

УДК 22.37
ББК 539.2
И 398

Интернет-магазин
MAFFESIS

<http://shop.rcd.ru>

- физика
- математика
- биология
- нефтегазовые технологии



Издание осуществлено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований по проекту №09-02-07001.

Изюмов Ю. А., Анисимов В. И.

Электронная структура соединений с сильными корреляциями. — М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2009. — 376 с.

Анализируется электронная структура и физические свойства сильно коррелированных систем (содержащих элементы с незаполненными $3d$, $4d$, $4f$ и $5f$ оболочками) на основе теории динамического среднего поля (DMFT). В настоящее время DMFT является универсальным и наиболее эффективным методом исследования состояний с сильными электронными корреляциями. В книге детально излагаются основы метода и даются его применения к различным классам таких систем.

Книга рассчитана на широкий круг читателей: физиков-теоретиков и экспериментаторов, исследующих сильно коррелированные системы. Она будет полезна для студентов, аспирантов и всех тех, кто хочет ознакомиться с актуальной областью физики твердого тела.

ISBN 978-5-93972-695-5

ББК 539.2

© Ю. А. Изюмов, В. И. Анисимов, 2009

© НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2009

<http://shop.rcd.ru>

<http://ics.org.ru>

Оглавление

Список сокращений	8
Предисловие	9
ГЛАВА 1. Введение	11
1.1. Материалы с сильной электронной корреляцией	11
1.2. Базовые модели в теории сильно коррелированных систем	14
1.3. Методы исследования моделей	17
1.4. Методы расчета электронной структуры из первых принципов	19
ГЛАВА 2. Расчеты электронной структуры в одноэлектронном приближении	21
2.1. Функционал плотности и методы расчета электронного спектра	21
2.1.1. Функционал электронной плотности	21
2.1.2. Методы расчета электронной структуры, основанные на теории функционала плотности	24
2.1.3. Несостоятельность приближения локальной электронной плотности для сильно коррелированных систем	27
2.1.4. Методы учета электрон-электронной корреляции	30
2.2. Определение гамильтониана задачи на основе теории функционала плотности	34
2.2.1. Постановка задачи	34
2.2.2. Гамильтониан кулоновского взаимодействия	35
2.2.3. Проблема двойного учета кулоновского взаимодействия	37
2.2.4. Функции Ванье как базис гамильтониана кулоновского взаимодействия	38
2.2.5. Вычисление величины кулоновского параметра U в расчетах DFT с фиксированными заселенностями	45
2.3. Приближение статического среднего поля: метод LDA+U	48
2.4. Применения метода LDA+U	53
2.4.1. Моттовские изоляторы: NiO, CoO и CaCuO ₂	53
2.4.2. Зарядовое упорядочение: Fe ₃ O ₄	55
2.4.3. Орбитальное упорядочение: KCuF ₃	59

2.4.4.	Орбитальное и зарядовое упорядочение: $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$	62
2.4.5.	Спиновый порядок: $\text{CaV}_n\text{O}_{2n+1}$	63
ГЛАВА 3. Модель Хаббарда в приближении динамического среднего поля (DMFT)		
3.1.	Сведение многоузельной модели к проблеме однопримесной модели Андерсона	68
3.1.1.	Электронная функция Грина	68
3.1.2.	Однопримесная модель Андерсона	70
3.1.3.	Основные уравнения DMFT	74
3.1.4.	Уравнения DMFT на решетке Бете	77
3.1.5.	Методы решения однопримесной модели Андерсона	78
3.2.	Квантовый метод Монте-Карло (QMC) как сольвер однопримесной задачи	82
3.2.1.	Алгоритм Хирша и Фая	82
3.2.2.	Метод максимальной энтропии для построения спектральной функции	89
3.2.3.	QMC для однопримесной модели Андерсона с несколькими степенями свободы	97
3.2.4.	Проективный Монте-Карло-метод (PQMC)	98
3.2.5.	QMC с непрерывным временем	102
3.3.	Электронный спектр модели Хаббарда в приближении DMFT	110
3.3.1.	Трехпиковая структура спектра при половинном заполнении зоны	110
3.3.2.	Фазовый переход металл–изолятор	116
3.4.	Модель Хаббарда при отклонении от половинного заполнения	119
3.4.1.	Поведение квазичастичного пика	119
3.4.2.	Фазовая диаграмма при $T = 0$	120
3.4.3.	Спин-поляризованное состояние	125
3.5.	Антиферромагнетизм	130
3.5.1.	Уравнения DMFT с антиферромагнитным параметром порядка	130
3.5.2.	Результаты исследования AFM-фазы модели методом NRG	133
3.6.	Сверхпроводимость в двумерной модели Хаббарда	140
3.6.1.	Уравнения DMFT для сверхпроводящего состояния	140
3.6.2.	Проблема сосуществования сверхпроводящего и антиферромагнитного параметра порядка	144
3.7.	Транспорт и восприимчивость	146
3.7.1.	Оптическая проводимость	146
3.7.2.	Магнитная восприимчивость	152

