



燕山大学  
YANSHAN UNIVERSITY

# 硕士学位论文

MASTER DISSERTATION

论文题目 用团簇动力学平均场方法研究重费米  
子材料中的物理问题

作者姓名 林赫羽

学科专业 凝聚态物理

指导教师 刘承师副教授 杨义峰研究员

2014年6月

中图分类号：xxxx

学校代码：10216

UDC: ×××

密级: 公开

## 理学硕士学位论文

# 用团簇动力学平均场方法研究重费米子 材料中的物理问题

硕士研究生: 林赫羽

导 师: 刘承师副教授  
杨义峰研究员

申 请 学 位: 理学硕士

学 科 专 业: 凝聚态物理

所 在 单 位: 理学院

答 辩 日 期: 2014 年 6 月

授予学位单位: 燕山大学

A Dissertation in Condensed Matter Physics

**CLUSTER DYNAMICAL MEAN FIELD  
THEORY OF HEAVY FERMION SYSTEM**

by He-yu Lin

Supervisor: Chengshi Liu Associate Professor

**Yanshan University**

2014.6



## 燕山大学硕士学位论文原创性声明

本人郑重声明：此处所提交的硕士学位论文《用团簇动力学平均场方法研究重费米子系统中竞争序的问题》，是本人在导师指导下，在燕山大学攻读硕士学位期间独立进行研究工作所取得的成果。论文中除已注明部分外不包含他人已发表或撰写过的研究成果。对本文的研究工作做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式注明。本声明的法律结果将完全由本人承担。

作者签字：

日期： 年 月 日

## 燕山大学硕士学位论文使用授权书

《用团簇动力学平均场方法研究重费米子系统中竞争序的问题》系本人在燕山大学攻读硕士学位期间在导师指导下完成的硕士学位论文。本论文的研究成果归燕山大学所有，本论文的研究内容不得以其它单位的名义发表。本人完全了解燕山大学关于保存、使用学位论文的规定，同意学校保留并向有关部门送交论文的复印件和电子版本，允许论文被查阅和借阅。本人授权燕山大学，可以采用影印、缩印或其它复制手段保存论文，可以公布论文的全部或部分内容。

保密，在 年解密后适用本授权书。

本学位论文属于

不保密。

(请在以上相应方框内打“√”)

作者签名：

日期： 年 月 日

导师签名：

日期： 年 月 日





## 摘 要

在凝聚态物理强关联领域中，有一类材料它们自由运动的导带电子与晶格上的局域  $f$  电子耦合形成有效质量很大的准粒子，这类材料被称作重费米子材料。在低温下重费米子系统中会出现众多奇异的量子现象，比如价态涨落引起的超导、超导反铁磁共存、拓扑表面态等。动力学平均场方法是一个研究强关联系统的非常有效的工具。并且该方法在无穷维下至精确的。但是，动力学平均场方法忽略了空间涨落，所以它不适合研究低维以及具有阻挫的体系里的量子相变问题。为此，人们发展了团簇动力学平均场方法。这种方法通过通过将晶格模型映射为一个与有效媒介相耦合的团簇模型，来将非局域关联与空间涨落联系到一起。

在本文中，我们将首先介绍重费米子体系中竞争序的问题。重点关注近年来大家讨论的较多的地位下反铁磁与超导序参量的竞争问题。其次，将简单介绍团簇动力学平均场理论。还将介绍我们选择的作为杂质求解器的数值方法，即精确对角化方法。我们还会介绍一些动力学平均场方法的最新进展。

之后，我们将利用团簇动力学平均场结合精确对角化方法研究重费米子体系中反铁磁超导的竞争与共存机制。在这个工作之前我们做了几个简单的工作来验证程序的正确性。首先，是一个从 Hubbard 模型出发的金属绝缘相变问题，我们验证了绝缘转变发生在  $U=10$  左右，且与 CTQMC 的结果进行对比，定性上吻合。之后由对团簇杂质情况做了一些验证，第五章中会详细的介绍。

最后，由于计算所用的程序是本人在硕士期间重要的工作，所以简单介绍一下程序的内容，包括算法的改进以及通过并行架构的实现来大大的节省了时间和内存占用率。是整个计算的效率的到了有效的提高。

**关键词：**团簇动力学平均场方法；精确对角化方法；反铁磁序；超导序；序参量的竞争；



摘 要.....	I
第 1 章 绪 论.....	1
1.1 课题背景与研究意义.....	1
1.3 动力学平均场理论的发展.....	2
1.3 本文内容和章节安排.....	3
第 2 章 团簇动力学平均场方法.....	5
2.1 引言.....	5
2.2 动力学平均场理论.....	6
2.2 团簇动力学平均场理论.....	9
2.3 几种常见的杂质求解器.....	11
2.4 动力学平均场方法的最新发展.....	12
2.5 本章小结.....	14
第 3 章 精确对角化杂质求解器.....	15
3.1 精确对角化基本思想.....	15
3.2 精确对角化作为 CDMFT 的杂质求解器.....	16
3.3 本章小结.....	18
第 4 章 Arnoldi 算法及并行架构.....	19
4.1 Arnoldi 算法.....	19
4.1.1 Arnoldi 算法的原理.....	20
4.2 Openmp 并行架构.....	21
4.3 MPI 并行架构.....	23
4.4 本章小结.....	26
第 5 章 CDMFT+ED 的实现及结果.....	27
5.1 Hubbard 模型中的金属绝缘相变.....	27
5.2 一维两杂质情况的结果对比.....	31
5.3 重费米子中反铁磁与超导的竞争机制.....	34
5.4 本章小结.....	36
结 论.....	38
参考文献.....	40
攻读硕士学位期间承担的科研任务与主要成果.....	9
致 谢.....	9

---

作者简介 .....	11
------------	----

# 第 1 章 绪 论

## 1.1 课题背景与研究意义

重费米子材料是指一些含有稀土金属，过渡金属元素的金属间化合物。这类化合物在低温下有很高的比热，也就是准粒子有很高的质量，因此叫做重费米子材料。而且在低温下这些材料通常会表现为超导，反铁磁，铁磁，或者费米液体的行为，由于它有这么多奇异的物理现象，所以近年来被物理学家们广泛的研究。

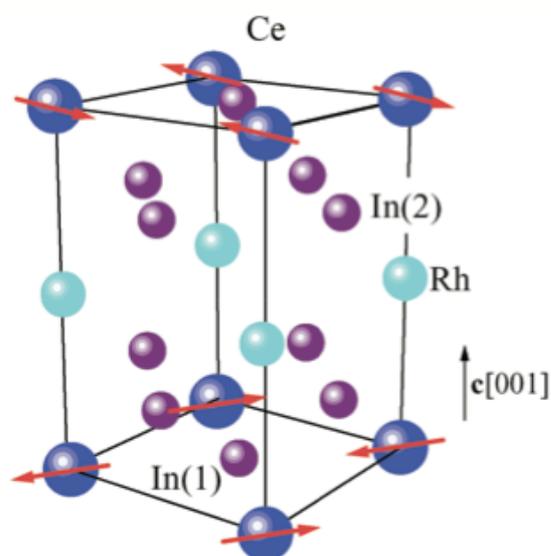


图 1-1 CeRhIn5 晶格结构

重费米子材料之所以会产生这么多奇异的量子现象现在普遍的观点认为是由于两种电子的相互作用，一类是自由的导带电子，一类是局域化的 f 电子，如铈离子上面只有一个电子，这些铈离子之间的间距超过了 f 电子波函数机率分布的主要范围，因此一般认为这些 f 电子是局域化的，之间没有跃迁。但是导带电子和这些局域 f 电子的波函数有叠加，因此两个组分之间存在杂化。对单一的 f 电子来说，就是一般的近藤耦合。对于一个晶格的 f 电子来说，这样的耦合还导致了晶格上不同 f 电子之间通过导带电子传递的有效的磁相互作用，一般称为 RKKY 相互作用。

图 1-1 所示的是典型的重费米子材料 CeRhIn5 的晶格结构。这种材料是层状结构，具有局域 f 电子的 Ce 原子层中间夹杂着 In 和 Rh 元素构成的导带电子层，它们之间存在着反铁磁自旋耦合即近藤耦合，并伴随着局域自旋之间的 RKKY 交换相互

