверждается достаточность учета *одной эффективной орбитали на каждую проекцию в спинном пространстве.* Рассмотрение функций плотности состояний для различных корреляционных режимов указывает на то, что система имеет тенденцию к более изоляторному поведению.

Более значительной является дискретизация фермионного резервуара по сравнению с дискретизацией бозонного. Примером может служить предпочтительность фазы металла, либо изолирующей фазы при использовании нечетного или четного количества фермионных уровней соответственно. Тем не менее были представлены границы фаз, которые хорошо согласуются с результатами, полученными методом СТQМС [88; 132].

Было обнаружено, что при половинном заполнении в фазе глубокого изолятора метод точной диагонализации хорошо подходит для решения задачи EDMFT. Данные результаты дополняет сравнение эффектов экранирования с результатами, полученными в работе [132], предсказанных при помощи EDMFT, и с упрощенной оценкой при помощи вариационного принципа, представленного в статье [11]. Также, согласно расчетам, полученным при помощи EDMFT, в фазе изолятора Мотта расширенная модель Хаббарда практически не подвержена влиянию межузельного взаимодействия на низкоэнергетический одночастичный спектр при экранировании кулоновского локального параметра U .

Изложенные в данной главе результаты опубликованы в статье [135].

Глава 4. Моделирование поверхностных sp -систем при помощи расширенной теории динамического среднего поля

С появлением возможности манипулировать отдельными атомами при помощи технологии сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) [198] возрос интерес к адатомным системам на подложках [199–204]. Такой экспериментальный метод позволяет не только проектировать системы для новых логических переключателей [205; 206] или атомной памяти [207; 208], но также изучать новые классы сильнокоррелированных систем. Ярким примером могут служить поверхностные наносистемы с s и p электронами: недавние исследования моттовских переходов в монослоях Sn на Ge(111) [209], подробное экспериментальное и теоретическое изучение структуры, электронных и магнитных свойств адатомов C, Si, Sn, Pb на подложке Si(111) [9; 210] и Sn на поверхности SiC(0001) [211]. Схематически структура поверхностных наносистем изображена на рисунке 4.1(а).

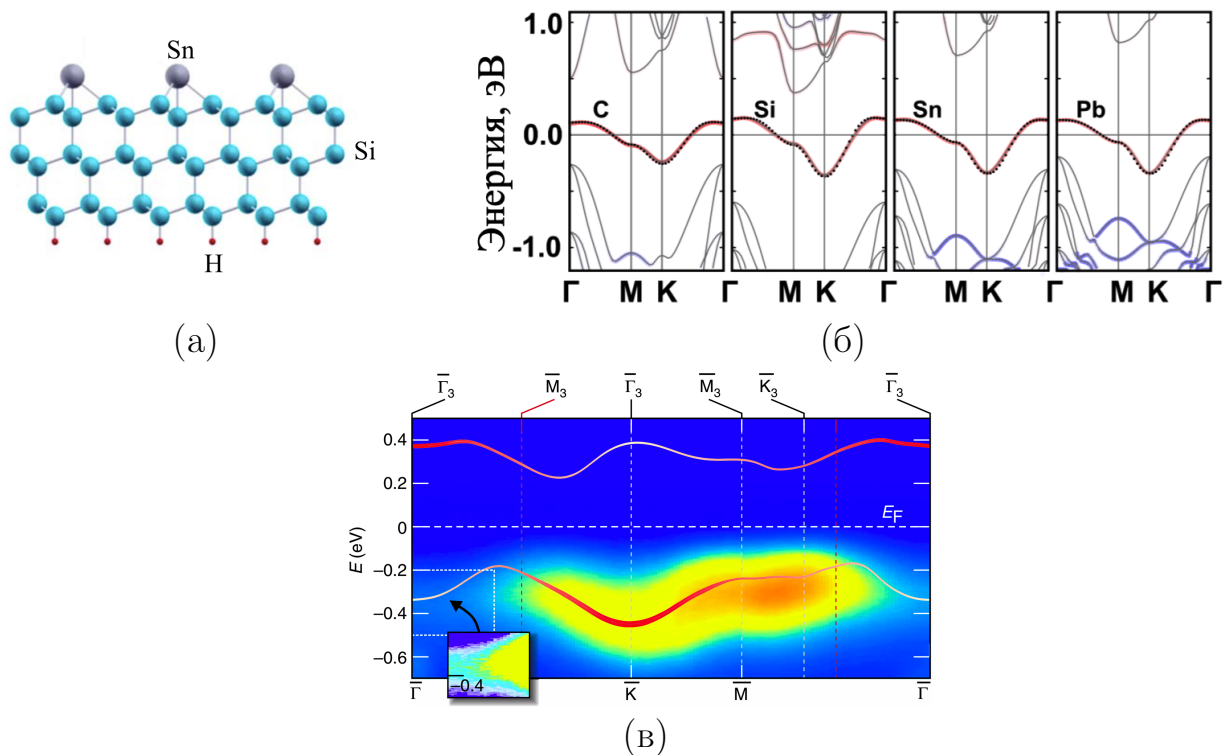


Рисунок 4.1 — Примеры адатомных сильно коррелированных систем с sp -электронами. (а)

Схематическое представление атомной структуры поверхностной системы на полупроводниковой подложке [212], (б) зонная структура адатомов C, Si, Sn, Pb на Si(111), полученная при помощи LDA приближения [8], (в) зоны, полученные LDA+DCA (красные линии) и результат, полученный ARPES (желто-оранжевая область) при $T = 60$ K [213].

В данных соединениях возникает уникальная ситуация, когда, согласно теоретическим расчетам методом LDA [8; 9; 214], наблюдается *четко отделенная узкая энергетическая зона на уровне Ферми с половинным заполнением* (рисунок 4.1(б)). Ранее подобная картина наблюдалась исключительно у соединений, включающих элементы с частично заполненной *d*-оболочкой, например в Ba_2IrO_4 [215]. В свою очередь системы с *sp*-электронами характеризуются гораздо более сильной гибридизацией атомных состояний, чем в случае *3d* соединений, вследствие большей пространственной протяженности волновых функций. Учитывая это, формирование узкой отделенной зоны на уровне Ферми представляется необычным.

В противовес теоретическим результатам, экспериментальные исследования [213], проводимые методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (Angle-resolved photoemission spectroscopy, *ARPES*), показывают, что при $T = 60$ К в $\text{Sn}/\text{Si}(111)$ наблюдаемая область лежит ниже уровня Ферми (обозначена желто-оранжевым цветом на рисунке 4.1(в)), что свидетельствует о том, что соединение не является металлом. Несогласованность результатов *ARPES* и LDA говорит о том, что для корректного описания данных соединений необходимо учитывать электронные корреляции в системе. Одним из вариантов является учет локального кулоновского отталкивания в методе LDA+U. При теоретическом описании поверхностных структур с *sp*-электронами возникает трудность, которая заключается в *сильной делокализации функций Ванье*, описывающих состояния на уровне Ферми [9]. Поэтому возникает вопрос, каким именно образом должен быть приложен потенциал U в случае, когда состояния не локализованы на атоме. Одним из вариантов решения данной проблемы является описание решеточной задачи на модельном уровне. На рисунке 4.1(в) представлено сравнение экспериментальных данных *ARPES* с теоретическими, полученными методами LDA+DCA (Dynamical cluster approximation, динамическое кластерное приближение [216], которое является приближением DMFT, где рассматривается не единственный выделенный узел, а кластер узлов) для $\text{Sn}/\text{Si}(111)$ [213]. Совпадение данных в нижней части спектра подтверждает предположение о том, что экспериментальные результаты хорошо воспроизводятся теоретическими моделями, учитывающими кулоновские корреляции. Кроме того, было установлено, что величина нелокального кулоновского отталкивания V сопоставима по величине с локальным параметром U [8], и, в резуль-

тате, параметр V также должен учитываться, чтобы получить максимальное реалистичное теоретическое описание данных материалов.

Таким образом, можно сказать, что очень важным является вопрос правильного и наиболее полного описания поверхностных sp -систем. Поэтому в данной главе рассматривается влияние учета локальных электронных корреляций и нелокальных кулоновских взаимодействий на электронные свойства поверхностных sp -систем при помощи расширенной теории динамического среднего поля.

4.1 Особенности электронной структуры фторированного и гидрогенизированного графена

Кроме кремниевых систем, описанных выше, сильные электрон-электронные корреляции в sp -системах наблюдаются также в графене [61; 217]. Изучение материалов на его основе является привлекательной областью исследования с перспективой применения в спинтронике [218; 219]. Первопринципные исследования графеновых систем [220—222] позволяют описать микроскопическую картину их электронной структуры только в основном состоянии. Поэтому обработка возбужденных состояний при помощи модельных гамильтонианов [223—225] представляет собой следующий важный шаг в описании рассматриваемых систем.

Основной целью данной главы является моделирование электронных свойств систем на основе графена C_2F и C_2H . Система C_2F , представляющая монослой фтора на графене, вызывает особый интерес, так как была реализована в эксперименте [226], что позволяет проверить достоверность теоретически получаемых результатов. С теоретической точки зрения [221; 226], атомы фтора при данной концентрации могут упорядочиваться двумя способами: образуя треугольную и квадратную подрешетки, называемые «chair» и «boat» конфигурациями соответственно, изображенные на рисунке 4.2(а) и 4.2(б). В теоретической работе [221] были рассмотрены оба варианта и при помощи DFT предсказано, что структура «chair» является более выгодной по энергии, что впоследствии было подтверждено экспериментально [226] (рисунок 4.2(в)).

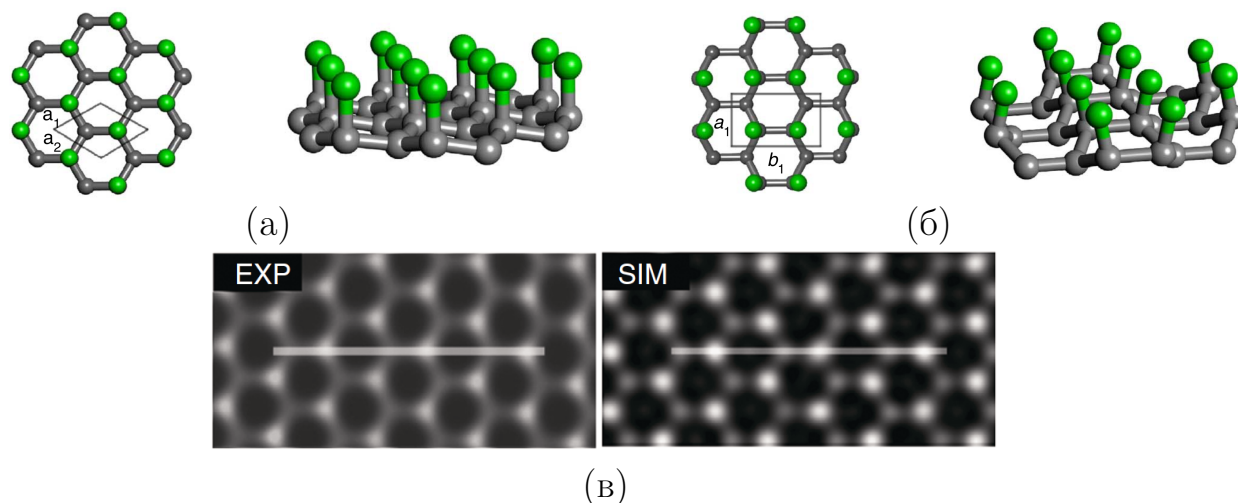


Рисунок 4.2 — Графическое представление структуры C_2F : (а) конфигурация «chair», вид сверху (слева) и сбоку (справа); (б) конфигурация «boat», вид сверху (слева) и сбоку (справа); (в) экспериментально полученные методом трансмиссионной (просвечивающей) электронной микроскопии (слева) и смоделированные (справа) *эквивалентные домены* структуры C_2F для данной конфигурации. Рисунки заимствованы из статьи [226].