ГЛАВА 4. Расширения DMFT	158
4.1. <i>tJ</i> -модель как предельный случай модели Хаббарда	158
4.1.1. Гамильтониан и функции Грина	158
4.1.2. Вывод уравнений DMFT	160
4.1.3. Переформулировка уравнений DMFT	163
4.1.4. Результаты численных расчетов	166
4.2. Расширение DMFT для случая нелокального кулоновского и обменного взаимодействий	170
4.2.1. Гамильтониан и функции Грина для обобщенной модели	170
4.2.2. EDMFT для однородной системы	173
4.2.3. EDMFT для системы с двумя подрешетками	175
4.2.4. DMFT при наличии орбитального вырождения	178
4.2.5. QMC как сольвер примесной проблемы с вырожденными электронами	180
4.2.6. Включение в QMC обменных взаимодействий	182
4.2.7. QMC с непрерывным временем в двухорбитальной модели	184
4.3. Учет пространственных флуктуаций	187
4.3.1. Эвристический подход к проблеме выхода за пределы DMFT	187
4.3.2. Приближение динамической вершины	192
4.3.3. Псевдощель	195
4.3.4. Кластерный метод DMFT	204
4.4. Производящий функционал для функций Грина	209
4.4.1. Функционал Бейма–Каданова	209
4.4.2. Полная энергия	211
4.5. DMFT для систем с беспорядком	213
4.5.1. Модель Андерсона–Хаббарда	213
4.5.2. Фазовая диаграмма для немагнитного состояния модели	214
4.5.3. Оптическая проводимость	219
ГЛАВА 5. Периодическая модель Андерсона	224
5.1. Ранние исследования РАМ	224
5.1.1. РАМ-базовая модель в физике тяжелых фермионов	224
5.1.2. Обзор ранних аналитических исследований РАМ	226
5.1.3. DMFT для РАМ	231
5.2. Исследование РАМ-методом DMFT	234
5.2.1. DMFT(NRG)-результаты при $T = 0$	234
5.3. Решетка Кондо	240

5.3.1.	DMFT для решетки Кондо	240
5.3.2.	Метод численной ренорм-группы для решения одно- примесной проблемы Кондо	242
5.3.3.	Два энергетических масштаба	244
5.3.4.	Расчет фотоэмиссионных спектров методом NRG	247
5.3.5.	Исследование магнитного упорядочения в решетке Кондо методом QMC с непрерывным временем	247
5.4.	Ферромагнитная решетка Кондо	251
5.4.1.	Уравнения DMFT для <i>sd</i> -модели с классическим спи- ном	251
5.4.2.	Анализ решения DMFT-уравнений	255

**ГЛАВА 6. Расчеты электронной структуры реальных веществ ме-
тодом LDA+DMFT 260**

6.1.	Объединение теории функционала плотности и приближе- ния динамического среднего поля: метод LDA+DMFT	260
6.1.1.	Кулоновское взаимодействие	260
6.1.2.	Вычисление решеточной и локальной функций Грина в общем случае	261
6.1.3.	Вычисление полной энергии в LDA+DMFT	264
6.2.	Оксиды переходных металлов начала <i>d</i> -ряда: моттовские изоляторы и сильно коррелированные металлы	265
6.2.1.	SrVO ₃ : один электрон в вырожденной <i>d</i> -зоне, сильно коррелированный металл	266
6.2.2.	V ₂ O ₃ : два электрона в <i>d</i> -зоне с тригональным рас- щеплением, парамагнитный металл — парамагнитный изолятор	275
6.2.3.	LiV ₂ O ₄ : «тяжелые фермионы» в <i>d</i> -системе	277
6.3.	Оксиды переходных металлов конца <i>d</i> -ряда: изоляторы с пе- реносом заряда	281
6.3.1.	NiO: зонная структура изолятора с переносом заряда	281
6.3.2.	MnO: переход металл–изолятор под давлением с из- менением спинового состояния <i>d</i> -иона	287
6.4.	Системы с <i>f</i> -электронами: $\alpha - \gamma$ -переход в Ce	292
6.5.	Манганиты	296
6.5.1.	Основные сведения о физических свойствах манганитов	296
6.5.2.	Электронная модель для манганитов	299
6.5.3.	QMC для систем с электрон-решеточной связью	300
6.5.4.	Результаты LDA+DMFT(QMC)-исследований La _{1-x} Sr _x MnO ₃	305

6.6. Высокотемпературные сверхпроводники на основе соединения LaOFeAs	312
6.7. Список сильно коррелированных веществ, рассчитанных по методу DMFT	318
Заключение	321
ПРИЛОЖЕНИЕ А. Представление статистической суммы континуальным интегралом	325
ПРИЛОЖЕНИЕ В. Формализм функций Грина	341
Литература	346