作用，在低温下形成重电子。

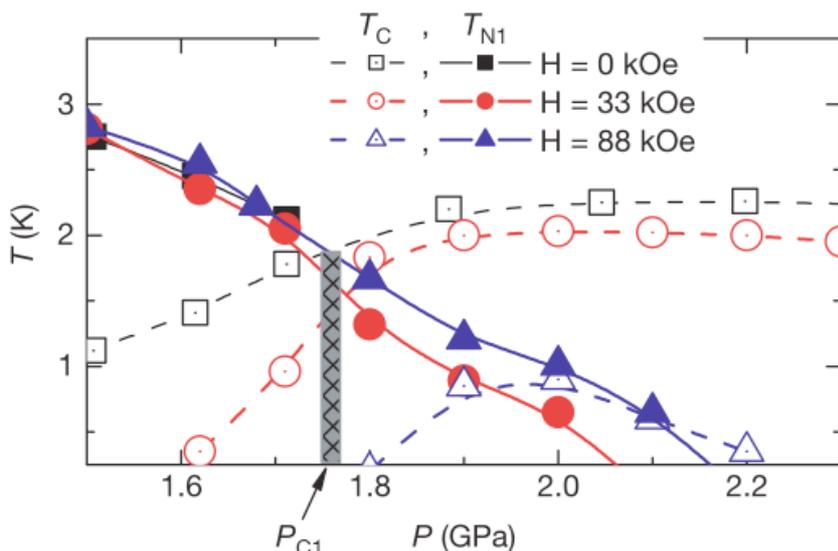


图 1-2 重费米子材料中反铁磁相超导相随压力的变化。

重费米子体系作为最早发现的非 BCS 类型的超导体，主要的工作在于研究导致其超导行为的物理原因。但是正如高温超导体在理论上还没有被理解一样，重费米子体系的物理起源也还不很清楚，虽然不断地有实验支持超导体的磁性起源，比如在某些体系中发现了反铁磁相和超导相的共存等。图 1-2 就是一个重费米子材料中反铁磁态与超导态共存的图像。

另外一个研究重费米子材料的重要的方向是理解体系的量子临界行为，这一点和高温超导体很像。传统的量子临界理论是自旋密度波理论。但这个理论在某些方面和实验不符合。

这些理论问题目前还不很清楚，这也一直都是物理学家致力于研究的领域。还有一个最近的进展是发现了在很多的重费米子材料中存在一个高温的温度标度。这个温度区分了 f 电子高温的个体行为和低温的集体激发，表现在一系列不同的物理性质中，比如光电导，电阻，磁化率。

### 1.3 动力学平均场理论的发展

下面我们将简单回顾下动力学平均场方法及量子团簇理论的发展，许多研究者都在其中做了十分巨大的贡献。1989 年，由 Metzner 和 Vollhardt 最早指出，通过对跃迁积分做适当的标度，将使得关联费米子的格点模型在无穷维情况下转变为一个非平庸的极限模型[1]。

之后，由 Muller-Hartmann 证明了多体格林函数微扰理论的局域性，并用其推导出了用 Luttinger-Ward 泛函形式表示的自能的自洽方程，并利用弱耦合微扰理论将其展开到不同级数[2, 3]。这个方法被用于研究 Falicov-Kimball 模型，并由 van Dongen 和 Vollhardt 等人给出了对 Falicov-Kimball 模型的平均场描述[4]。之后，由 Janis 利用动力学干涉势近似理论给出了无限维情况下 Hubbard 模型的格林函数和自能的泛函方程，但是这些方程并无法用于精确的计算[5]。在此基础上，由 Ohkawa, Georges 和 Kotliar 等人认识到泛函方程可以由一个处于自洽的环境中的 Anderson 杂质模型来描述，这就是动力学平均场方法框架的主要部分[6, 7]。

Georges 和 Kotliar 等人对比了该理论与经典平均场理论，并指出了其与 Weiss 有效场理论的相似之处。他们揭示了动力学平均场方法可以被推广到用于研究具有对称性破缺的相，并且可以用于研究强关联电子体系中的各种不同的模型。

之后，许多数值方法被用于在动力学平均场方法框架内来求解有效杂质模型。比如，Hirsch-Fye 量子 Monte Carlo 方法，精确对角化方法以及 Wilson 数值重整化群方法等。

之后，为了将短程关联以及空间涨落包括在动力学平均场框架内，两种新的方法发展起来：由 Hettler 和 Jarrell 等人发展的动力学团簇近似方法和由 Kotliar 等人发展的原胞动力学平均场方法[8, 9, 10]。这些方法将格点问题映射为一个自洽地与平均场耦合的有限大小的团簇问题。当团簇内只有一个格点的时候，则过渡为原来的动力学平均场方法。这些方法被统称为量子团簇理论，两种方法之间的关联性也得到了研究[11]。目前，量子团簇理论被广泛地运用于研究高温超导问题，以及研究阻挫系统中的几何阻挫和各向异性对 Mott 金属-绝缘体相变和一些磁性相变的影响[12-32]。

另外一种得到巨大发展的方法被称为“LDA+DMFT”[33]，该方法是将 LDA（局域密度近似）与动力学平均场方法结合。利用 LDA 方法得到电子的能带结构，并构造出一个包含电子关联项的多体哈密顿量。再通过动力学平均场方法求解此哈密顿量，并最终自洽得到电子在各个轨道上的占据情况。

### 1.3 本文内容和章节安排

本文共分为五章。大致结构如下：

论文的第一章介绍了一些重费米子材料的背景内容。实验中观察到的许多奇特

的量子现象，例如超导与反铁磁的共存等。之后简单回顾了动力学平均场理论的发展历史。以及本文用到的团簇动力学平均场理论的出现克服了动力学平均场理论中单杂质不能包含短程关联的问题。

在论文的第二章，我们将首先详细介绍动力学平均场方法的推导过程，之后展开成团簇动力学平均场方法的推导过程，以及介绍其其应用的领域。之后简单说明几种常用的杂质求解器。后介绍动力学平均场方法的最新发展。

论文的第三章将主要讲解我们程序中选择的杂质求解器，即精确对角化杂质求解器的工作原理，详细推倒如何用得到的本征值本征态计算我们所需要的物理量，最后展示 CDMFT+ED 循环流程图。

论文的第四章将简单介绍论文中用到的自己编写的程序。首先是将全对角化算法改善成为 Arnoldi 算法，给出 Arnoldi 算法的原理和运算流程。之后给出数据来说明将全对角化算法改成 Arnoldi 算法后计算结果的精度没有下降，但计算时间及内存却大大减少。之后简单介绍两种并行架构，并说明它们在数值模拟中的作用。

在第五章是我们程序的一些计算结果的讲解和分析。

## 第 2 章 团簇动力学平均场方法

### 2.1 引言

随着重费米子材料以及高温超导现象的发现，凝聚态强关联领域越来越受到了研究者的关注，比如莫脱金属-绝缘体相变、巡游的铁磁性等问题。在这些系统中电子的相互作用能很大，大到与电子动能的量级相当，所以一些常规的方法，在处理这些问题的时候难度很大，即使是对最简单的强关联 Hubbard 模型和 Kondo 模型来说也是如此。在强关联体系中，电子的局域化，量子以及自旋涨落这些在微扰论中被忽略的作用将变得十分重要。只有在一维情况下，这些问题才可能是严格可解的。而在二维以及三维的情况下，并没有有效的工具来求解这些问题。随着数值技术及计算机应用的发展，物理学家想到了用一些极限行为来对原始模型做近似。这些近似使系统的一些重要性质就可以被凸显出来。选择适合的近似，使其他物理量的干扰对于要研究的问题变得微弱就成了这时候的主要问题。随着计算机技术的发展，一些数值方法，比如精确对角化，量子 Monte Carlo 方法得到了重大的发展。但是，这些方法也存在有相应的困难，比如，低温下量子 Monte Carlo 方法中所遇到的负符号问题就是一个目前还没有办法解决的问题。

我们在这里将选择一种可以有效处理强关联问题的方法：动力学平均场方法的拓展——团簇动力学平均场方法<sup>[34,35]</sup>。动力学平均场方法的基本思想是将一个完整晶格的多体问题简化成为一个局域杂质问题。这个单格点将被看成是一个杂质，并与一个有效媒介联系在一起。这个有效媒介可以用来描述其他格点对这个单格点的作用，并可以通过自洽求解的方法来确定。这种自洽方法将可以保持系统原来的对称性并可以得到系统整体的性质。

动力学平均场方法忽略了空间涨落，却包含了所有的局域量子涨落。这使得该方法中的平均场是依赖于时间或者频率的，所以该方法被称为“动力学”平均场理论。动力学平均场方法虽然在无穷维的情况是精确的，但是在一些二维情况下或者在一些阻挫系统中，动力学平均场方法并不十分有效，这是因为在动力学平均场方法中被忽略的空间涨落以及非局域的关联在这时将变得十分重要。所以，传统的动力学平均场方法并无法很好地解决比如自旋系统中的自旋波，无序系统中的局域化等问题。为了能加入这些非局域关联与空间涨落，团簇动力学平均场方法作为动力学平

均场方法的一种团簇扩展方法被发展起来。团簇动力学平均场方法是将原来的与有效媒介耦合的单格点扩展为一个有限尺寸的团簇点，加入短程关联和空间涨落，这样做的结果是可以用它来处理对称破缺问题，例如 AF 和 d-wave SC。