В диссертационной работе для гидрогенизированного графена была также рассмотрена конфигурация «chair». На текущий момент для C_2H экспериментальных данных, аналогичных полученным для C_2F , нет, однако были получены интересные результаты при рассмотрении одного атома водорода на графене. Исследование методом сканирующей туннельной микроскопии, поддержанное теоретическими расчетами при помощи DFT, использовалось для описания формирования магнитного момента при адсорбции одного атома водорода на графеновую подложку [227]. Оказалось, что значительную спиновую поляризацию можно наблюдать на расстоянии вплоть до 3,5 нм от адатома водорода, что свидетельствует о значительной делокализации магнитного состояния в данной системе (рисунок 4.3).

На первом этапе исследования, представленного в диссертационной работе, были выполнены расчеты в приближении плоских волн, реализованном в пакете QUANTUM-ESPRESSO [228]. Обменно-корреляционный потенциал рассматривался в приближении LDA [229]. Для базиса плоских волн было применено ограничение по энергии 50 Ry и для зарядовой плотности – 400 Ry, в расчетах использовать сетка 64×64 k -точек. Поверхностные слои были разделены областью вакуума шириной 400 нм, и произведена полная релаксация структуры. Для того, чтобы построить модельный гамильтониан в базисе функций Ванье, были получены максимально локализованные функции Ванье при помощи процедуры, описанной в [66] и реализованной в пакете [230].

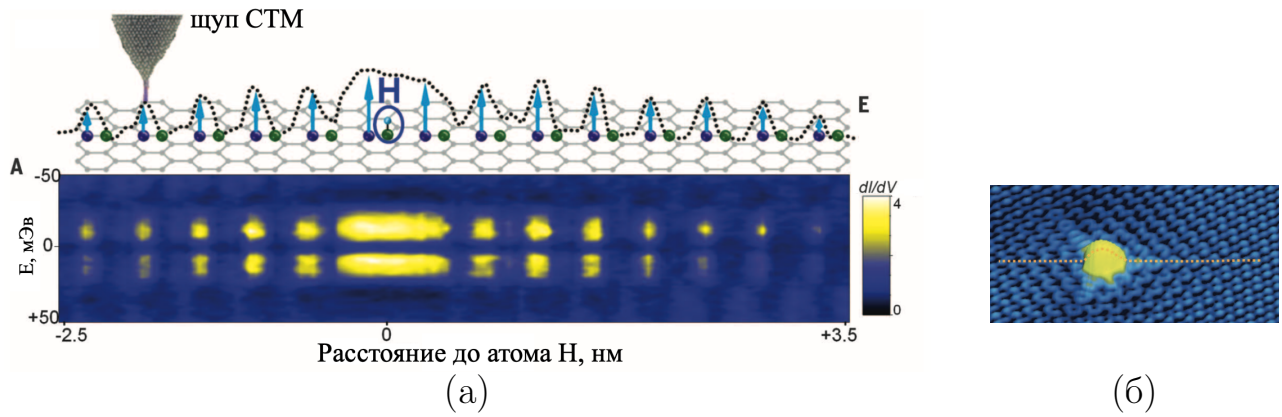


Рисунок 4.3 — (а) Картина дифференциальной проводимости $dI/dV(x, E)$ в зависимости от пространственной координаты x и энергии E , полученная методом сканирующей туннельной микроскопии, (б) топографическая картина расположения атома водорода на поверхности графена, пунктирной линией обозначена траектория движения щупа СТМ. Рисунки заимствованы из статьи [227].

На рисунке 4.4 представлены плотности состояний и зонная структура для соединений C_2F (слева) и C_2H (справа), полученные из LDA расчета (обозначены серым цветом) и для однозонной модели (обозначены зеленым и синим цветами соответственно). Можно видеть, что на уровне Ферми действительно формируется узкая зона, и оба соединения достаточно хорошо и полно описываются однозонной моделью. Это напоминает картину, наблюдаемую в кремниевых системах, поэтому ход исследования графеновых структур был выбран аналогично.

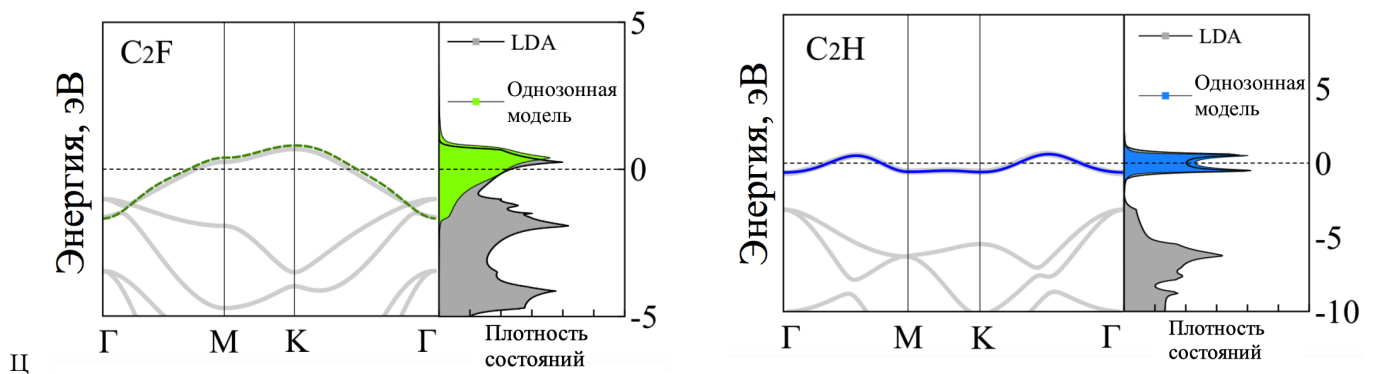


Рисунок 4.4 — Зонная структура и плотности состояний C_2F (слева) и C_2H (справа), полученные из LDA расчета и однозонной модели [7].

Для дальнейшего изучения описываемых соединений было необходимо параметризовать результаты DFT расчетов и провести рассмотрение на уровне модели. Функции Ванье представлены на рисунке 4.5. Они центрированы на несвязанном с адатомом атоме углерода (выделен красной точкой), что согласуется с результатами, полученными ранее [224]. Как можно видеть, функции Ванье, также, как и в случае кремниевых систем, сильно делокализованы в ре-

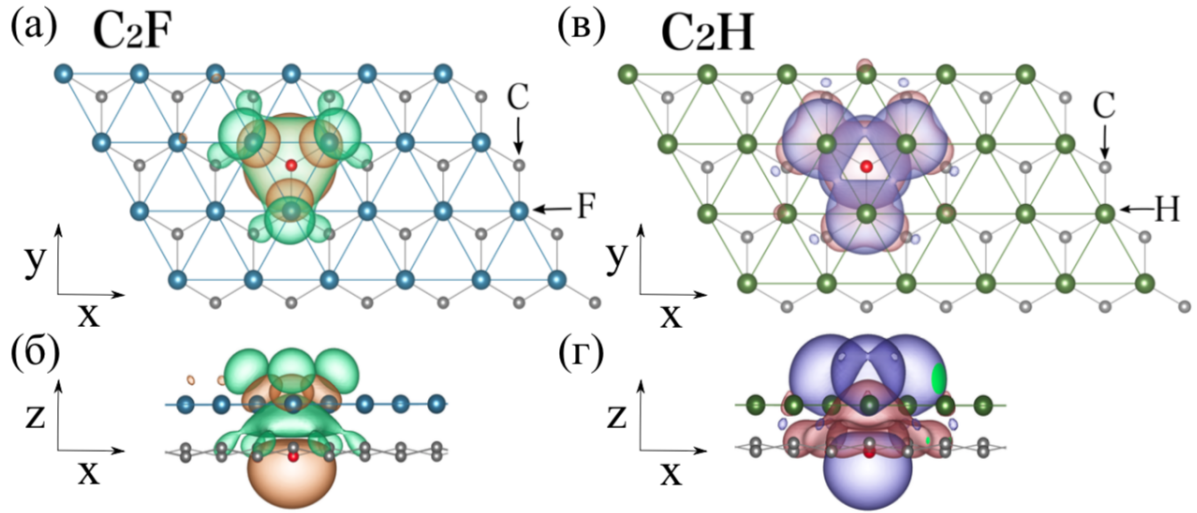


Рисунок 4.5 — Функции Ванье, описывающие зону на уровне Ферми в C_2F (а), (б) и C_2H (в), (г). Функции Ванье центрированы на свободный атом углерода, обозначенный красной точкой.

альном пространстве, что должно быть учтено при анализе экспериментальных данных [231].

В результате параметризации были получены данные для величины интегралов перескока, локального и нелокального кулоновских параметров для C_2F и C_2H соединений, которые представлены в таблице 4.1.

Таблица 4.1 — Величина интеграла перескока, локального и нелокального кулоновского взаимодействия (в эВ) для C_2F и C_2H [7], полученные параметризацией DFT расчетов. Визуализация интегралов перескока приведена на рисунке 4.6.

	t_1	t_2	t_3	U	V
C_2F	-0.232	0.006	-0.021	5.16	2.46
C_2H	0.038	-0.114	-0.098	4.69	2.19

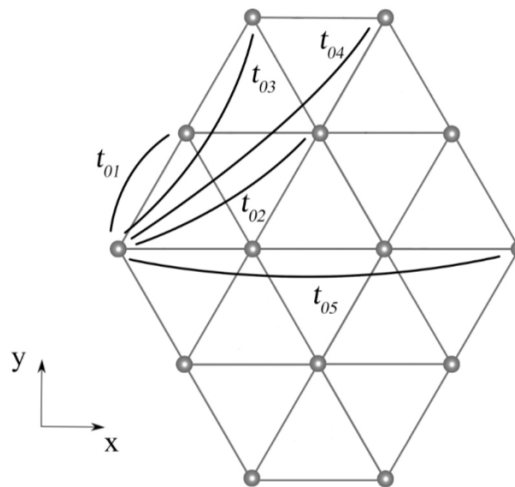


Рисунок 4.6 — Схематическое представление путей взаимодействия электронов между ближайшими соседями в треугольной модели. Серыми сферами обозначены функции Ванье, центрированные на несвязанных с адатомами атомах углерода.

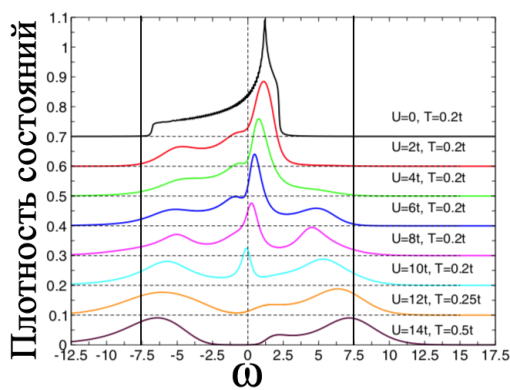
Используя базис функций Ванье и данные, полученные из DFT расчета, мы можем перейти к решению решеточной задачи, используя теорию динамического среднего поля.

4.2 Решение уравнений DMFT для случая треугольной решетки

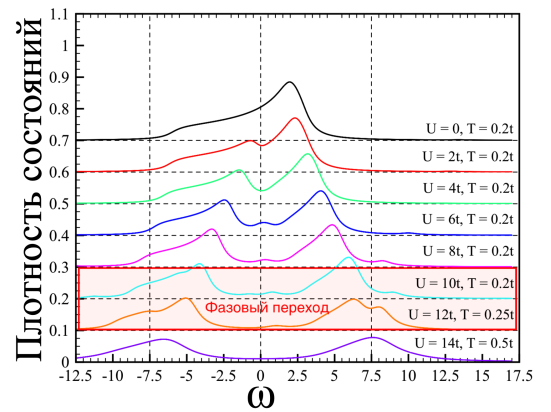
В предыдущей части были получены достаточно сложные решеточные модели для описания соединений C_2F и C_2H , учитывающие интегралы перескока электрона в пределах трех координационных сфер и локальные и нелокальные кулоновские взаимодействия в пределах первой. Данные параметры необходимо учитывать в рамках расширенной модели Хаббарда. Ранее решение уравнений DMFT для треугольной решетки уже было выполнено при помощи квантового метода Монте-Карло на дискретном времени (Discrete Time QMC, DTQMC) [232]. Поскольку разработанная в данном диссертационном исследовании расчетная схема основана на методе точной диагонализации, первым разумным шагом является ее проверка и сравнение с предыдущими результатами. Для этого был воспроизведен переход металл-изолятор Мотта при половинном заполнении для конечной температуры при аналогичных параметрах, представленных в работе [232]. Модель Хаббарда в данном случае учитывает перескок электрона только между ближайшими соседями в пределах первой координационной сферы. На рисунках 4.7(а) и 4.7(б) изображены графики плотности состояний решетки для одинаковых параметров. Необходимо отметить, что точное совпадение результатов невозможно вследствие принципиального отличия расчетных методов, однако наблюдается согласованное положение основных пиков в режимах слабых и сильных корреляций. Исключением является область вблизи фазового перехода: при использовании метода точной диагонализации можно наблюдать расщепление центрального пика при меньших значениях параметра локального кулоновского взаимодействия.