本章的主要结构是：

2.2 节我们将先简要介绍动力学平均场方法的原理。主要讲到的是动力学平均场自洽循环中的两个方程，以及一些公式的推导。

2.3 节接着来介绍团簇动力学平均场的一些概念，重点讲述团簇动力学平均场理论是在动力学平均场理论上面做了哪些扩展，便于读者理解。

2.4 节我们用来介绍在量子杂质理论中常用到的杂质求解器，并陈述比较它们之间的优缺点。

## 2.2 动力学平均场理论

首先，我们先来简单的回顾一下动力学平均场理论。在这里我们就是简单的讨论一下动力学平均场理论下面的基本的思想。

于是，我们就先来考虑一个简单的问题，一个  $d$  维晶格中的一般的 Hubbard 问题，这个问题由以下的哈密顿量来描述

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i n_i \quad (2-1)$$

公式里的  $c_{j\sigma}$  表示  $d$  维晶格里  $j$  点上的湮灭算符，其中  $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ 。公式 2-1 中的第一项表示电子跃迁动能项，电子可以由点  $i$  跃迁到点  $j$ ，反之亦然，跃迁概率由轨道重叠积分参数  $t$  表示。第二项表示同一格点上的自旋相反的两个电子之间的库仑排斥力，也就是一个局域的关联相互作用。最后一项是系统的化学势。这三项完全描述了系统的物理性质。可是正如我们上文所说过的，即使一个很简单的系统，在有限维度下也很难得到一个比较精确的结果。下面就让我们用 Hubbard 模型作为例子来看看 DMFT 方法究竟是如何在有限维的情况下得到精确结果的。图 2-1 是 DMFT 循环的图示。

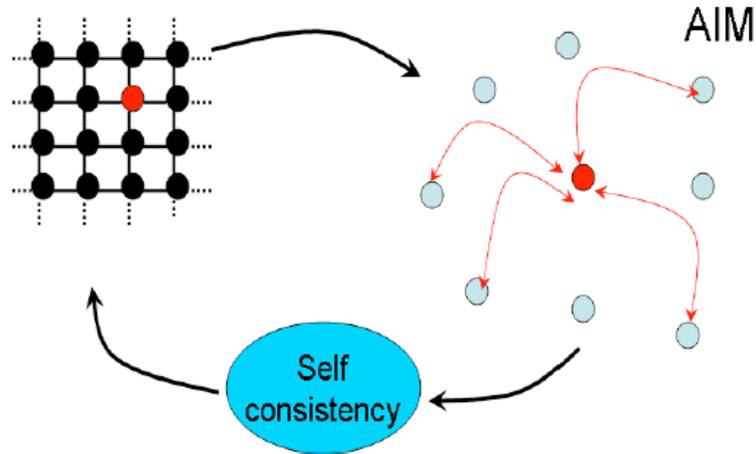


图 2-1 动力学平均场自洽循环图示。

1, 我们并不会去解完整的晶格问题, 而是去解一个单点, 即上图中右侧用红色标记出来的单杂质。

2, 然后我们用一个有效的自由费米子库对杂质点的作用来模拟晶格模型中其它的点对某一个选定格点的作用。与其它平均场理论的不同之处在于这个单杂质模型可以模拟这个点上的所有的动力学问题, 例如粒子由该点跃迁出去或者从库里跃迁到杂质上。

3, 而这个有效库的具体形式只有在达到了自洽条件的情况下才能得出。这里的自洽循环连接了有效杂质模型和原始的晶格 Hubbard 模型。

在数学语言中, 可以很好地用一个“孔洞”来解释。

$$\frac{1}{Z_{eff}} e^{-S_{eff}[c_o^+, c_o\sigma]} \equiv \frac{1}{Z} \int \prod_{(i,j,\sigma) \neq (o,o)} Dc_{i\sigma}^+ Dc_{j\sigma} e^{-S} \quad (2-2)$$

给出了虚时作用量  $S[c^+, c]$ , 我们就可以对所有  $(i, j) \neq o = (i_o, j_o)$  的点进行积分得出有效作用量  $S_{eff}[c_o^+, c_o]$ ,  $S_{eff}[c_o^+, c_o]$  可以写成一个二次型的形式:

$$S_{eff} = \int_0^\beta d\tau \sum_{\sigma} c_{o\sigma}^+(\tau) g_{\sigma}^{-1}(\tau) c_{o\sigma} + U \int_0^\beta d\tau m_{o\uparrow}(\tau) n_{o\downarrow}(\tau) \quad (2-3)$$

$g_o(\tau)$  是一个有效 Weiss 场。它的物理意义是在  $\tau = 0$  时刻在杂质处湮灭一个电子, 之后在  $\tau$  时间间隔后在该点处又产生一个电子的概率。而与静态的平均场的最大的不同之处就是,  $g_o(\tau)$  是一个依赖时间的格林函数, 它虽然截断掉了空间自由度但是保留了所有的时间自由度。它表示有效作用量的裸格林函数。我们有了  $S_{eff}$  就可以计算有效杂质模型的局域格林函数:

$$G_{imp}(\tau) = -T_{\tau} \langle c_o^+(\tau) c_o \rangle S_{eff} \quad (2-4)$$

通过 Dyson 方程:

$$\Sigma_{\mu\nu}(i\omega_n) = g_\sigma^{-1}(i\omega) - G_\sigma^{imp-1}(i\omega) \quad (2-5)$$

可以提取出局域自能  $\Sigma$ ，就可以计算出晶格的格林函数:

$$G(k, i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon_k - \Sigma} \quad (2-6)$$

对所有布里渊区求和做平均就可以得到晶格的局域格林函数

$$G_{loc}(i\omega) = \sum_k \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon_k - \Sigma} \quad (2-7)$$

这里我们将格林函数转换到了 Matsubara 轴上  $G(i\omega) = \frac{1}{2} \int_0^\beta e^{i\omega\tau} G(\tau)$ 。自洽条件需要两个局域格林函数相等也就是式 2-4 和式 2-7 相等:

$$G_{imp} = G_{loc} \quad (2-8)$$

或者等价于

$$\Sigma(i\omega_n) = g_\sigma^{-1}(i\omega_n) - G_\sigma^{loc-1}(i\omega, \Sigma) \quad (2-9)$$

在公式 2-3 和公式 2-7 背后有一个 DMFT 成立的基本假设，我们假设

$$\Sigma(i\omega) = \Sigma(k, i\omega) \quad (2-10)$$

这个假设在  $d \rightarrow \infty$  的情况下是精确地。可以进一步通过一个“孔洞的”情况来理解它。写下量子作用量:

$$S = S_o + \Delta S + S^o$$

其中  $S^o$  表示除去 o 点的作用量,  $S_o$  仅仅是 O 点处的作用量,  $\Delta S$  是 O 点和其它格点的相互作用作用量

$$S_o = \int_0^\beta d\tau \sum_\sigma c_{o\sigma}^+(\tau) (\partial_\tau - \mu) c_{o\sigma} + U \int_0^\beta d\tau n_{o\uparrow}(\tau) n_{o\downarrow}(\tau)$$

$$\Delta S = - \int_0^\beta d\tau \sum_{i\sigma} c_{o\sigma}^+(\tau) c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^+(\tau) c_{o\sigma}$$

我们有

$$\frac{1}{Z_{eff}} e^{-S_{eff}[c_{o\mu\sigma}^+, c_{o\nu\sigma}]} \sim \int \prod_{(i,j,\sigma) \neq (o,o)} Dc_{i\sigma}^+ Dc_{j\sigma} e^{-\Delta S} e^{S_o}$$

也就是说期望值  $\langle e^{-\Delta S} \rangle e^{S_o}$  是从一个孔洞系统中计算出来的。有效作用量可以写成:

$$S_{eff} \sim \sum_{n=1} \sum_{i_1 \dots j_n} t^{2n} \int c_{i_1}^+(\tau_{i_1}) \dots c_{i_n}^+(\tau_{i_n}) G_{i_1 \dots j_n}^o(\tau_{i_1} \dots \tau_{i_n}, \tau_{j_1} \dots \tau_{j_n}) c_{j_1}(\tau_{j_1}) \dots c_{j_n}(\tau_{j_n})$$

现在开始增加系统的维度, 由能量守恒定律得出跃迁项正比于  $t_{ij} \sim \sqrt{1/d^{|i-j|}}$ , 所以在  $d \rightarrow \infty$  的极限下就只剩下最近邻  $n=1$  项存在了。而这个就意味着一个局域的自能。

## 2.2 团簇动力学平均场理论

动力学平均场理论方法在描述一些主要是局域的物理量时获得了很大的成功 [07-35]，在这种方法的帮助下物理学家们已经对金属——绝缘相变这种物理现象有了一个比较统一的认识，但是当我们讨论的物理问题不是局域化的时候，这种方法开始失效了。因此物理学家对 DMFT 进行了一个扩展，使它可以包含短程关联，也就是我们在这节中要介绍的团簇动力学平均场理论(CDMFT)。

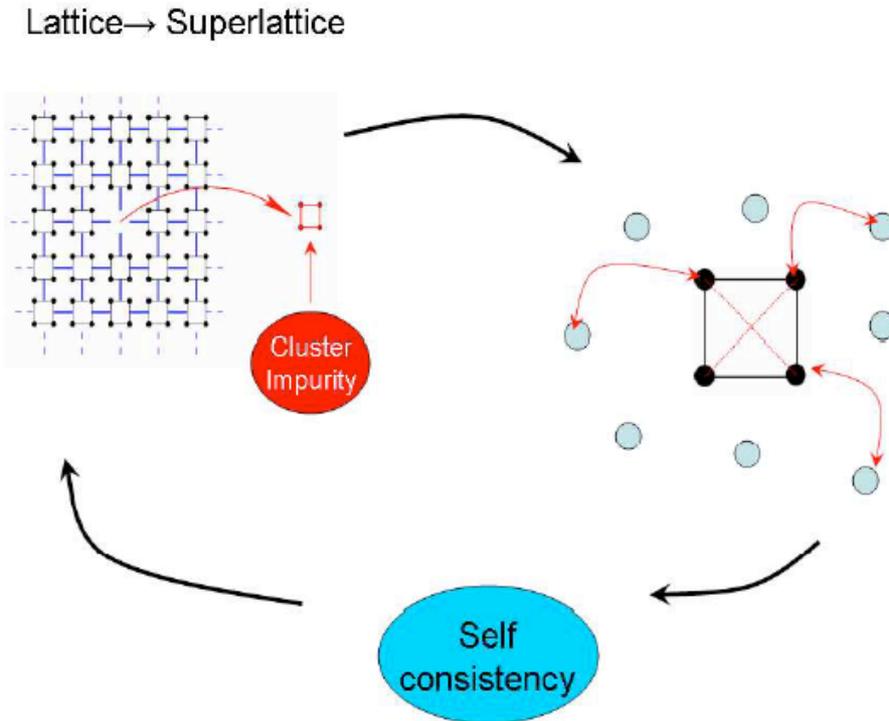


图 2-2 团簇动力学平均场理论图解

这个方法十分的简单并保留了 DMFT 的核心精神。我们在 CDMFT 中让一个团簇来作为杂质，代替 DMFT 中的单点杂质，同 DMFT 中的一样我们通过对杂质团簇以外的所有自由度的积分来构建一个有效作用量：

$$\frac{1}{Z_{eff}} e^{-S_{eff}[c_{\mu\sigma}^+, c_{\nu\sigma}]} \equiv \frac{1}{Z} \int \prod_{(i,j,\sigma) \neq (\mu,\nu)} Dc_{i\sigma}^+ Dc_{j\sigma} e^{-S}$$

其中  $(\mu, \nu)$  代表了团簇内部的坐标。之后可以求解杂质问题了，将有效作用量写成一个二次型的形式：

$$S_{eff} = \int_0^\beta d\tau \sum_{\mu\nu\sigma} c_{\mu\sigma}^+(\tau) g_{\mu\nu\sigma}^{-1}(\tau) c_{\nu\sigma}(\tau) + U \int_0^\beta d\tau \sum_{\mu} n_{\mu\uparrow}(\tau) n_{\mu\downarrow}(\tau)$$

与 DMFT 的不同之处是，Weiss 场  $g_{\mu\nu\sigma}(\tau)$  在这里是一个  $N \times N$  的矩阵，代表了一个包

含  $N^2$  个杂质的团簇中所有格点之间的关系。这时候，我们又一次的要让杂质模型的局域格林函数等于原始晶格模型的局域格林函数。而这里的局域是指“团簇之中”，所以我们这里涉及到的所有的表示杂质的量都是  $N \times N$  的矩阵，局域格林函数也是：

$$G_{\mu\nu\sigma}(\tau) = -T_\tau \langle c_{\mu\sigma}^+(\tau) c_{\nu\sigma} \rangle S_{eff} \quad (3-11)$$

但是，现在我们要如何计算晶格格林函数的自能呢，因为现在不是单格点的自能  $\Sigma$  了，而变成了一个团簇自能  $\Sigma_{\mu\nu}$ ，是有下表<sup>表</sup>的。这里就涉及到了 CDMFT 的一个最关键的思想。我们应用与 DMFT 相同的概念到团簇杂质模型中，将一个团簇堪称是一个杂质点，这样假设团簇自能  $\Sigma_{\mu\nu}$  就像是在 DMFT 中一样是局域的，我们就可以构建一个超晶格格林函数（这里的局域是有一定尺度的，就是超晶格的尺度）：

$$\hat{G}(K, i\omega) = \frac{1}{(i\omega + \mu)\hat{1} + \hat{t}_K - \hat{\Sigma}} \quad (2-12)$$

超晶格的傅里叶空间  $K$  是在超晶格的布里渊区中定义的。这里面团簇杂质中的  $N \times N$  的关系用矩阵符号表达， $\hat{1}$  是  $N \times N$  的单位矩阵， $\hat{t}_K$  是团簇内部的跃迁矩阵，它表述了超晶格中的能带色散关系。像之前一样，局域的团簇格林函数是超晶格格林函数在超晶格布里渊区上面的积分：

$$\hat{G}_{loc}(i\omega_n) = \sum_K \hat{G}(K, i\omega) = \int_{RBZ} \frac{1}{(i\omega_n + \mu)\hat{1} - \hat{t}_K - \hat{\Sigma}(i\omega_n)} \frac{dK^d}{(2\pi)^d / Nc} \quad (2-13)$$

之后我们就获得了一个闭合的方程式强制这个局域的格林函数  $\hat{G}_{loc}$  等于从有效量子作用量中获得的格林函数：

$$\hat{G} \equiv \hat{G}_{loc} \quad (2-14)$$

或者等价于

$$\Sigma_{\mu\nu}(i\omega) = g_{\mu\nu\sigma}^{-1}(i\omega) - G_{\mu\nu\sigma}^{loc-1}(i\omega, \hat{\Sigma}) \quad (2-15)$$

下面我们看一个 CDMFT 的自洽循环示意图，其中杂质求解器是量子蒙特卡洛杂质求解器。

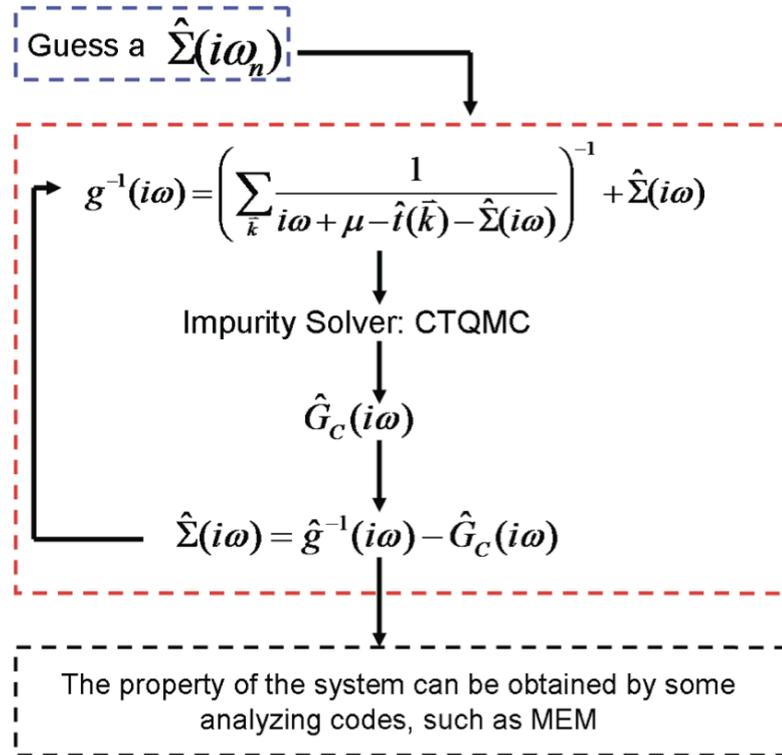


图 2-3 团簇动力学平均场方法的自洽循环。

团簇动力学平均场方法的简要流程如下图所示：

- (1) 利用微扰论得到一个初始自能  $\Sigma(i\omega)$ 。
- (2) 利用公式(2-2)得到  $g^{-1}(i\omega)$ 。
- (3) 将  $g^{-1}(i\omega)$  放入杂质求解器中，进行求解，得到  $G_C(i\omega)$ 。
- (4) 利用  $\Sigma(i\omega) = g^{-1}(i\omega) - G_C(i\omega)$  得到新的自能  $\Sigma(i\omega)$ 。
- (5) 重复进行(2)到(4)，直到自能收敛到所需要的精度内。
- (6) 当自能收敛之后，我们可以利用一些额外的程序来计算得到体系的物理量，例如态密度等。