Амплитуда пиков в методе точной диагонализации может варьироваться при помощи температурного размытия. Поскольку увеличение данного параметра приводит к образованию рудиментных пиков, которые могут исказить общий вид кривой, в представленных расчетах использовалось значение $i\pi/\beta$,

где β - обратная температура. В проведенных расчетах использовались 5 эффективных орбиталей фермионного резервуара, и одна орбиталь примеси. Наилучшее совпадение можно видеть при отсутствии корреляций, что соответствует параметрам $U = 0, T = 0.2t$, и в режиме сильных корреляций при параметрах $U = 14t, T = 0.5t$. Необходимо отметить, что в области фазового перехода наблюдается различное поведение кривых, что является очевидным, поскольку данная область является критической, расчетные схемы становятся неустойчивыми. Также решающим может оказаться то, с параметров для какого фазового состояния (металлического или изоляторного) стартовало самосогласование конкретного расчета. Основным отличием результатов, полученных методом ED является то, что переход в фазу изолятора происходит при меньших значениях локального кулоновского отталкивания U , а именно при параметрах $U = 10t, T = 0.2t$, в то время как DTQMC дает металлическое решение. Это может быть обусловлено дискретизацией фермионного резервуара и температурным размытием, используемым в леммановском представлении при построении функции Грина: если уменьшить размытие, то два пика, расположенные вблизи уровня Ферми, образуют один, а хаббардовские зоны будут иметь более гладкую форму. В результате можно сделать вывод, что схема решения, основанная на методе точной диагонализации, для модели Хаббарда, определенной на треугольной решетке, при половинном заполнении качественно согласуется с данными QMC, при рассмотрении системы вне окрестности фазового пере-



(а) Квантовый метод Монте-Карло на дискретном времени



(б) Метод точной диагонализации

Рисунок 4.7 — Плотности состояний модели треугольной решетки в разных корреляционных режимах, рассчитанные (а) квантовым методом Монте-Карло на дискретном времени [232], (б) методом точной диагонализации. Красным прямоугольником выделена область фазового перехода металл - изолятор. Все величины приведены в единицах эВ, плотность состояний - в форм. ед. / эВ.

да. Отдельно стоит отметить тот факт, что данные, с которыми проводилось сравнение результатов ED, получены QMC на дискретном времени, что также может играть роль в образовании пика на уровне Ферми в области фазового перехода.

4.3 Учет локальных электронных корреляций и нелокальных кулоновских взаимодействий при описании наносистем C_2F и C_2H

В данной части главы рассматривается влияние межузельных зарядовых взаимодействий на электронные свойства систем C_2F и C_2H и более подробно приведены детали проведения расчета. Векторы обратной решетки имеют координаты $\mathbf{b}_1 = \left\{ -2\pi; \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \right\}$, $\mathbf{b}_2 = \left\{ -2\pi; -\frac{2\pi}{\sqrt{3}} \right\}$. Значение интеграла перескока $t(\mathbf{k})$ в обратном пространстве, используемое в расчетной схеме для трех координационных сфер, рассчитывается по формуле (4.1). Значение параметра $V(\mathbf{q})$ в обратном пространстве рассчитывается аналогично, но включает в себя только первое слагаемое, описывающее взаимодействие в пределах первой координационной сферы.

$$\begin{aligned}
 t(\mathbf{k}) = & 2t_1 \left[\cos(k_x) + \cos\left(\frac{1}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right) + \cos\left(\frac{1}{2}k_x - \frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right) \right] + \\
 & + 2t_2 \left[\cos\left(\frac{3k_x}{2} + \frac{\sqrt{3}k_y}{2}\right) + \cos(\sqrt{3}k_y) + \cos\left(\frac{3k_x}{2} - \frac{\sqrt{3}k_y}{2}\right) \right] + \\
 & + 2t_3 \left[\cos(2k_x) + \cos(k_x + \sqrt{3}k_y) + \cos(k_x - \sqrt{3}k_y) \right]
 \end{aligned} \quad (4.1)$$

Изначально для обоих соединений были проведены DMFT расчеты ($V = 0$) и построена плотность состояний (рисунок 4.8), графики которой можно сравнить с полученными методом LDA (рисунок 4.4). Несмотря на то что температуры расчетов LDA ($T = 0$ эВ) и DMFT ($T = 1/\beta = 0.01$ эВ) отличаются, температурными эффектами в данном сравнении можно пренебречь, поскольку она существенно ниже, чем характерные использованные величины (интегралы перескока и взаимодействия). Из рисунка 4.8 видно, что учет локальных электронных корреляций приводит к тому, что *при низких температурах состоя-*

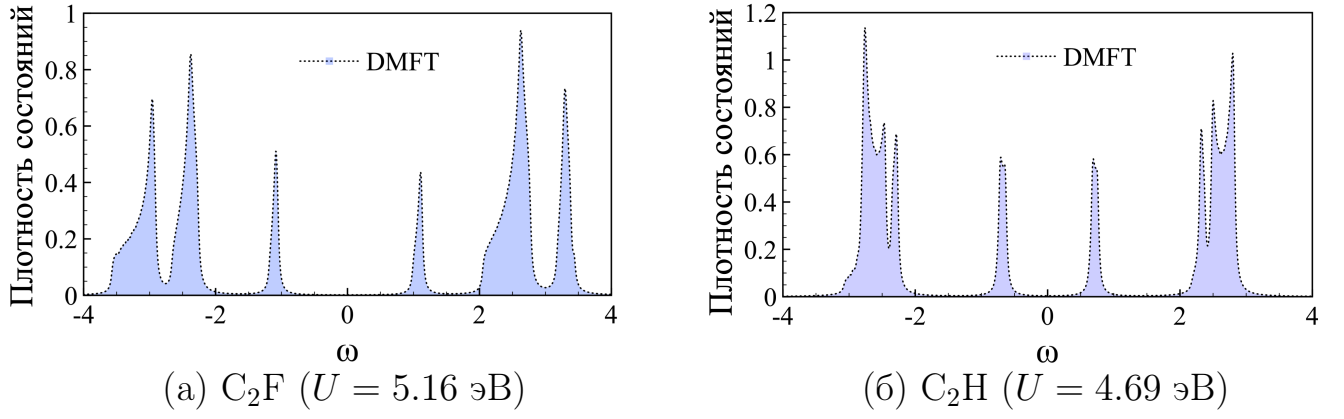


Рисунок 4.8 — Плотности состояний, рассчитанные при помощи DMFT при $T = 0.01$ эВ. Расчеты проведены для величины локального кулоновского взаимодействия U , полученной методом cRPA (указана в подписи к графику). Все величины приведены в единицах эВ, плотность состояний - в форм. ед. / эВ.

ние систем определяется как изоляторное, в то время как LDA предсказывает металлическое. Аналогичное разногласие также наблюдалось при рассмотрении адатомов на кремниевой подложке, упоминавшихся выше, методами LDA и DMFT+GW [8], что еще раз подчеркивает важность учета корреляций в поверхностных системах с *sp*-электронами.

Чтобы рассмотреть влияние зарядовых взаимодействий на формирование особенностей электронного спектра C_2F в расширенной модели Хаббарда, построенной на треугольной решетке, была решена упрощенная модель, в которой учитывается зарядовое взаимодействие только с соседями в пределах первой координационной сферы. На рисунке 4.9 приведены графики плотности состояний для разных значений зарядового взаимодействия V при величине локального кулоновского отталкивания $U = 5.16$ эВ, полученной методом cRPA, соответствующей основному состоянию [7], обратная температура принималась $\beta = 5$, $\beta = 50$ и $\beta = 100$ эВ⁻¹. При данных параметрах отношение $U/t = 22.43$, что соответствует изолятору с широкой щелью. В работе [7] также была произведена оценка параметра V , величина которой составляет порядка $U/2$. Поскольку данный параметр может варьироваться экспериментально в опытах с ультрахолодными атомами, была произведена оценка влияния различной величины V относительно U на вид спектральной функции соединения C_2F . В результате, можно видеть, что увеличение параметра межузельного кулоновского взаимодействия в пределах от $V = 0$ до $V = 0.9U$ приводит к сужению щели. Данный факт свидетельствует о дополнительном экранировании локального параметра в модели Хаббарда и позволяет предсказать, что в окрестности фазового пере-

хода величина данного параметра может быть решающей и при достаточной величине привести к смене фазового состояния.

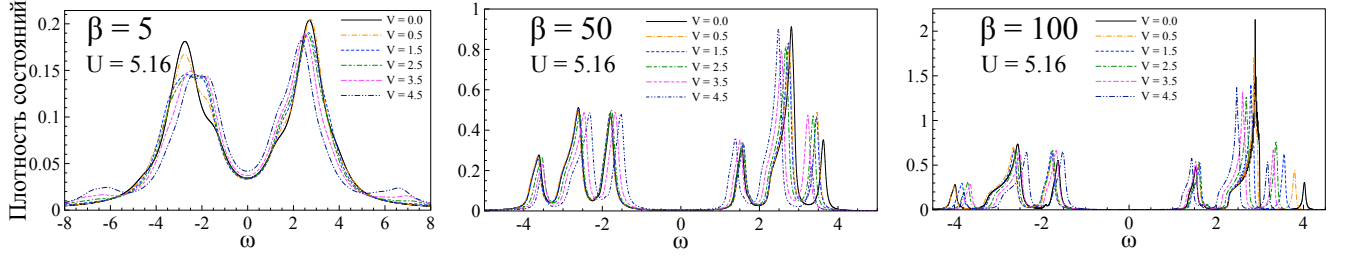


Рисунок 4.9 — Плотности состояний адатомной системы C_2F для $U = 5.16$ эВ, $t = 0.233$ эВ при значении обратной температуры $\beta = 5$ эВ $^{-1}$, $\beta = 50$ эВ $^{-1}$ и $\beta = 100$ эВ $^{-1}$. Все величины приведены в единицах эВ, плотность состояний - в форм. ед. / эВ.

На рисунке 4.10 представлена фазовая диаграмма, демонстрирующая изменение границы фазового перехода металл-изолятор в расширенной модели Хаббарда, определенной на треугольной решетке, решаемой при помощи EDMFT. Расчеты проводились с учетом нелокальных зарядовых взаимодействий между ближайшими соседями в пределах первой координационной сферы при половинном заполнении. Диапазон значений параметра кулоновского отталкивания на узле решетки U выбирался таким образом, чтобы описать область, близкую к фазовому переходу. Согласно полученным данным, представленным на рисунке 4.7(б), фазовый переход при решении уравнений DMFT наблюдается между $U = 10t$ и $U = 12t$. Поэтому в данной области значений U были проведены расчеты с уменьшенным шагом. В результате, было выявлено, что фазовый переход находится в $U = 10.8t$. В результате, в случае C_2F граница фазового перехода металл-изолятор не изменяется при учете большего количества координационных сфер и также соответствует значению локального кулоновского отталкивания $U = 2.5$ эВ.

Из диаграммы видно, что при учете нелокальных зарядовых взаимодействий в системе наблюдается тенденция к усилению делокализации электронов, что выражается смещением границы в область больших значений U (зеленая штрих-пунктирная линия). Данный факт согласуется с расчетами для модели Хаббарда на квадратной решетке, описанных в разделе 3.1. Также можно заметить, что точка с параметрами $U/t = 13.79$ эВ и $V/t = 10.77$ эВ соответствует так называемой тройной точке, в окрестности которой расположены сразу три фазы: металлическая, изоляторная и фаза зарядового упорядочения. Данная точка является крайней в серии расчетов, так как при последующем увеличении параметра V для большего, но близкого по значению U , переход в

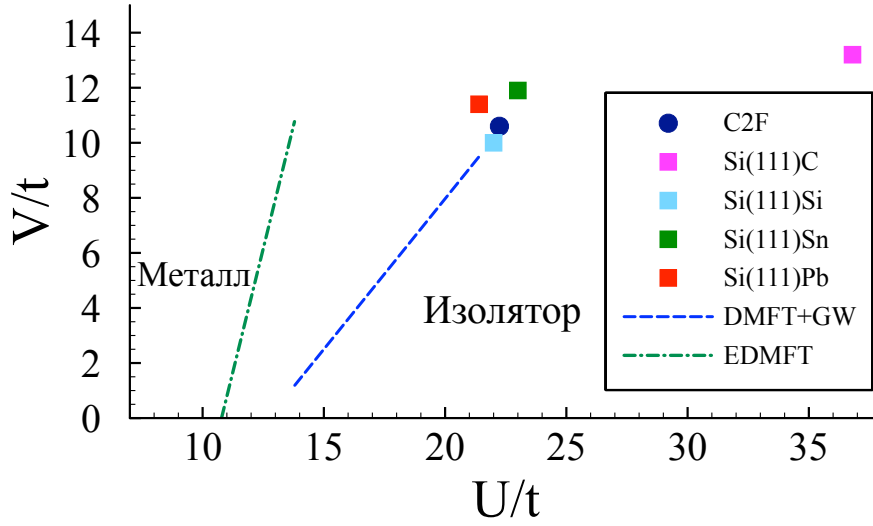


Рисунок 4.10 — Фазовая диаграмма в плоскости $U - V$ расширенной модели Хаббарда на треугольной решетке при половинном заполнении. Штрих-пунктирная зеленая линия обозначает переход, полученный решением уравнений EDMFT, для C_2F соединения с учетом интегралов перескока для трех координационных сфер и кулоновского взаимодействия с соседями в пределах первой. Штрихованная синяя линия представляет границу фазового перехода, полученную методом GW+DMFT для поверхностных структур адатомов C, Si, Sn, Pb на поверхности Si(111) [8].

металлическое состояние достигнуто не было. Граница перехода в фазу зарядового упорядочения не рассматривалась. Однако, аналогичное поведение расчета наблюдалось при определении тройной точки на фазовой диаграмме 3.1 для квадратной решетки, из чего можно сделать вывод о ее положении в данном случае.

Для сравнения на графике приведена также граница перехода металл-изолятор для Si(111): {C, Si, Sn, Pb} (обозначена синей пунктирной линией), полученная методом GW+DMFT [8]. Атомная структура рассмотренных соединений: адатомов на подложке и адатомов на листе графена, — является принципиально разной, но на модельном уровне в обоих случаях решалась расширенная модель Хаббарда с учетом нелокальных кулоновских параметров в пределах первой координационной сферы. Поэтому наблюдаемая разница между полученными границами возникает вследствие использования разных аппроксимаций и численных методов. Основное отличие EDMFT и GW+DMFT заключается в том, что в первом подходе учитываются только нелокальные взаимодействия, а во втором — в том числе нелокальные корреляции между электронами. В случае EDMFT использовался метод точной диагонализации, а в GW+DMFT — QMC, другими словами, можно было бы ожидать эффект вследствие дискретизации энергетических спектров. Однако, как было показа-

но ранее при рассмотрении квадратной решетки, ошибка численного метода намного меньше ошибки теоретической аппроксимации и не может принести достаточный вклад, чтобы принципиально изменить вид фазовой границы.

Вследствие того, что в разработанной численной схеме использовалась эффективной примесная модель с одним элементом, а не кластером узлов, нелокальные корреляции в рамках такой реализации не могут быть учтены. Таким образом, можно предположить, что в рассмотренных *sp*-структурах ощутимый вклад также вносят нелокальные корреляции между электронами. Данный результат является стимулом для дальнейшего развития разработанной численной схемы и может являться толчком для последующего ее усовершенствования.

4.4 Выводы к главе

В данной главе рассматривалось использование разработанной численной схемы решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля в применении к поверхностным *sp*-системам. В результате проведенного исследования было выявлено, что модели, игнорирующие многоэлектронные эффекты, описывают такие соединения некорректно. При рассмотрении поверхностных графеновых структур C_2F и C_2H при помощи теории динамического среднего поля данные соединения определяются как изоляторные, в то время как LDA расчет предсказывает их металлическое поведение. Кроме того, учет нелокальных зарядовых взаимодействий в *sp*-системах важен, поскольку приводит к сужению запрещенной зоны. Также была получена фазовая граница металл-изолятор для расширенной модели Хаббарда, определенной на треугольной решетке, методом EDMFT и проведено сравнение с данными, полученными при решении аналогичной решеточной задачи методом GW+DMFT. В результате было выявлено, что учет нелокальных взаимодействий в данного рода системах крайне важен и дает более точное описание, но может оказаться недостаточным вследствие неучета нелокальных корреляций между электронами.

Изложенные в данной главе результаты опубликованы в статье [7].

Заключение

В данной работе были исследованы модельные и реальные системы, характеризующиеся сильными локальными кулоновскими корреляциями. Для этого был разработан метод решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля на основе метода точной диагонализации. И там, где это было возможно, выполнялось сравнение с разными методами, результаты которых были получены ранее.

Основные результаты работы заключаются в следующем:

1. Был разработан численный подход решения уравнений расширенной теории динамического среднего поля, основанный на методе точной диагонализации, что позволило описывать сильно коррелированные системы в широком диапазоне модельных параметров.
2. Сравнение с данными, полученными квантовым методом Монте-Карло показало, что разработанная схема устойчива во всех корреляционных режимах и дает качественно и количественно верный результат. Анализ дискретизации бозонного резервуара в эффективной примесной модели показал, что минимальное необходимое количество эффективных уровней составляет не менее двух при рассмотрении зарядовых взаимодействий, и три для случая обменных взаимодействий.
3. Было исследовано влияние нелокальных зарядовых и обменных взаимодействий на электронные свойства модельной системы, описываемой расширенной моделью Хаббарда, определенной на квадратной решетке. В случае рассмотрения межузельных кулоновских взаимодействий наблюдается тенденция к сохранению металлического поведения системы и, наоборот, при учете обменных, - к более изоляторному. В обоих случаях наблюдаются низкоэнергетические возмущения в функции восприимчивости системы, что отражает важность учета нелокальных взаимодействий в системе.
4. При помощи разработанной схемы была решена задача описания зарядовых нелокальных взаимодействий в расширенной модели Хаббарда, определенной на треугольной решетке, при половинном заполнении. В результате была построена граница фазового перехода металл-изолятор с учетом зарядовых взаимодействий с ближайшими соседями в пределах первой координационной сферы.

5. С помощью предложенного подхода стало возможным проведение реалистичного моделирования электронных и магнитных свойств кристаллов и поверхностных наносистем при конечных температурах с учетом межузельных зарядовых и магнитных взаимодействий.

Рекомендации и перспективы дальнейшей разработки темы. В дальнейшем результаты данной диссертационной работы могут быть использованы при исследовании электронных и магнитных свойств поверхностных наносистем с сильными электрон-электронными корреляциями путем проведения современных численных экспериментов в рамках расширенной теории динамического среднего поля. Существенная экономия необходимых вычислительных ресурсов и расчетного времени характеризует метод точной диагонализации как достойный аналог квантовому методу Монте-Карло, позволяющий описывать системы в широком диапазоне параметров. Наилучшие результаты могут быть получены при использовании данных расчетных методов совместно. Выводы, сделанные относительно рассмотренных в данной работе поверхностных наносистем, могут быть полезными для дальнейшего исследования особенностей соединений этого класса, наблюдаемых экспериментально, способствуя развитию технологий в области хранения и обработки информации.

Автор выражает глубокую признательность научному руководителю, Мазуренко Владимиру Владимировичу, за терпение и оказанное внимание. Автор особенно благодарен Сергею Исакову, Лихтенштейну Александру Иосифовичу и Фридриху Крину за содействие в проведении исследований и плодотворные научные консультации и дискуссии. Автор выражает признательность сотрудникам Центра параллельных вычислений УрФУ и кафедры Теоретической физики и прикладной математики за помощь и поддержку. Отдельную благодарность автор выражает заведующему кафедрой ТФПМ, Мазуренко Владимиру Гавриловичу, за внимание и помощь. Автор выражает сердечную благодарность своим родителям, Нидзельской Ольге Владимировне и Медведеву Сергею Валерьевичу.

Список литературы

1. Prange R. E., Girvin S. M. The Quantum Hall Effect. — Springer, 1990.
2. Stewart G. R. Heavy-fermion systems // Rev. Mod. Phys. — 1984. — Oct. — Vol. 56, issue 4. — Pp. 755–787.
3. Hewson A. C. The Kondo Problem to Heavy Fermions. — Cambridge University Press, 1993. — (Cambridge Studies in Magnetism).
4. Anderson P. The Theory of Superconductivity in the High-Tc Cuprates. — Princeton University Press, 1997. — (Princeton series in physics).
5. Scalapino D. The case for dx² - y² pairing in the cuprate superconductig // Physics Reports. — 1995. — Vol. 250, no. 6. — Pp. 329–365.
6. Anisimov V., Izumov Y. Electronic structure of strongly correlated material. — 2010.
7. Role of direct exchange and Dzyaloshinskii-Moriya interactions in magnetic properties of graphene derivatives: C₂F and C₂H / V. V. Mazurenko, A. N. Rudenko, S. A. Nikolaev, D. S. Medvedeva, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson // Phys. Rev. B. — 2016. — Dec. — Vol. 94, issue 21. — P. 214411.
8. Long-Range Coulomb Interactions in Surface Systems: A First-Principles Description within Self-Consistently Combined *GW* and Dynamical Mean-Field Theory / P. Hansmann, T. Ayrar, L. Vaugier, P. Werner, S. Biermann // Phys. Rev. Lett. — 2013. — Apr. — Vol. 110, issue 16. — P. 166401.
9. Spin-orbit coupling and magnetic interactions in Si(111):C,Si,Sn,Pb / D. I. Badrtdinov, S. A. Nikolaev, M. I. Katsnelson, V. V. Mazurenko // Phys. Rev. B. — 2016. — Dec. — Vol. 94, issue 22. — P. 224418.
10. Electron correlations in narrow energy bands // Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. — 1963. — Vol. 276, no. 1365. — Pp. 238–257.

11. Optimal Hubbard Models for Materials with Nonlocal Coulomb Interactions: Graphene, Silicene, and Benzene / M. Schüler, M. Rösner, T. O. Wehling, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson // Phys. Rev. Lett. — 2013. — July. — Vol. 111, issue 3. — P. 036601.
12. Yao Z.-J., Li J.-X., Wang Z. D. Extended Hubbard model of superconductivity and charge-density-waves in the layered $2H$ transition metal dichalcogenides // Phys. Rev. B. — 2006. — Dec. — Vol. 74, issue 21. — P. 212507.
13. Dutta O., Sowinski T., Lewenstein M. Orbital physics of polar Fermi molecules // Phys. Rev. A. — 2013. — Feb. — Vol. 87, issue 2. — P. 023619.
14. Non-standard Hubbard models in optical lattices: a review / O. Dutta, M. Gajda, P. Hauke, M. Lewenstein, D.-S. Luhmann, B. A. Malomed, T. Sowinski, J. Zakrzewski // Reports on Progress in Physics. — 2015. — May. — Vol. 78, issue 066001.
15. Time-Resolved Observation and Control of Superexchange Interactions with Ultracold Atoms in Optical Lattices / S. Trotzky, P. Cheinet, S. Fölling, M. Feld, U. Schnorrberger, A. M. Rey, A. Polkovnikov, E. A. Demler, M. D. Lukin, I. Bloch // Science. — 2008. — Vol. 319, no. 5861. — Pp. 295–299.
16. Site-resolved imaging of a fermionic Mott insulator / D. Greif, M. F. Parsons, A. Mazurenko, C. S. Chiu, S. Blatt, F. Huber, G. Ji, M. Greiner // Science. — 2016. — Vol. 351, no. 6276. — Pp. 953–957.
17. Verwey E. J. W. Electronic Conduction of Magnetite (Fe_3O_4) and its Transition Point at Low Temperatures // Nature. — 1939. — Vol. 144. — Pp. 327–328.
18. Verwey E., Haayman P. Electronic conductivity and transition point of magnetite (“ Fe_3O_4 ”) // Physica. — 1941. — Vol. 8, no. 9. — Pp. 979–987.
19. Mark S. Senn J. P. W., Attfield J. P. Charge order and three-site distortions in the Verwey structure of magnetite // Nature. — 2012. — Vol. 481. — Pp. 173–176.