现在动力学平均场方法现在已经被广泛的应用于求解带有阻挫的系统的相变或者相的竞争问题。团簇动力学平均场方法具有开放性边界条件。这也意味着该方法可以更加改善以使用来研究带有自旋偶合的系统以及不具有平移对称性的系统的量子相变问题。

### 2.3 几种常见的杂质求解器

动力学平均场本身是一个框架，选择一个合适的杂质求解器才是计算过程中涉

及到的最核心的东西。本节将首先简单介绍几种常见的杂质求解器。

(1) Lanczos 算法: Lanczos 算法[36]的基本思想简述如下, 对于一个给定的哈密顿量  $\hat{H}$ , 我们可以从  $|\psi_0\rangle$  出发, 将  $\hat{H}$  化简约化成一个有限大小的三对角矩阵  $\hat{H}^*$ 。再对后来得到的矩阵做对角化, 从而得到体系的基态能量  $E_g$  与基态波函数  $|\psi\rangle_g$  的近似值。

(2) 连续时间 Monte Carlo 方法: 这种方法是一个求解强关联系统的有效方法 [37,38]。但是对于费米子系统以及一些存在有阻挫的系统来说, Monte Carlo 方法本身有一个无法克服的缺陷: 负符号问题。

对于传统的 Monte Carlo 方法, 比如蠕虫算法和世界线算法, 虽然计算速度很快并且能够计算较大的系统, 但是这些算法本身无法克服负号问题。所以, 一些新的 Monte Carlo 方法被发展起来, 比如图形 Monte Carlo 以及连续时间 Monte Carlo 方法。连续时间 Monte Carlo 方法可以很方便地与团簇动力学平均场方法结合起来, 用来研究强关联重费米子系统的量子相变问题。

(3) 数值重整化群(NRG)方法: 数值重整化群方法是由 Kenneth Wilson 提出的用来处理量子杂质占主导地位的强关联问题。本质上是一个非扰动过程。它最初用来处理近藤模型。近藤模型描述了一个具有-1/2 磁自旋与金属导电电子耦合的系统。

众所周知的, 这个问题很难去在理论上分析清楚, 因此, 微扰的方法在低能情况下失效。Wilson 第一次证明了用数值重整化群方法处理近藤模型, 得到近藤模型的基态是个单重态。不过最有意义的一点是重整化、固定点、重整化流的概念被引入到了凝聚态领域中, 由于 Wilson 的突出贡献, 他得到了 1982 年的诺贝尔物理学奖。

## 2.4 动力学平均场方法的最新发展

随着深入的研究, 动力学平均场方法也得到了很大的发展, 这些发展主要集中在: 发展能更好更快速而又精确地求解杂质问题的杂质求解器; 想办法扩展动力学平均场方法的应用范围, 比如使其可以用于研究无序系统; 针对动力学平均场方法本质上的局限性, 发展新的理论, 例如想办法在方法中加入空间涨落与关联效应等。下面我们将要简单介绍一种动力学平均场方法的最新发展: LDA+DMFT 也就是局域密度近似结合动力学平均场方法。

在 LDA 方法之中, 必须首先假设每个电子都是独立运动的, 电子与电子之间没

有关联。这样以来，每一个电子都可以看成是在由其它电子产生的时间平均电荷密度场之中运动。这种方法在弱关联的情况下可以计算出很好的结果，但是，在强关联体系中却并不会给出很好的结果。LDA+DMFT 的方法最早是由 Anisimov 等人提出的，方法从 LDA+U 的思路出发，将 DMFT 引入 LDA 中，这样一来就可以克服 LDA 忽略材料中的电子间关联的这一缺陷。图 2-8 表示的是 LDA+DMFT 的简易计算流程。该方法包含有两个迭代流程，一个是 DMFT 本身的迭代，另外一个是与 LDA 结合之后的迭代。与 LDA+U 方法类似，该方法引入了一个 Wannier 函数  $\chi_a$  来描述电子， $a$  表示轨道。之后就可以定义得到局域格林函数  $G_{loc}$  与电荷密度空间分布  $\rho(r)$ 。下面来简单介绍一下 LDA+DMFT 的大致流程：

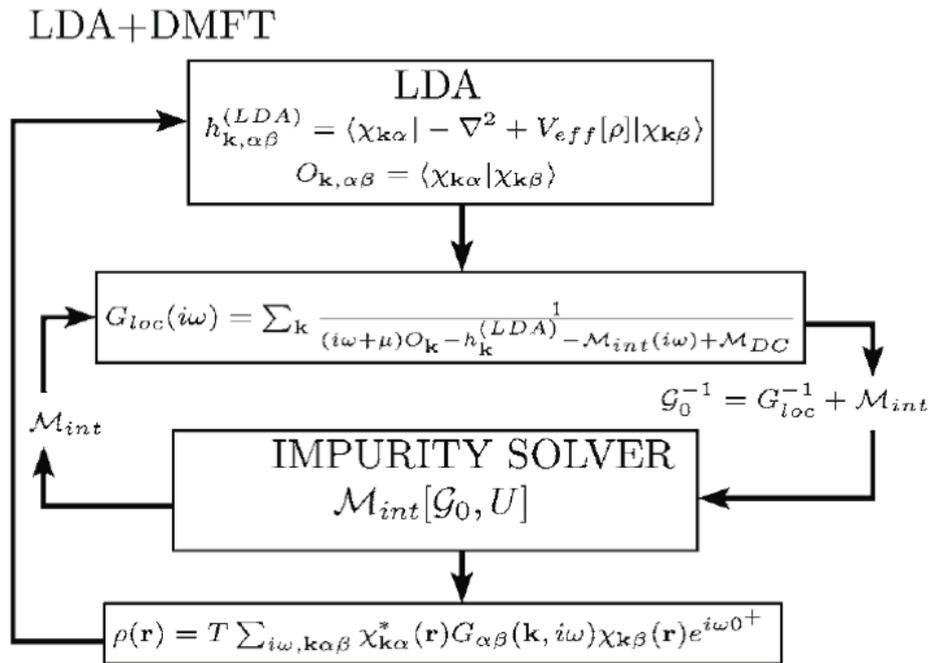


图 2-8 LDA+DMFT 简单流程图

- (1) 给一个初始的  $\rho(r)$ 。
- (2) 利用给定的  $\rho(r)$ ，求出 LDA 的单体哈密顿量  $h_{\mathbf{k},\alpha\beta}^{(LDA)}$  其中  $V_{eff}$  表示基于  $\rho(r)$  得到的有效势能。
- (3) 利用  $h_{\mathbf{k},\alpha\beta}^{(LDA)}$  得到局域格林函数  $G_{loc}$ ，其中  $M_{int}$  表示局域自能， $M_{DC}$  表示自能中的 double-counting 项，这是由于在 LDA 中近似包含了 Coulomb 相互作用，而在前面计算得到的  $M_{int}$  中也包含了 Coulomb 相互作用的影响，所以为了避免重复计算

Coulomb 相互作用的影响, 需要扣除在 LDA 中近似包含的 Coulomb 相互作用。这一项被称为 double-counting 项。

(4) 利用  $G_0^{-1} = G_{loc}^{-1} + M_{int}$  计算得到  $G_0^{-1}$  并将其输入到杂质求解器中求解出新的  $M_{int}$ 。

(5) 重复步骤 3) 和 4) 直到收敛。这次迭代就是 DMFT 自身的迭代。

(6) DMFT 迭代结束之后, 利用  $G_{loc}^{-1} = G_0^{-1} - M_{int}$  得到局域格林函数, 并求出  $\rho(r)$ 。

(7) 重复步骤 2) 到 6) 直到收敛, 这次迭代就是结合 LDA 的迭代。

(8) 迭代结束, 利用一些其他程序计算得到物理量。

将真实的能带理论与动力学平均场方法进行结合, 并且用来研究关联电子体系, 这很大程度上丰富了动力学平均场方法所研究的领域。LDA+DMFT 的方法也为那些 LDA 与 LDA+U 方法不能很好求解的系统提供了一种新的研究方法, 比如可以利用这种方法研究关联金属以及具有顺磁局域磁矩的一些体系。近年来, LDA+DMFT 方法被广泛用于研究过渡金属氧化物以及重费米子材料, 并且也获得了很丰富的成果。

## 2.5 本章小结

本章我们首先介绍了研究强关联问题的重要方法动力学平均场方法的发展历史, 之后简单回顾了动力学平均场方法的基本思想以及团簇动力学平均场的基本流程。之后简单介绍了作杂质求解器的几种数值算法, 分析了它们的优缺点。最后简单地说明了动力学平均场的一个近几年来很被关注的发展, 即团簇 LDA+DMFT 方法。相信通过这章的介绍, 读者们已经对动力学平均场有一个比较系统的理解了, 那么下一章我们将重点介绍我在程序中用到的精确对角化这种杂质求解器。