20. Brink J. van den, Khomskii D. I. Multiferroicity due to charge ordering // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2008. — Vol. 20, no. 43. — P. 434217.
21. Mott transition field effect transistor / D. M. Newns, J. A. Misewich, C. C. Tsuei, A. Gupta, B. A. Scott, A. Schrott // Applied Physics Letters. — 1998. — Vol. 73, no. 6. — Pp. 780–782.
22. Mott transition field effect transistor / D. M. Newns, J. A. Misewich, C. C. Tsuei, A. Gupta, B. A. Scott, A. Schrott // Appl. Phys. Lett. — 1998. — June. — Vol. 73, issue 6, no. 780.
23. A correlated nickelate synaptic transistor / J. Shi, S. D. Ha, Y. Zhou, F. Schoofs, S. Ramanathan // Nature Communications. — 2013. — Vol. 4. — P. 2676.
24. Excellent Selector Characteristics of Nanoscale VO₂ for High-Density Bipolar ReRAM Applications / M. Son, J. Lee, J. Park, J. Shin, G. Choi, S. Jung, W. Lee, S. Kim, S. Park, H. Hwang // IEEE Electron Device Letters. — 2011. — Nov. — Vol. 32, no. 11. — Pp. 1579–1581.
25. Voltage Control of Metal-insulator Transition and Non-volatile Ferroelastic Switching of Resistance in VO_x/PMN-PT Heterostructures / T. Nan, M. Liu, W. Ren, Z.-G. Ye, N. X. Sun // Scientific Reports. — 2014. — Vol. 4. — P. 5931.
26. VO₂, a Metal-Insulator Transition Material for Nanoelectronic Applications / K. Martens [et al.] // ECS Transactions. — 2012. — Apr. — Vol. 45. — Pp. 151–158.
27. Thermally tunable VO₂ SiO₂ nanocomposite thin-film capacitors / Y. Sun [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2018. — Vol. 123, issue 11. — P. 114103.
28. Two Series Oxide Resistors Applicable to High Speed and High Density Nonvolatile Memory / M.-J. Lee [et al.] // Advanced Materials. — Vol. 19, no. 22. — Pp. 3919–3923.

29. Mechanism and observation of Mott transition in VO₂-based two- and three-terminal devices / H.-T. Kim, B.-G. Chae, D.-H. Youn, S.-L. Maeng, G. Kim, K.-Y. Kang, Y.-S. Lim // *New Journal of Physics*. — 2004. — Vol. 6, issue 52.
30. First-order metal-insulator transitions in the extended Hubbard model due to self-consistent screening of the effective interaction / M. Schüler, E. G. C. P. van Loon, M. I. Katsnelson, T. O. Wehling // *Phys. Rev. B*. — 2018. — Apr. — Vol. 97, issue 16. — P. 165135.
31. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // *Phys. Rev.* — 1964. — Nov. — Vol. 136, 3B. — B864–B871.
32. Hafermann H. Dissertation, *Numerical Approaches to Spatial Correlations in Strongly Interacting Fermion Systems*, Hamburg. — 2009.
33. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Phys. Rev.* — 1965. — Nov. — Vol. 140, 4A. — A1133–A1138.
34. Langreth D. C., Mehl M. J. Beyond the local-density approximation in calculations of ground-state electronic properties // *Phys. Rev. B*. — 1983. — Aug. — Vol. 28, issue 4. — Pp. 1809–1834.
35. Becke A. D. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior // *Phys. Rev. A*. — 1988. — Sept. — Vol. 38, issue 6. — Pp. 3098–3100.
36. Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation / J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, C. Fiolhais // *Phys. Rev. B*. — 1992. — Sept. — Vol. 46, issue 11. — Pp. 6671–6687.
37. Heyd J., Scuseria G. E. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential // *The Journal of Chemical Physics*. — 2003. — Vol. 118, issue 8207.

38. First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: dynamical mean-field theory / V. I. Anisimov, A. I. Poteryaev, M. A. Korotin, A. O. Anokhin, G. Kotliar // Journal of Physics: Condensed Matter. — 1997. — Vol. 9, no. 35. — P. 7359.
39. Wang L., Maxisch T., Ceder G. Oxidation energies of transition metal oxides within the GGA+U framework // Phys. Rev. B. — 2006. — May. — Vol. 73, issue 19. — P. 195107.
40. Formation enthalpies by mixing GGA and GGA + U calculations / A. Jain, G. Hautier, S. P. Ong, C. J. Moore, C. C. Fischer, K. A. Persson, G. Ceder // Phys. Rev. B. — 2011. — July. — Vol. 84, issue 4. — P. 045115.
41. First-principles prediction of redox potentials in transition-metal compounds with LDA + U / F. Zhou, M. Cococcioni, C. A. Marianetti, D. Morgan, G. Ceder // Phys. Rev. B. — 2004. — Dec. — Vol. 70, issue 23. — P. 235121.
42. Feynman R. P. Space-Time Approach to Quantum Electrodynamics // Phys. Rev. — 1949. — Sept. — Vol. 76, issue 6. — Pp. 769–789.
43. Hedin L. New Method for Calculating the One-Particle Green's Function with Application to the Electron-Gas Problem // Phys. Rev. — 1965. — Aug. — Vol. 139, 3A. — A796–A823.
44. Hedin L. New Method for Calculating the One-Particle Green's Function with Application to the Electron-Gas Problem // Phys. Rev. — 1965. — Aug. — Vol. 139, 3A. — A796–A823.
45. Aryasetiawan F., Gunnarsson O. The GW method // Reports on Progress in Physics. — 1998. — Vol. 61, no. 3. — P. 237.
46. Aulbur W. G., Jönsson L., Wilkins J. W. Quasiparticle Calculations in Solids //. Vol. 54 / ed. by H. Ehrenreich, F. Spaepen. — Academic Press, 2000. — Pp. 1–218. — (Solid State Physics).
47. Sun Q., Chan G. K.-L. Quantum Embedding Theories // Accounts of Chemical Research. — 2016. — Vol. 49, no. 12. — Pp. 2705–2712. — PMID: 27993005.

48. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions / A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg // *Rev. Mod. Phys.* — 1996. — Jan. — Vol. 68, issue 1. — Pp. 13–125.
49. Sachdev S., Ye J. Gapless spin-fluid ground state in a random quantum Heisenberg magnet // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — May. — Vol. 70, issue 21. — Pp. 3339–3342.
50. Parcollet O., Georges A. Non-Fermi-liquid regime of a doped Mott insulator // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Feb. — Vol. 59, issue 8. — Pp. 5341–5360.
51. Kajueter H. Dissertation, *Interpolating perturbation scheme for correlated electron systems*, New Jersey. — 1996.
52. Chitra R., Kotliar G. Effect of Long Range Coulomb Interactions on the Mott Transition // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Apr. — Vol. 84, issue 16. — Pp. 3678–3681.
53. Chitra R., Kotliar G. Effective-action approach to strongly correlated fermion systems // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Mar. — Vol. 63, issue 11. — P. 115110.
54. Qimiao Si Silvio Rabello K. I., Smith J. L. Locally critical quantum phase transitions in strongly correlated metals // *Nature.* — 2001. — Oct. — Vol. 413.
55. Smith J. L., Si Q. Spatial correlations in dynamical mean-field theory // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Feb. — Vol. 61, issue 8. — Pp. 5184–5193.
56. Si Q., Smith J. L. Kosterlitz-Thouless Transition and Short Range Spatial Correlations in an Extended Hubbard Model // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Oct. — Vol. 77, issue 16. — Pp. 3391–3394.
57. Sun P., Kotliar G. Extended dynamical mean-field theory and GW method // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Aug. — Vol. 66, issue 8. — P. 085120.
58. Werner P., Casula M. Dynamical screening in correlated electron systems—from lattice models to realistic materials // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 2016. — Vol. 28, no. 38. — P. 383001.

59. The Interplay of Long Range Interactions and Electron Density Distributions in Polar and Strongly Correlated Materials / N. Kristoffel, A. Pishtshev, P. Rubin, M. Klopov // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. — 2017. — Jan. — Vol. 30, no. 1. — Pp. 91–96.
60. Strength of Effective Coulomb Interactions in Graphene and Graphite / T. O. Wehling, E. Sasioglu, C. Friedrich, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, S. Blügel // Phys. Rev. Lett. — 2011. — June. — Vol. 106, issue 23. — P. 236805.
61. Electron-Electron Interactions in Graphene: Current Status and Perspectives / V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira, F. Guinea, A. H. Castro Neto // Rev. Mod. Phys. — 2012. — July. — Vol. 84, issue 3. — Pp. 1067–1125.
62. Sharp Metal-Insulator Transition in a Random Solid / T. F. Rosenbaum, K. Andres, G. A. Thomas, R. N. Bhatt // Phys. Rev. Lett. — 1980. — Nov. — Vol. 45, issue 21. — Pp. 1723–1726.
63. Rubtsov A., Katsnelson M., Lichtenstein A. Dual boson approach to collective excitations in correlated fermionic systems // Annals of Physics. — 2012. — Vol. 327, no. 5. — Pp. 1320–1335.
64. Wannier G. H. The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals // Phys. Rev. — 1937. — Aug. — Vol. 52, issue 3. — Pp. 191–197.
65. Wannier G. H. Dynamics of Band Electrons in Electric and Magnetic Fields // Rev. Mod. Phys. — 1962. — Oct. — Vol. 34, issue 4. — Pp. 645–655.
66. Marzari N., Vanderbilt D. Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands // Phys. Rev. B. — 1997. — Nov. — Vol. 56, issue 20. — Pp. 12847–12865.
67. Souza I., Marzari N., Vanderbilt D. Maximally localized Wannier functions for entangled energy bands // Phys. Rev. B. — 2001. — Dec. — Vol. 65, issue 3. — P. 035109.

68. Selectively localized Wannier functions / R. Wang, E. A. Lazar, H. Park, A. J. Millis, C. A. Marianetti // *Phys. Rev. B.* — 2014. — Oct. — Vol. 90, issue 16. — P. 165125.
69. The Physics of Correlated Insulators, Metals, and Superconductors. Vol. 7 / ed. by E. Pavarini, E. Koch, R. Scalettar, R. Martin. — Jülich : Forschungszentrum Jülich GmbH Zentralbibliothek, Verlag, Sept. 25, 2017. — P. 450. — (Schriften des Forschungszentrums Jülich Reihe Modeling and Simulation).
70. Electron correlations in narrow energy bands III. An improved solution // *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences.* — 1964. — Vol. 281, no. 1386. — Pp. 401–419.
71. Claveau Y., Arnaud B., Matteo S. D. Mean-field solution of the Hubbard model: the magnetic phase diagram // *European Journal of Physics.* — 2014. — Vol. 35, no. 3. — P. 035023.
72. Electron correlations in narrow energy bands. II. The degenerate band case // *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences.* — 1964. — Vol. 277, no. 1369. — Pp. 237–259.
73. Dongen P. G. J. van Extended Hubbard model at strong coupling // *Phys. Rev. B.* — 1994. — Mar. — Vol. 49, issue 12. — Pp. 7904–7915.
74. Morohoshi S., Fukumoto Y. Coexisting Ground State of Ferromagnetic and Charge Orderings in the Doped Extended Hubbard Ladder with Intersite Repulsions // *Journal of the Physical Society of Japan.* — 2008. — Vol. 77, no. 10. — P. 105005.
75. Effect of next-nearest-neighbor transfer on superconductivity and antiferromagnetism in two-dimensional t - J model / T. Watanabe, H. Yokoyama, Y. Tanaka, J.-i. Inoue, M. Ogata // *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* — 2006. — Vol. 67, no. 1. — Pp. 112–114. — Spectroscopies in Novel Superconductors 2004.
76. Mancini F., Mancini F. P., Naddeo A. Role of the attractive intersite interaction in the extended Hubbard model // *The European Physical Journal B.* — 2009. — Apr. — Vol. 68, no. 3. — Pp. 309–315.

77. Anisimov V. I., Aryasetiawan F., Lichtenstein A. I. First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: the LDA + U method // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 1997. — Vol. 9, no. 4. — P. 767.
78. Charge-ordered insulating state of Fe_3O_4 from first-principles electronic structure calculations / V. I. Anisimov, I. S. Elfimov, N. Hamada, K. Terakura // *Phys. Rev. B*. — 1996. — Aug. — Vol. 54, issue 7. — Pp. 4387–4390.
79. Kumar M., Soos Z. G. Bond-order wave phase of the extended Hubbard model: Electronic solitons, paramagnetism, and coupling to Peierls and Holstein phonons // *Phys. Rev. B*. — 2010. — Oct. — Vol. 82, issue 15. — P. 155144.
80. Zhu L. Y., Wang W. Z. Effects of intersite Coulomb interaction on ferromagnetism and dimerization in nanographite ribbons // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2006. — Vol. 18, no. 27. — P. 6273.
81. Micnas R., Robaszkiewicz S., Chao K. A. Multicritical behavior of the extended Hubbard model in the zero-bandwidth limit // *Phys. Rev. B*. — 1984. — Mar. — Vol. 29, issue 5. — Pp. 2784–2789.
82. Zhang Y., Callaway J. Extended Hubbard model in two dimensions // *Phys. Rev. B*. — 1989. — May. — Vol. 39, issue 13. — Pp. 9397–9404.
83. Bursill R. J., Thompson C. J. Variational bounds for lattice fermion models II. Extended Hubbard model in the atomic limit // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. — 1993. — Vol. 26, no. 18. — P. 4497.
84. Avella A., Mancini F. The Hubbard model with intersite interaction within the Composite Operator Method // *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*. — 2004. — Sept. — Vol. 41, no. 2. — Pp. 149–162.
85. Avella A., Mancini F. Phase diagrams of half-filled 1D and 2D extended Hubbard model within COM // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. — 2006. — Vol. 67, no. 1. — Pp. 142–145. — *Spectroscopies in Novel Superconductors 2004*.

86. Extended Hubbard model: Charge ordering and Wigner-Mott transition / A. Amaricci, A. Camjayi, K. Haule, G. Kotliar, D. Tanasković, V. Dobrosavljević // Phys. Rev. B. — 2010. — Oct. — Vol. 82, issue 15. — P. 155102.
87. Ayral T., Biermann S., Werner P. Screening and nonlocal correlations in the extended Hubbard model from self-consistent combined *GW* and dynamical mean field theory // Phys. Rev. B. — 2013. — Mar. — Vol. 87, issue 12. — P. 125149.
88. Beyond extended dynamical mean-field theory: Dual boson approach to the two-dimensional extended Hubbard model / E. G. C. P. van Loon, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, O. Parcollet, H. Hafermann // Phys. Rev. B. — 2014. — Dec. — Vol. 90, issue 23. — P. 235135.
89. Lhoutellier G., Frésard R., Oleś A. M. Fermi-liquid Landau parameters for a nondegenerate band: Spin and charge instabilities in the extended Hubbard model // Phys. Rev. B. — 2015. — June. — Vol. 91, issue 22. — P. 224410.
90. From local to nonlocal correlations: The Dual Boson perspective / E. A. Stepanov, A. Huber, E. G. C. P. van Loon, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson // Phys. Rev. B. — 2016. — Nov. — Vol. 94, issue 20. — P. 205110.
91. Terletska H., Chen T., Gull E. Charge ordering and correlation effects in the extended Hubbard model // Phys. Rev. B. — 2017. — Mar. — Vol. 95, issue 11. — P. 115149.
92. Influence of Fock exchange in combined many-body perturbation and dynamical mean field theory / T. Ayral, S. Biermann, P. Werner, L. Boehnke // Phys. Rev. B. — 2017. — June. — Vol. 95, issue 24. — P. 245130.
93. Doping-driven metal-insulator transitions and charge orderings in the extended Hubbard model / K. J. Kapcia, S. Robaszkiewicz, M. Capone, A. Amaricci // Phys. Rev. B. — 2017. — Mar. — Vol. 95, issue 12. — P. 125112.

94. Raymond Fresard K. S., Kopp T. Charge instabilities of the two-dimensional Hubbard model with attractive nearest neighbour interaction // Journal of Physics: Conference Series. — Vol. 702, issue 12. — P. 012003.
95. Esslinger T. Fermi-Hubbard Physics with Atoms in an Optical Lattice // Annual Review of Condensed Matter Physics. — 2010. — Vol. 1, no. 1. — Pp. 129–152.
96. Marel D. van der, Sawatzky G. A. Electron-electron interaction and localization in d and f transition metals // Phys. Rev. B. — 1988. — June. — Vol. 37, issue 18. — Pp. 10674–10684.
97. Micnas R., Ranninger J., Robaszkiewicz S. Superconductivity in narrow-band systems with local nonretarded attractive interactions // Rev. Mod. Phys. — 1990. — Jan. — Vol. 62, issue 1. — Pp. 113–171.
98. Strand H. U. R. Valence-skipping and negative- U in the d -band from repulsive local Coulomb interaction // Phys. Rev. B. — 2014. — Oct. — Vol. 90, issue 15. — P. 155108.
99. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory / G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, C. A. Marianetti // Rev. Mod. Phys. — 2006. — Aug. — Vol. 78, issue 3. — Pp. 865–951.
100. Anderson P. W. Localized Magnetic States in Metals // Phys. Rev. — 1961. — Oct. — Vol. 124, issue 1. — Pp. 41–53.
101. Anderson P. W. Localized Magnetic States and Fermi-Surface Anomalies in Tunneling // Phys. Rev. Lett. — 1966. — July. — Vol. 17, issue 2. — Pp. 95–97.
102. Rubtsov A. N., Savkin V. V., Lichtenstein A. I. Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions // Phys. Rev. B. — 2005. — July. — Vol. 72, issue 3. — P. 035122.
103. Iterative real-time path integral approach to nonequilibrium quantum transport / S. Weiss, J. Eckel, M. Thorwart, R. Egger // Phys. Rev. B. — 2008. — May. — Vol. 77, issue 19. — P. 195316.

104. Cabra D. C., Honecker A., Pujol P. Modern Theories of Many-Particle Systems in Condensed Matter Physics. — 2012.
105. Si Q., Smith J. L., Ingersent K. Quantum critical behavior in Kondo systems // International Journal of Modern Physics B. — 1999. — Vol. 13, no. 18. — Pp. 2331–2342.
106. Caffarel M., Krauth W. Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity // Phys. Rev. Lett. — 1994. — Mar. — Vol. 72, issue 10. — Pp. 1545–1548.
107. De Raedt H. v. L. W. *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics*. Berlin, New York: Heidelberg, Springer. — 1992.
108. Lin H. Q., Gubernatis J. E. Exact Diagonalization Methods for Quantum Systems // Computers in Physics. — 1993. — Vol. 7, no. 4. — Pp. 400–407.
109. Freericks J. K., Jarrell M. Iterated perturbation theory for the attractive Holstein and Hubbard models // Phys. Rev. B. — 1994. — Sept. — Vol. 50, issue 10. — Pp. 6939–6953.
110. Hirsch J. E., Fye R. M. Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals // Phys. Rev. Lett. — 1986. — June. — Vol. 56, issue 23. — Pp. 2521–2524.
111. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models / E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, P. Werner // Rev. Mod. Phys. — 2011. — May. — Vol. 83, issue 2. — Pp. 349–404.
112. Junya Otsuki Hiroaki Kusunose P. W., Kuramoto Y. Continuous-Time Quantum Monte Carlo Method for the Coqblin-Schrieffer Model // J. Phys. Soc. Jpn. — 2001. — Vol. 76, issue 114707.
113. Rubtsov A. N., Lichtenstein A. I. Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions: Beyond auxiliary field framework // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. — 2004. — July. — Vol. 80, no. 1. — Pp. 61–65.
114. Continuous-Time Solver for Quantum Impurity Models / P. Werner, A. Comanac, L. de'Medici, M. Troyer, A. J. Millis // Phys. Rev. Lett. — 2006. — Aug. — Vol. 97, issue 7. — P. 076405.

115. Ising E. Dissertation, *Contribution to the Theory of Ferromagnetism*, Hamburg. — 1925.
116. Onsager L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition // *Phys. Rev.* — 1944. — Feb. — Vol. 65, 3–4. — Pp. 117–149.
117. Heisenberg W. Zur Theorie des Ferromagnetismus // *Zeitschrift für Physik.* — 1928. — Sept. — Vol. 49, no. 9. — Pp. 619–636.
118. Ashkin J., Teller E. Statistics of Two-Dimensional Lattices with Four Components // *Phys. Rev.* — 1943. — Sept. — Vol. 64, 5–6. — Pp. 178–184.
119. Toda M. Vibration of a Chain with Nonlinear Interaction // *Journal of the Physical Society of Japan.* — 1967. — Vol. 22, no. 2. — Pp. 431–436.
120. Shinaoka H., Gull E., Werner P. Continuous-time hybridization expansion quantum impurity solver for multi-orbital systems with complex hybridizations // *Computer Physics Communications.* — 2017. — Vol. 215. — Pp. 128–136.
121. Hafermann H., Werner P., Gull E. Efficient implementation of the continuous-time hybridization expansion quantum impurity solver // *Computer Physics Communications.* — 2013. — Vol. 184, no. 4. — Pp. 1280–1286.
122. Rozenberg M. J., Moeller G., Kotliar G. The Metal-Insulator transition In The Hubbard Model At Zero Temperature II // *Modern Physics Letters B.* — 1994. — Vol. 08, 08n09. — Pp. 535–543.
123. Lanczos. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators // *Journal of Research of the National Bureau of Standards.* — 1950. — Vol. 45, issue 5.
124. Otsuki J. Spin-boson coupling in continuous-time quantum Monte Carlo // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Mar. — Vol. 87, issue 12. — P. 125102.
125. Francis J. G. F. The QR Transformation A Unitary Analogue to the LR Transformation—Part 1 // *The Computer Journal.* — 1961. — Jan. — Vol. 4, no. 3. — Pp. 265–271.
126. Francis J. G. F. The QR Transformation—Part 2 // *The Computer Journal.* — 1962. — Jan. — Vol. 4, no. 4. — Pp. 332–345.

127. Kublanovskaya V. On some algorithms for the solution of the complete eigenvalue problem // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1962. — Vol. 1, no. 3. — Pp. 637–657.
128. Maschhoff K., Sorensen D. A portable implementation of ARPACK for distributed memory parallel architectures. — 1996. — Dec.
129. Кривошеева Е. Магистерская диссертация, *Учет нелокального кулоновского взаимодействия на магнитные и транспортные свойства сильно коррелированных систем*, Екатеринбург. — 2014.
130. Sandvik A. W. Stochastic method for analytic continuation of quantum Monte Carlo data // Phys. Rev. B. — 1998. — May. — Vol. 57, issue 17. — Pp. 10287–10290.
131. Casula M., Rubtsov A., Biermann S. Dynamical screening effects in correlated materials: Plasmon satellites and spectral weight transfers from a Green's function ansatz to extended dynamical mean field theory // Phys. Rev. B. — 2012. — Jan. — Vol. 85, issue 3. — P. 035115.
132. Extended dynamical mean-field study of the Hubbard model with long-range interactions / L. Huang, T. Ayral, S. Biermann, P. Werner // Phys. Rev. B. — 2014. — Nov. — Vol. 90, issue 19. — P. 195114.
133. Fletcher R., United Kingdom Atomic Energy Authority, H.M.S.O. Fortran Subroutines for Minimization by Quasi-Newton Methods. — Atomic Energy Research Establishment, 1972. — (AERE-R).
134. Moré J. J. The Levenberg-Marquardt algorithm: Implementation and theory // Numerical Analysis / ed. by G. A. Watson. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1978. — Pp. 105–116.
135. Exact diagonalization solver for extended dynamical mean-field theory / D. Medvedeva, S. Iskakov, F. Krien, V. V. Mazurenko, A. I. Lichtenstein // Phys. Rev. B. — 2017. — Dec. — Vol. 96, issue 23. — P. 235149.
136. Suchdev S. Quantum Phase Transitions. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1999).
137. Continentino M. Quantum Scaling in Many-Body Systems. — Singapore: World Scientific, 2001.