## 第 3 章 精确对角化杂质求解器

### 3.1 精确对角化基本思想

精确对角化算法的基本思想是先取一组自然基  $\hat{\psi}$ ，之后将这组基作用于系统的哈密顿量上，将哈密顿量化成空间中的矩阵形式  $\hat{H}$ ，再对  $\hat{H}$  做对角化，就可以得到矩阵的所有本征值和本征态。精确对角化算法的优点是在于可以对角化矩阵得到系统的全部信息，但是其缺点在于不能计算太大的体系，通常 8 个格点以下，而且所需要的存储空间很大。

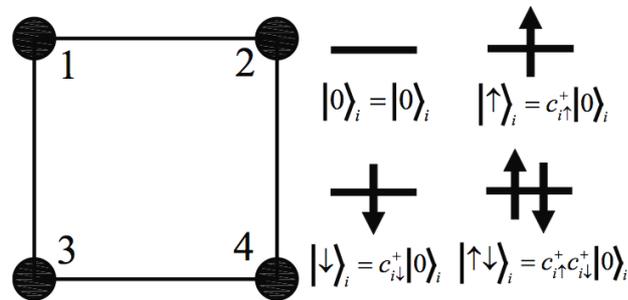


图 3-1 正方晶格的 Hubbard 模型以及在粒子数表象下的基

在固体物理中的典型的晶格模型就是 Hubbard 模型，

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (3-1)$$

对于一个有限的有  $L$  个格点的团簇，完整的希尔伯特空间的维数是  $4^L$ 。这是一个迅速指数增长的数字，只有加入对称性化简哈密顿量才能使可计算的点数目到达一个理想的水平。例如常用的粒子数守恒，自旋守恒等。

下面简单说明一下如何将哈密顿量写成矩阵形式，之后利用粒子数和自旋守恒将哈密顿量矩阵分块。

假设我们要处理的系统包含  $L=4$  个格点，其中  $N_{\uparrow}=3$ ， $N_{\downarrow}=2$ 。我们可以将占据态表示成对应的二进制的形式

$$c_{3\uparrow}^+ c_{2\uparrow}^+ c_{0\uparrow}^+ c_{3\downarrow}^+ c_{1\downarrow}^+ |0\rangle \rightarrow (\uparrow, \uparrow, 0, \uparrow) \times (\downarrow, 0, \downarrow, 0) \rightarrow 1101 \times 1010 \quad (3-2)$$

完整的基总共有 24 个，由 4 个自旋向上的态和 6 个自旋向下的态组成。将位模式用它们所对应的整数值进行排序，下图是二进制模式与其对应的整数值。

no.	↑-patterns	no.	↓-patterns
0	0111 = 7	0	0011 = 3
1	1011 = 11	1	0101 = 5
2	1101 = 13	2	0110 = 6
3	1110 = 14	3	1001 = 9
		4	1010 = 10
		5	1100 = 12

图 3-2 包含两个自旋向下三个自旋向上的 4 格点体系的基态

我们可以用自旋向上和自旋向下的态的标号  $(i, j)$  来标记某个态在所有 24 个态中的序号，表示成  $n = i \cdot 6 + j$ ，我们例子式(2-4)中的态对应于  $(2, 4)$ ，它在所有 24 个态中对应于  $2 \cdot 6 + 4 = 16$ ，第 16 个态。

然后将哈密顿量作用在这些态上就可以得到哈密顿量的矩阵形式。如式(3-3)

$$\begin{aligned}
 \uparrow\text{-hopping} : |16\rangle &\rightarrow -t(|10\rangle + |22\rangle), \\
 \downarrow\text{-hopping} : |16\rangle &\rightarrow -t(|14\rangle + |17\rangle + |15\rangle - |12\rangle), \\
 U\text{-term} : |16\rangle &\rightarrow U|16\rangle.
 \end{aligned} \tag{3-3}$$

完整的哈密顿量是一个  $24 \times 24$  维的矩阵。通常来说这个矩阵是一个稀疏矩阵库。

之后分块对角化哈密顿量得到哈密顿量的本征值本征态，用得到的本征值  $E_g^k$  和本征态  $|\phi_g^k\rangle$  来计算我们想要的物理量的热力学平均值

$$\langle O \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta E_g^k} O)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \frac{\sum_k e^{-\beta E_g^k} \langle \phi_g^k | O | \phi_g^k \rangle}{\sum_k e^{-\beta E_g^k}} \tag{3-4}$$

### 3.2 精确对角化作为 CDMFT 的杂质求解器

了解了精确对角化的基本思想，现在我们面对的问题就是如何用精确对角化来处理有效杂质问题。而 Anderson 杂质模型已经被物理学家研究几十年了，现在有很多解析的或者数值的方法来处理这个问题。当然其中也包括精确对角化方法。用精确对角化来处理问题是，目前最多能算 12 个格点。参考文献

在实际的应用中有效作用量  $S_{eff}$  是从 Anderson 杂质模型的哈密顿量  $H_{AIM}$  中推出来的。在 CDMFT 中单点杂质被团簇杂质给替代了。

$$H_{AIM} = \sum_{\mu\nu} \sum_{\sigma} E_{\mu\nu\sigma} c_{\mu\sigma}^+ c_{\nu\sigma} + U \sum_{\mu} n_{\mu\uparrow} n_{\mu\downarrow} + \sum_k \sum_{\sigma} \varepsilon_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_k \sum_{\mu\sigma} V_{k\mu\sigma} a_{k\sigma}^+ c_{\mu\sigma} + V_{k\mu\sigma}^* c_{\mu\sigma}^+ a_{k\sigma} \quad (3-5)$$

公式里面  $c_{\mu\sigma}$ ，表示在点  $\mu$  处湮灭一个自旋为  $\sigma$  的电子，而  $a_{k\sigma}$  表示湮灭电子库里面的处于点  $k$  处的电子。矩阵  $E_{\mu\nu\sigma}$  中的每个元素都是团簇中的点之间的跃迁系数。这个哈密顿量的物理意义是，团簇杂质（内部用  $\mu$ ， $\nu$  标记），镶嵌在一个自由电子库里面，库中的电子能级为  $\varepsilon_k$ ，与团簇杂质的跃迁系数是  $V_{k\mu\nu}$ 。( $\varepsilon_k$ ， $V_{k\mu\nu}$ ) 这组参数是一组变量，它是由自洽条件决定的。在精确对角化方法中最主要的化简是将问题变化成一个由  $n_s$  个点的 Anderson 模型。而  $n_b$  是截断后的库轨道的个数。问题中点的总数约为  $n_s \approx 12$ 。

自由电子库决定了团簇杂质的 Weiss 场，

$$g_o^{\mu\nu}(i\omega_n)^{-1} = i\omega_n \delta_{\mu\nu} + E_{\mu\nu} - \sum_k \frac{V_{\mu k}^* V_{k\nu}}{i\omega_n - \varepsilon_k}$$

经过截断后就变成了一个有限点的情况

$$g_{onb}^{\mu\nu}(i\omega_n)^{-1} = i\omega_n \delta_{\mu\nu} + E_{\mu\nu} - \sum_k \frac{V_{\mu k}^* V_{k\nu}}{i\omega_n - \varepsilon_k} \quad (3-6)$$

这样，从这里得到的 Weiss 格林函数就可以进入到自洽循环里面了。

下面介绍对 CDMFT 的 ED 循环

1，首先是用精确对角化方法处理截断了的 AIM，并求解它的本征值和本征态。然后用公式 3-4 求出团簇杂质的格林函数。

2，用之前的 Weiss 场的格林函数减去团簇杂质的格林函数，提取出自能，再带入到 Dyson 方程中，对整个布里渊区求和得到晶格模型的局域格林函数。

$$\hat{G}(\omega, \hat{\Sigma}) = \sum_{k \in RBZ} \frac{1}{\hat{1}(\omega + \mu) + \hat{t}_k - \hat{\Sigma}}$$

3，再用自洽条件去决定一个新的 Weiss 函数

$$g_{onew}^{\mu\nu}(\omega)^{-1} = \Sigma_{\mu\nu}(\omega) + G_{\mu\nu}(\omega)^{-1}$$

4，最后是重新确定  $H_{AIM}$  中的库参数  $\varepsilon_k$  和  $V_k$ ，这是一个很精细的过程 我们需要寻找一组最合理的  $\varepsilon_k$ ， $V_k$  从而确定 Weiss 函数  $g_{onb}^{\mu\nu}(\omega)$ ，使它可以很准确的描述从自洽条件中得到的  $g_{onew}^{\mu\nu}(\omega)$ 。这个过程说白了就是将  $g_{onew}^{\mu\nu}(\omega)$  映射到  $\{g_{onb}^{\mu\nu}(\omega)\}$  函数空间。

它们之间数值上越接近，我们所求得的物理结果就越合理。而它们之间的差距是用函数

$$f = \left\| \mathbf{g}_{onb}^{\mu\nu}(\omega)^{-1} - \mathbf{g}_{onew}^{\mu\nu}(\omega)^{-1} \right\|$$

来表示的。这个函数称为距离函数，距离函数越小代表拟合的越好。

距离函数是任意的，现在并没有统一的说法具体用什么距离函数。我们用的距离函数是

$$f = \sum_n^{\omega_{\max}} \frac{1}{|\omega_n|} \left| \mathbf{g}_{onb}^{\mu\nu}(\omega)^{-1} - \mathbf{g}_{onew}^{\mu\nu}(\omega)^{-1} \right|$$

这个距离函数可以强调低频部分，加强了低频部分在距离函数中的比例。还有其它的选择距离函数的方法，这里就不详细介绍了。

### 3.3 本章小结

本章主要是详细介绍了精确对角化这种方法的基本思想，以及它作为 CDMFT 循环中的杂质求解器时的具体的技术，包括如何截断 Anderson 杂质模型的哈密顿量，如何将 Weiss 函数映射到 Anderson 杂质模型中，如何得到最好的映射参数。

但是全精确对角化方法计算尺度十分有限，目前只能计算 8 个格点的系统，所以我们需要采取另一种改进的方法即 Arnoldi 算法以及配合一些并行架构来提高计算效率，以及修改程序。这些内容将在下一章里做具体介绍。

## 第 4 章 Arnoldi 算法及并行架构

上一张末尾提到为了提高计算效率我们决定将全对角化算法换成 Arnoldi 算法并配合使用并行架构，现在我们就首先来简单介绍一下 Arnoldi 算法的基本思想。

### 4.1 Arnoldi 算法

代数特征值问题是数值代数的一个重要研究领域，其研究具有重要的理论意义和应用价值，许多科学和工程问题如计算流体力学、结构工程、量子力学、化学工程、航天航空、动力系统、控制理论与控制工程、信号传输及图像处理、模式识别等。最终都可以归结为矩阵特征值问题。

$$A\varphi_i = \lambda_i\varphi_i \quad (4-1)$$

的求解。其中  $A$  为  $n$  阶实(或复)方阵， $(\lambda_i, \varphi_i)$  是  $A$  得特征对。

求解问题(4-1)的传统方法是 1961 年 Francis 提出的 QR 算法[39]。这种算法对矩阵通过一些列么正变换成一个三角矩阵，就可以直接求出矩阵的特征值和特征向量了。目前，这种方法不仅在可靠性分析数值稳定性分析上取得了很好的结果，而且已经成功的编写成了软件。Matlab 软件包中的计算一般的非对称矩阵全部特征对的子程序 eig.m 就是用这种算法写成的。从某种意义上说，中、小规模矩阵特征值问题的求解基本上得到了完满的解决。但当计算大规模的矩阵的时候，算法的代价变得很巨大，不可能承受。

许多大规模矩阵都是有特殊结构的，也就是说矩阵  $A$  也许只有很少的非零元。在处理矩阵的特征值问题的时候，一般我们只对很少一部分的特征值感兴趣，如果按照实部最大或者最小，模最大或者最小等标准来求得我们需要的特征值特征向量，那么像 QR 算法那样求得所有的特征对的算法不仅浪费，而且对矩阵进行分解时会造成零元灾难性的填充，以至于存储量显著的增加，造成内存不足或者运算所需要的时间太大，从而使得算法中断或者运算十分的缓慢。这就需要我们开发新的有效的数值算法。

上世界七十年代以来，对于求解大规模特征值问题，Krylov 子空间方法例如 Arnoldi 型方法变得越来越普遍，这种方法的出发点是将矩阵  $A$  投影到 Krylov 子空间

$$K_m(A, \mathbf{v}) = \{\mathbf{v}, A\mathbf{v}, \dots, A^{m-1}\mathbf{v}\} \quad (4-2)$$

从而将原来的大规模特征问题转化为中小规模的特征问题，之后计算这个投影后的矩阵问题的本征值和本征态，这些本征值与本征态就可以用来近似原来的大规模矩阵的本征值和本征态。求大规模矩阵特征值问题的基本方法是第一类传统投影方法，如著名的 Lanczos 方法和 Arnoldi 方法。这类方法比较适合计算  $A$  的外部特征值，即模最大或者最小，实部最大或者最小等，的特征值对应的特征向量。

下面我们就来介绍这种可以有效地处理大规模矩阵的特征值问题的方法。

#### 4.1.1 Arnoldi 算法的原理

首先给定一个 Krylov 子空间  $K_m(A, \mathbf{v}) = \text{span}\{\mathbf{v}, A\mathbf{v}, \dots, A^{m-1}\mathbf{v}\}$ ，我们可以用下面的 Arnoldi 过程生成 Krylov 子空间  $K_m(A, \mathbf{v})$  的一组标准正交基。并且可以得到一些也有用的关系式。

算法 4.1: Arnoldi 过程

1. 定义  $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v} / \|\mathbf{v}\|_2$ 。

2. 对  $j = 1, 2, \dots, m$

$$\mathbf{w} := A\mathbf{v}_j;$$

对  $i = 1, 2, \dots, j$  循环

$$h_{ij} = \mathbf{v}_i^H \mathbf{w};$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{w} - h_{ij}\mathbf{v}_i;$$

$h_{i+1,j} = \|\mathbf{w}\|_2$ , 如果  $h_{i+1,j} = 0$ ，那么 Arnoldi 过程停止；

否则  $\mathbf{v}_{j+1} = \mathbf{w} / h_{j+1,j}$ ；

定义矩阵  $V_m = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m)$  和  $(m+1) \times m$  的上 Hessenberg 矩阵  $H_m$ ，他的非零元由上面算法给出。设后面的矩阵式前面的矩阵的前  $m$  行构成的矩阵。由上面的 Arnoldi 过程，我们有如下结论：

定理 4.2: 假设 Arnoldi 过程在第  $m$  步前不中断，令  $V_m$ ， $H_m$  和  $\bar{H}_m$  定义如前，那么  $V_m$  的列即为  $K_m(A, \mathbf{v}_1)$  的一组标准正交基，且

$$\begin{aligned} AV_m &= V_{m+1} \bar{H}_m \\ &= V_m H_m + h_{m+1,m} \mathbf{v}_{m+1} \mathbf{e}_m^H \end{aligned} \quad (4-3)$$

我们称

$$AV_m = V_m H_m + \mathbf{f}_m \mathbf{e}_m^H, \quad V_m^H V_m = I_m, \quad V_m^H \mathbf{f}_m = 0 \quad (4-4)$$

为 Arnoldi 分解， $V_m$  的列称为 Arnoldi 向量。

上面就是一个 Arnoldi 算法循环的完整的过程。通过将大的矩阵映射到小的空间里面我们得到了一个较小的矩阵。这个较小的矩阵很容易处理，而它的本征值本征态就可以近似代替之前的大矩阵的本征值本征态。

讲解完了 Arnoldi 过程，我们现在来简单介绍我在程序编写过程中用到的两种并行的架构——Openmp 以及 MPI 架构。

## 4.2 Openmp 并行架构

进入多核时代后，必须使用多线程编写程序才能让各个 CPU 核得到利用。在单核时代，通常使用操作系统提供的 **API** 来创建线程，然而，在多核系统中，情况发生了很大的变化，如果仍然使用操作系统 API 来创建线程会遇到一些问题。而 Openmp 则针对这些问题做了改善。

### 1) CPU 核数扩展性问题

多核编程需要考虑程序性能随 CPU 核数的扩展性，即硬件升级到更多核后，能够不修改程序就让程序性能增长，这要求程序中创建的线程数量需要随 CPU 核数变化，不能创建固定数量的线程，否则在 CPU 核数超过线程数量上的机器上运行，将无法完全利用机器性能。虽然通过一定方法可以使用操作系统 API 创建可变化数量的线程，但是比较麻烦，不如 OpenMP 方便。

### 2) 方便性问题

在多核编程时，要求计算均摊到各个 CPU 核上去，所有的程序都需要并行化执行，对计算的负载均衡有很高要求。这就要求在同一个函数内或同一个循环中，可能也需要将计算分摊到各个 CPU 核上，需要创建多个线程。操作系统 API 创建线程时，需要线程入口函数，很难满足这个需求，除非将一个函数内的代码手工拆成多个线程入口函数，这将大大增加程序员的工作量。使用 OpenMP 创建线程则不需要入口函数，非常方便，可以将同一函数内的代码分解成多个线程执行，也可以将一个 for 循环分解成多个线程执行。

### 3) 可移植性问题

目前各个主流操作系统的线程 API 互不兼容，缺乏事实上的统一规范，要满足可移植性得自己写一些代码，将各种不同操作系统的 **api** 封装成一套统一的接口。OpenMP 是标准规范，所有支持它的编译器都是执行同一套标准，不存在可移植性问

题。

综上所述，在多核编程中只用 openmp 可以有效提高效率与时间。

下面是一个 openmp 编程的例子，openmp 并行架构相较于其它的并行计算架构来说，用法简单，移植性强。但是并行区间的函数必须要求是线程安全的，因为 openmp 并行架构的内存分布是共享式内存的模式。