138. Continentino M. A. Quantum scaling in many-body systems // Physics Reports. — 1994. — Vol. 239, no. 3. — Pp. 179–213.
139. Continuous quantum phase transitions / S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini, D. Shahar // Rev. Mod. Phys. — 1997. — Jan. — Vol. 69, issue 1. — Pp. 315–333.
140. Vojta T. Quantum phase transitions in electronic systems // Annalen der Physik. — 2000. — Vol. 9, no. 6. — Pp. 403–440.
141. How do Fermi liquids get heavy and die? / P. Coleman, C. Pépin, Q. Si, R. Ramazashvili // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2001. — Aug. — Vol. 13, no. 35. — R723–R738.
142. Stewart G. R. Non-Fermi-liquid behavior in *d*- and *f*-electron metals // Rev. Mod. Phys. — 2001. — Oct. — Vol. 73, issue 4. — Pp. 797–855.
143. Lavagna M. Quantum phase transitions // Philosophical Magazine B. — 2001. — Vol. 81, no. 10. — Pp. 1469–1483.
144. Singular or non-Fermi liquids // Physics Reports. — 2002. — Vol. 361, no. 5. — Pp. 267–417.
145. Стишов С. М. Квантовые фазовые переходы // Усп. физ. наук. — 2004. — Т. 174, № 8. — С. 853–860.
146. Strongly Correlated Materials / E. Morosan, D. Natelson, A. H. Nevidomskyy, Q. Si // Advanced Materials. — 2012. — Vol. 24, no. 36. — Pp. 4896–4923.
147. Imada M., Fujimori A., Tokura Y. Metal-insulator transitions // Rev. Mod. Phys. — 1998. — Oct. — Vol. 70, issue 4. — Pp. 1039–1263.
148. Verwey E. J. W. Electronic Conduction of Magnetite (Fe_3O_4) and its Transition Point at Low Temperatures // Nature. — 1939. — Aug. — Vol. 144. — Pp. 327–328.
149. Wigner E. On the Interaction of Electrons in Metals // Phys. Rev. — 1934. — Dec. — Vol. 46, issue 11. — Pp. 1002–1011.
150. Lenac Z., Sunjić M. Melting of the Wigner lattice at $T=0$ // Phys. Rev. B. — 1995. — Oct. — Vol. 52, issue 15. — Pp. 11238–11247.

151. Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors / J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura, S. Uchida // *Nature*. — 1995. — Mar. — Vol. 375. — Pp. 561–563.
152. An Intrinsic Bond-Centered Electronic Glass with Unidirectional Domains in Underdoped Cuprates / Y. Kohsaka [et al.] // *Science*. — 2007. — Vol. 315, no. 5817. — Pp. 1380–1385.
153. Charge ordering in the electron-doped superconductor $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ / E. H. da Silva Neto, R. Comin, F. He, R. Sutarto, Y. Jiang, R. L. Greene, G. A. Sawatzky, A. Damascelli // *Science*. — 2015. — Vol. 347, no. 6219. — Pp. 282–285.
154. Visualizing short-range charge transfer at the interfaces between ferromagnetic and superconducting oxides / T. Y. Chien, L. F. Kourkoutis, J. Chakhalian, B. Gray, M. Kareev, N. P. Guisinger, D. A. Muller, J. W. Freeland // *Nat. Com.* — 2013. — Vol. 4, no. 2336.
155. Collapse of a Charge-Ordered State under a Magnetic Field in $\text{Pr}_{1/2}\text{Sr}_{1/2}\text{MnO}_3$ / Y. Tomioka, A. Asamitsu, Y. Moritomo, H. Kuwahara, Y. Tokura // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — June. — Vol. 74, issue 25. — Pp. 5108–5111.
156. Chen C. H., Cheong S.-W. Commensurate to Incommensurate Charge Ordering and Its Real-Space Images in $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — May. — Vol. 76, issue 21. — Pp. 4042–4045.
157. Atomic-scale images of charge ordering in a mixed-valence manganite / C. Renner, G. Aeppli, B.-G. Kim, Y.-A. Soh, S.-W. Cheong // *Nature*. — 2002. — Apr. — Vol. 416. — Pp. 518–521.
158. Elbio Dagotto T. H., Moreo A. Colossal magnetoresistant materials: the key role of phase separation // *Physics Reports*. — 2001. — Apr. — Vol. 344, 1–3. — Pp. 1–153.
159. Charge correlations in cobaltates $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_4$ / G. H., S. W., T. L. H., K. A. C. // *physica status solidi (RRL) – Rapid Research Letters*. — Vol. 9, no. 10. — Pp. 580–582.

160. Transport and Thermodynamics Studies of Stripe and Checkerboard Ordering in Layered Nickel Oxides $R(2-x)Sr(x)NiO(4)$ ($R = La$ and Nd) / Y. Ikeda, S. Suzuki, T. Nakabayashi, H. Yoshizawa, T. Yokoo, S. Itoh // J. Phys. Soc. Jpn. — 2015. — Vol. 84, no. 023706.
161. Lee S.-H., Cheong S.-W. Melting of Quasi-Two-Dimensional Charge Stripes in $La_{5/3}Sr_{1/3}NiO_4$ // Phys. Rev. Lett. — 1997. — Sept. — Vol. 79, issue 13. — Pp. 2514–2517.
162. Stacked charge stripes in the quasi-2D trilayer nickelate $La_4Ni_3O_8$ / J. Zhang, Y.-S. Chen, D. Phelan, H. Zheng, M. R. Norman, J. F. Mitchell // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 2016. — Vol. 113, no. 32. — Pp. 8945–8950.
163. Structural properties and charge ordered states in $RMnO_3$ ($R=La, Pr, Nd, Ca, Sr$) and $(La, Sr)_2NiO_4$ / J.Q.Li, H.Y.Chen, H.R.Zhang, H.C.Yu, Y.G.Shi, L.B.Liu, H.F.Tian, Y.Zhu, J.M.Tranquada // Micron. — 2004. — Vol. 35, issue 6. — Pp. 419–424.
164. Jerome D. Organic Conductors: From Charge Density Wave TTF-TCNQ to Superconducting $(TMTSF)_2PF_6$ // Chemical Reviews. — 2004. — Vol. 104, no. 11. — Pp. 5565–5592.
165. Hiraki K., Kanoda K. Wigner Crystal Type of Charge Ordering in an Organic Conductor with a Quarter-Filled Band: $(DI - DCNQI)_2Ag$ // Phys. Rev. Lett. — 1998. — May. — Vol. 80, issue 21. — Pp. 4737–4740.
166. Hotta C. Theories on Frustrated Electrons in Two-Dimensional Organic Solids // Crystals. — 2012. — Vol. 2, no. 3. — Pp. 1155–1200.
167. Bandwidth Tuning Triggers Interplay of Charge Order and Superconductivity in Two-Dimensional Organic Materials / S. Kaiser, M. Dressel, Y. Sun, A. Greco, J. A. Schlueter, G. L. Gard, N. Drichko // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Nov. — Vol. 105, issue 20. — P. 206402.
168. Valence state of the Fe ions in $Sr_{1-y}La_yFeO_3$ // Journal of Solid State Chemistry. — 1981. — Vol. 39, no. 1. — Pp. 75–84.

169. Stabilization of Charge Ordering in $\text{La}_{1/3}\text{Sr}_{2/3}\text{FeO}_{3-\delta}$ by Magnetic Exchange / R. J. McQueeney, J. Ma, S. Chang, J.-Q. Yan, M. Hehlen, F. Trouw // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Mar. — Vol. 98, issue 12. — P. 126402.
170. Superconductivity in Cu_xTiSe_2 / E. Morosan, H. W. Zandbergen, B. S. Dennis, J. W. G. Bos, Y. Onose, T. Klimczuk, A. P. Ramirez, N. P. Ong, R. J. Cava // *Nature Physics.* — 2006. — Vol. 2. — Pp. 544–550.
171. Crystal Structure and Possible Charge Ordering in One-Dimensional $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ / H. Fjellvag, E. Gulbrandsen, S. Aasland, A. Olsen, B. C. Hauback // *Journal of Solid State Chemistry.* — 1996. — Vol. 124, no. 1. — Pp. 190–194.
172. Shibata Y., Nishimoto S., Ohta Y. Charge ordering in the one-dimensional extended Hubbard model: Implication to the TMTTF family of organic conductors // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Nov. — Vol. 64, issue 23. — P. 235107.
173. Beyond extended dynamical mean-field theory: Dual boson approach to the two-dimensional extended Hubbard model / E. G. C. P. van Loon, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, O. Parcollet, H. Hafermann // *Phys. Rev. B.* — 2014. — Dec. — Vol. 90, issue 23. — P. 235135.
174. Gull E., Parcollet O., Millis A. J. Superconductivity and the Pseudogap in the Two-Dimensional Hubbard Model // *Phys. Rev. Lett.* — 2013. — May. — Vol. 110, issue 21. — P. 216405.
175. Self-consistent dual boson approach to single-particle and collective excitations in correlated systems / E. A. Stepanov, E. G. C. P. van Loon, A. A. Katanin, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, A. N. Rubtsov // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Jan. — Vol. 93, issue 4. — P. 045107.
176. Nature of insulating state in NaV_2O_5 above charge-ordering transition: A cluster dynamical mean-field study / V. V. Mazurenko, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta, V. I. Anisimov // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Aug. — Vol. 66, issue 8. — P. 081104.

177. Martins C., Aichhorn M., Biermann S. Coulomb correlations in 4d and 5d oxides from first principles—or how spin–orbit materials choose their effective orbital degeneracies // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2017. — May. — Vol. 29, no. 26. — P. 263001.
178. Frequency-dependent local interactions and low-energy effective models from electronic structure calculations / F. Aryasetiawan, M. Imada, A. Georges, G. Kotliar, S. Biermann, A. I. Lichtenstein // *Phys. Rev. B*. — 2004. — Nov. — Vol. 70, issue 19. — P. 195104.
179. Calculations of Hubbard U from first-principles / F. Aryasetiawan, K. Karlsson, O. Jepsen, U. Schönberger // *Phys. Rev. B*. — 2006. — Sept. — Vol. 74, issue 12. — P. 125106.
180. Ultrahigh electron mobility in suspended graphene / K. Bolotin, K. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, H. Stormer // *Solid State Communications*. — 2008. — Vol. 146, no. 9. — Pp. 351–355.
181. Chemical functionalization of graphene and its applications / T. Kuila, S. Bose, A. K. Mishra, P. Khanra, N. H. Kim, J. H. Lee // *Progress in Materials Science*. — 2012. — Vol. 57, no. 7. — Pp. 1061–1105.
182. Maximally localized Wannier functions: Theory and applications / N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, D. Vanderbilt // *Rev. Mod. Phys.* — 2012. — Oct. — Vol. 84, issue 4. — Pp. 1419–1475.
183. Troyer M., Wiese U.-J. Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — May. — Vol. 94, issue 17. — P. 170201.
184. Feynman R. P. Simulating physics with computers // *International Journal of Theoretical Physics*. — 1982. — June. — Vol. 21, no. 6. — Pp. 467–488.
185. Turing A. M. On Computable Numbers, with an Application to the Entscheidungsproblem // *Proceedings of the London Mathematical Society*. — 1937. — Vol. s2-42, no. 1. — Pp. 230–265.
186. Bloch I., Dalibard J., Nascimbène S. Quantum simulations with ultracold quantum gases // *Nature Physics*. — 2012. — Apr. — Vol. 8. — P. 267. — Review Article.

187. Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond / M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen(De), U. Sen // *Advances in Physics*. — 2007. — Vol. 56, no. 2. — Pp. 243–379.
188. Rey A. M. Lectures, *Ultracold atoms in optical lattices*, Colorado. — 2016.
189. Magneto-optical trap for thulium atoms / D. Sukachev, A. Sokolov, K. Chebakov, A. Akimov, S. Kanorsky, N. Kolachevsky, V. Sorokin // *Phys. Rev. A*. — 2010. — July. — Vol. 82, issue 1. — P. 011405.
190. Sub-doppler laser cooling of thulium atoms in a magneto-optical trap / D. Sukachev, A. Sokolov, K. Chebakov, A. Akimov, N. Kolachevsky, V. Sorokin // *JETP Letters*. — 2010. — Nov. — Vol. 92, no. 10. — Pp. 703–706.
191. Observation of Density-Induced Tunneling / O. Jürgensen, F. Meinert, M. J. Mark, H.-C. Nägerl, D.-S. Lühmann // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Nov. — Vol. 113, issue 19. — P. 193003.
192. Martiyanov K., Makhalov V., Turlapov A. Observation of a Two-Dimensional Fermi Gas of Atoms // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — July. — Vol. 105, issue 3. — P. 030404.
193. Metallic and Insulating Phases of Repulsively Interacting Fermions in a 3D Optical Lattice / U. Schneider, L. Hackermüller, S. Will, T. Best, I. Bloch, T. A. Costi, R. W. Helmes, D. Rasch, A. Rosch // *Science*. — 2008. — Vol. 322, no. 5907. — Pp. 1520–1525.
194. Evidence for superfluidity of ultracold fermions in an optical lattice / J. K. Chin, D. E. Miller, Y. Liu, C. Stan, W. Setiawan, C. Sanner, K. Xu, W. Ketterle // *Nature*. — 2006. — Oct. — Vol. 443. — P. 961.
195. Ультрахолодные лантаноиды: от оптических часов до квантовых симуляторов / Г. А. Вишнякова, А. А. Головизин, Е. С. Калганова, В. Н. Сорокин, Д. Д. Сукачёв, Д. О. Трегубов, К. Ю. Хабарова, Н. Н. Колачевский // *Усп. физ. наук*. — 2016. — Т. 186, № 2. — С. 176–182.

196. Low-Energy Models for Correlated Materials: Bandwidth Renormalization from Coulombic Screening / M. Casula, P. Werner, L. Vaugier, F. Aryasetiawan, T. Miyake, A. J. Millis, S. Biermann // Phys. Rev. Lett. — 2012. — Sept. — Vol. 109, issue 12. — P. 126408.
197. Capturing nonlocal interaction effects in the Hubbard model: Optimal mappings and limits of applicability / E. G. C. P. van Loon, M. Schüler, M. I. Katsnelson, T. O. Wehling // Phys. Rev. B. — 2016. — Oct. — Vol. 94, issue 16. — P. 165141.
198. 7×7 Reconstruction on Si(111) Resolved in Real Space / G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber, E. Weibel // Phys. Rev. Lett. — 1983. — Jan. — Vol. 50, issue 2. — Pp. 120–123.
199. Probing Superexchange Interaction in Molecular Magnets by Spin-Flip Spectroscopy and Microscopy / X. Chen, Y.-S. Fu, S.-H. Ji, T. Zhang, P. Cheng, X.-C. Ma, X.-L. Zou, W.-H. Duan, J.-F. Jia, Q.-K. Xue // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Nov. — Vol. 101, issue 19. — P. 197208.
200. Bistability in Atomic-Scale Antiferromagnets / S. Loth, S. Baumann, C. P. Lutz, D. M. Eigler, A. J. Heinrich // Science. — 2012. — Vol. 335, no. 6065. — Pp. 196–199.
201. Realizing All-Spin-Based Logic Operations Atom by Atom / A. A. Khajetoorians, J. Wiebe, B. Chilian, R. Wiesendanger // Science. — 2011. — Vol. 332, no. 6033. — Pp. 1062–1064.
202. Tailoring the chiral magnetic interaction between two individual atoms / A. A. Khajetoorians, M. Steinbrecher, M. Ternes, M. Bouhassoune, M. dos Santos Dias, S. Lounis, J. Wiebe, R. Wiesendanger // Nature Communications. — 2016. — Feb. — Vol. 7. — P. 10620. — Article.
203. Local Control of Single Atom Magnetocrystalline Anisotropy / B. Bryant, A. Spinelli, J. J. T. Wagenaar, M. Gerrits, A. F. Otte // Phys. Rev. Lett. — 2013. — Sept. — Vol. 111, issue 12. — P. 127203.
204. Tuning the Magnetic Anisotropy of Single Molecules / B. W. Heinrich, L. Braun, J. I. Pascual, K. J. Franke // Nano Letters. — 2015. — June. — Vol. 15, no. 6. — Pp. 4024–4028.

205. Technology for nanoelectronic devices based on ultra-high vacuum scanning tunneling microscopy on the Si(100) surface / G. Palasantzas, B. Ilge, S. Rogge, L. Geerligs // Microelectronic Engineering. — 1999. — Vol. 46, no. 1. — Pp. 133–136. — International Conference on Micro- and Nanofabrication.
206. Atomic switches: atomic-movement-controlled nanodevices for new types of computing / T. Hino, T. Hasegawa, K. Terabe, T. Tsuruoka, A. Nayak, T. Ohno, M. Aono // Science and Technology of Advanced Materials. — 2011. — Feb. — Vol. 12, no. 1. — P. 013003.
207. Atomic scale memory at a silicon surface / R. Bennewitz, J. N. Crain, A. Kirakosian, J.-L. Lin, J. L. McChesney, D. Y. Petrovykh, F. J. Himpsel // Nanotechnology. — 2002. — July. — Vol. 13, no. 4. — Pp. 499–502.
208. A kilobyte rewritable atomic memory / F. E. Kalff, M. P. Rebergen, E. Fahrenfort, J. Girovsky, R. Toskovic, J. L. Lado, J. Fernández-Rossier, A. F. Otte // Nature Nanotechnology. — 2016. — July. — Vol. 11. — P. 926.
209. Observation of a Mott Insulating Ground State for Sn/Ge(111) at Low Temperature / R. Cortés, A. Tejada, J. Lobo, C. Didiot, B. Kierren, D. Malterre, E. G. Michel, A. Mascaraque // Phys. Rev. Lett. — 2006. — Mar. — Vol. 96, issue 12. — P. 126103.
210. Insulating Ground State of Sn/Si(111)–($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° / S. Modesti, L. Petaccia, G. Ceballos, I. Vobornik, G. Panaccione, G. Rossi, L. Ottaviano, R. Larciprete, S. Lizzit, A. Goldoni // Phys. Rev. Lett. — 2007. — Mar. — Vol. 98, issue 12. — P. 126401.
211. Triangular Spin-Orbit-Coupled Lattice with Strong Coulomb Correlations: Sn Atoms on a SiC(0001) Substrate / S. Glass, G. Li, F. Adler, J. Aulbach, A. Fleszar, R. Thomale, W. Hanke, R. Claessen, J. Schäfer // Phys. Rev. Lett. — 2015. — June. — Vol. 114, issue 24. — P. 247602.
212. Schuwalow S., Grieger D., Lechermann F. Realistic modeling of the electronic structure and the effect of correlations for Sn/Si(111) and Sn/Ge(111) surfaces // Phys. Rev. B. — 2010. — July. — Vol. 82, issue 3. — P. 035116.

213. Magnetic order in a frustrated two-dimensional atom lattice at a semiconductor surface / G. Li, P. Höpfner, J. Schäfer, C. Blumenstein, S. Meyer, A. Bostwick, E. Rotenberg, R. Claessen, W. Hanke // Nature Communications. — 2013. — Mar. — Vol. 4. — P. 1620.
214. What about U on surfaces? Extended Hubbard models for adatom systems from first principles / P. Hansmann, L. Vaugier, H. Jiang, S. Biermann // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2013. — Feb. — Vol. 25, no. 9. — P. 094005.
215. Solovyev I. V., Mazurenko V. V., Katanin A. A. Validity and limitations of the superexchange model for the magnetic properties of Sr_2IrO_4 and Ba_2IrO_4 mediated by the strong spin-orbit coupling // Phys. Rev. B. — 2015. — Dec. — Vol. 92, issue 23. — P. 235109.
216. Profeta G., Ottaviano L., Continenza A. $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ $R30^\circ \rightarrow 3 \times 3$ distortion on the C/Si(111) surface // Phys. Rev. B. — 2004. — June. — Vol. 69, issue 24. — P. 241307.
217. Strength of Effective Coulomb Interactions in Graphene and Graphite / T. O. Wehling, E. Sasioglu, C. Friedrich, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, S. Blügel // Phys. Rev. Lett. — 2011. — June. — Vol. 106, issue 23. — P. 236805.
218. Graphene spintronics / Wei Han, Roland K. Kawakami, Martin Gmitra, Jaroslav Fabian // Nature Nanotechnology. — 2014. — Vol. 9. — Pp. 794–807.
219. Graphene spintronics: the European Flagship perspective / S. Roche [et al.] // 2D Materials. — 2015. — July. — Vol. 2, no. 3. — P. 030202.
220. Yazyev O. V. Emergence of magnetism in graphene materials and nanostructures // Reports on Progress in Physics. — 2010. — Vol. 73, no. 5. — P. 056501.
221. Sahin H., Topsakal M., Ciraci S. Structures of fluorinated graphene and their signatures // Phys. Rev. B. — 2011. — Mar. — Vol. 83, issue 11. — P. 115432.

222. Santos E. J. G., Ayuela A., Sánchez-Portal D. Universal magnetic properties of sp³ -type defects in covalently functionalized graphene // New Journal of Physics. — 2012. — Vol. 14, no. 4. — P. 043022.
223. Magnetic structure of hydrogen-induced defects on graphene / J. O. Sofo, G. Usaj, P. S. Cornaglia, A. M. Suarez, A. D. Hernández-Nieves, C. A. Balseiro // Phys. Rev. B. — 2012. — Mar. — Vol. 85, issue 11. — P. 115405.
224. Exchange interactions and frustrated magnetism in single-side hydrogenated and fluorinated graphene / A. N. Rudenko, F. J. Keil, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein // Phys. Rev. B. — 2013. — Aug. — Vol. 88, issue 8. — P. 081405.
225. Ulybyshev M. V., Katsnelson M. I. Magnetism and Interaction-Induced Gap Opening in Graphene with Vacancies or Hydrogen Adatoms: Quantum Monte Carlo Study // Phys. Rev. Lett. — 2015. — June. — Vol. 114, issue 24. — P. 246801.
226. Atomically resolved imaging of highly ordered alternating fluorinated graphene / Reza J. Kashtiban, M Adam Dyson, Rahul R. Nair, Recep Zan, Swee L. Wong, Quentin Ramasse, Andre K. Geim, Ursel Bangert, Jeremy Sloan // Nat. Comm. — 2014. — Vol. 5.
227. Atomic-scale control of graphene magnetism by using hydrogen atoms / H. González-Herrero, J. M. Gómez-Rodríguez, P. Mallet, M. Moaied, J. J. Palacios, C. Salgado, M. M. Ugeda, J.-Y. Veuillen, F. Yndurain, I. Brihuega // Science. — 2016. — Vol. 352, no. 6284. — Pp. 437–441.
228. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2009. — Sept. — Vol. 21, no. 39. — P. 395502.
229. Perdew J. P., Zunger A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems // Phys. Rev. B. — 1981. — May. — Vol. 23, issue 10. — Pp. 5048–5079.

- 230. wannier90: A tool for obtaining maximally-localised Wannier functions / A. A. Mostofi, J. R. Yates, Y.-S. Lee, I. Souza, D. Vanderbilt, N. Marzari // Computer Physics Communications. — 2008. — Vol. 178, no. 9. — Pp. 685–699.
- 231. Mazurenko V. V., Solovyev I. V., Tsirlin A. A. Covalency effects reflected in the magnetic form factor of low-dimensional cuprates // Phys. Rev. B. — 2015. — Dec. — Vol. 92, issue 24. — P. 245113.
- 232. Aryanpour K., Pickett W. E., Scalettar R. T. Dynamical mean-field study of the Mott transition in the half-filled model on a triangular lattice // Phys. Rev. B. — 2006. — Aug. — Vol. 74, issue 8. — P. 085117.