代码样例 2-1 嵌套并行操作示例

```
#include <omp.h>
#include <stdio.h>
void report_num_threads(int level)
{
    #pragma omp single
    {
        printf("Level %d:number of threads in the team - %d\n",
            level, omp_get_num_threads());
    }
}

int main()
{
    omp_set_dynamic(0);
    #pragma omp parallel num_threads(2)
    {
        report_num_threads(1);
        #pragma omp parallel num_threads(2)
        {
            report_num_threads(2);
            #pragma omp parallel num_threads(2)
            {
                report_num_threads(3);
            }
        }
    }
    return(0);
}
```

图4-1 一个简单的openmp并行程序的例子

在我们的全对角化程序中也用到了 Openmp 架构。由于我们的程序有一定的特殊性，即将矩阵根据对称性分成了许多小的 Block，而这些小的 Block 可以分别同时对角化，并不影响彼此，所以我们可以用 Openmp 架构来简单的完成这个过程。但使用 Openmp 有一个前提条件即架构所并行的函数必须是线程保护的。

所以在将程序改写为 Arnoldi 算法之后 Openmp 架构就不适用了，因为 Arpack

软件包中的 Arnoldi 算法函数并不是线程安全的，所以我们选择了另一种方法即 MPI 架构来实现这部分程序的并行。

## 4.3 MPI 并行架构

### 1、消息传递的基本概念

MP( message passing )消息传递模型：采用消息传递模型的程序由一组进程构成，每个进程只能访问本地的（自己）的存储器空间，在不同进程之间的通信通过发送和接收消息来完成。根据这个定义，在消息传递模型下，不同进程之间的数据传输由发送进程和接收进程共同完成。

由于支持消息通信对系统的硬件和软件的要求都不高，因此消息传递模型在并行程序设计中被广泛采用。最简单的可以采用消息传递方式编程的并行计算机系统包括多个处理器，每个处理器有自己的存储器，他们用某种形式的互连网络连接在一起。因此，消息传递模型不仅可以用来编写分布内存并行计算机系统的程序，也可以用来编写集群系统上的程序。而在共享存储器系统中，消息传递可以用共享存储器来代替互连网络，因此，消息传递模型具有可以适应多种体系结构的要求。从软件的角度来说，采用消息传递的系统通常以消息传递库的形式出现，库中包含了发送了接收消息所需要的函数。这使得可以以现有的串行程序语言为基础来开发消息传递的程序。一个消息传递的库从严格意义上来说，只需要提供两个函数：一个用来发送消息，一个用来接收消息，但事实上，绝大多数最近出现的消息传递库比如 CMMD, NX, MPL 和 MPI 都提供了额外的函数调用来进行复杂的通信操作，比如在一组处理器中进行集合通信的操作。

### 2、点到点通信

主要的点到点通信操作是 SEND 和 RECEIVE。SEND 把一条消息从一个处理器发送到另外一个，而 RECEIVE 则读取来自其他处理器的消息。在最简单的情况下，对 SEND 和 RECEIVE 的调用不会立即返回，除非实际的操作已经完成（消息发送完毕或者消息接收完毕）。这种形式的操作被称为阻塞 SEND 和 RECEIVE。一个阻塞的 SEND 只有在对应的 RECEIVE 操作已经被调用（不一定结束）并且消息已经被发送的情况下才会顺利返回。同样的，一个阻塞 RECEIVE 只有在对应的 SEND 操作已经调用并且消息已经成功地接收的情况下才会顺利返回（这里暂时不讨论发生异常比如调用出错的情况）。

除了点对点通信，还有集合通信。

### 3、MPI 程序设的小例子

MPI ( Message Passing Interface ) 是一种基于消息传递的并行程序设计标准，它明确定义了一整套用户接口，而对于具体实现，除了给出了建议以外，并没有太多的限制。由于它在标准化方面所进行的努力，它已经成为了消息传递并行程序程序设计的代表和事实上的标准。

在 MPI 架构下写并行程序时，我们希望 MPI 能够达到下面的三个目标：较高的通信性能、较好的程序可移植性、可以满足消息传递程序设计的各种要求。由于 MPI 是一个库而不是一种程序语言，因此对 MPI 的使用必须和特定的程序语言结合起来进行。通常情况下，对一个 MPI 的实现，对 FORTRAN 和 C 语言的支持是基本的要求。

在实际的系统中，MPI 以程序库的形式出现，通过库函数接口给用户提供 MPI 规范定义的功能。这样的库被称为 MPI 实现。下面就是一个简单的 MPI 程序。

一个简单的 C 语言版 MPI 程序

```
// simple.c
#include "mpi.h"
#include <stdio.h>
#include <math.h>
int main( int argc, char **argv)
{int myid, numprocs;
int namelen;
char processor_name[ MPI_MAX_PROCESSOR_NAME ];
// MPI Initialization phase
MPI_Init( & argc, &argv );
MPI_Comm_rank( MPI_COMM_WORLD, &myid );
MPI_Comm_size( MPI_COMM_WORLD, &numprocs );
MPI_Get_processor_name( processor_name, &namelen );
// The working phase
Printf("This is Process %d of %d on %s\n", myid, numprocs, processor_name );
// MPI Finalization phase
```

```
MPI_Finalize;  
}
```

用 mpicc 命令将这个程序编译:

```
mpicc -o simple simple.c
```

然后用 mpirun 来运行这个程序 (假定已经设置好了配置文件, 关于 MPI 环境的配置可以参考第三章 Sun Cluster tools 的安装配置)。

```
mpirun -np 4 simple
```

为这个程序指定四个工作进程, 如果这个程序在一个集群系统的某台计算机 cluster1 上运行, 它的输出结果 (可能) 如下:

```
This is Process 0 of 4 on cluster1  
This is Process 2 of 4 on cluster1  
This is Process 1 of 4 on cluster1  
This is Process 3 of 4 on cluster1
```

如果这个程序在一个集群系统的四台不同计算机 cluster1-cluster4 上运行, 它的输出结果 (可能) 如下:

```
This is Process 0 of 4 on cluster1  
This is Process 2 of 4 on cluster3  
This is Process 1 of 4 on cluster2  
This is Process 3 of 4 on cluster4
```

从上边的例子可以看出, 编写一个 MPI 程序, 在配置好 MPI 的环境之后, 有以下特点:

- 1) 包含 MPI 的头文件声明, 如例子中的 `#include "mpi.h"`
- 2) MPI 相关变量的声明, 如例子中的 `int myid, numprocs;` 等, 声明了程序的 id 和总的进程数
- 3) MPI 初始化过程, MPI 函数调用, 获得程序必须的系统信息, 如例子中的 `MPI_Init(&argc, &argv);`
- 3) 通过 MPI 的通信, 包含在程序体中, 如例子中的 `MPI_Comm_rank( MPI_COMM_WORLD, &myid );` 是用来得到当前进程号的通信接口, MPI 的主要功能即提供进程间通信的接口。
- 5) MPI 结束过程, 释放系统资源。如例子中的 `MPI_Finalize;`

所有 MPI 的名字都有前缀“MPI\_”，不管是常量、变量还是函数调用的名字都是这样。而在用户程序中自己定义的常量、变量、过程和函数调用不要以“MPI\_”开头，以免造成错误。

FORTRAN 形式的 MPI 调用，一般全为大写（虽然 FORTRAN 语法不区分大小写），而 C 形式的 MPI 调用，则为 MPI\_Xxxx\_xxx 的形式（如上边的 MPI\_Comm\_rank()）。

**MPI 返回值:**所有 MPI 的 FORTRAN 子程序在最后的参数中都有一个返回代码，对于成功的函数调用，返回代码包含的值为 MPI\_SUCCESS，对于失败的函数调用，其错误代码依赖于具体的 MPI 实现。一些 MPI 操作是函数，没有这个参数，对 MPI 的 C 语言绑定，这个返回代码由函数的返回值直接给出，而不再作为参数。

#### 4.4 本章小结

本章主要介绍的是程序中的内容，首先是 Arnoldi 算法的基本思想，以及算法的循环流程，之后介绍了两种并行架构 Openmp 和 MPI 这两种架构。两种架构各有其特点以及适用的情况。

下一章将介绍我的一些工作。

## 第 5 章 CDMFT+ED 的实现及结果

如前四章所述当我们学习明白了团簇动力学平均场方法以及精确对角化算法的流程之后。我们开始用程序来实现对具体物理问题的计算以及模拟。首先我们为了得到物理量随温度变化的曲线我们采取了全对角化方法，但是这种方法保留了所有的本征值本征态所以计算效率很低，只能算 8 个格点以下的晶格，一旦格点数超过了 8 个，那么计算所耗费的时间将会变得不可接受。所以我们后来将全对角化方法改进成了 Arnoldi 算法。算法的改进可以大大降低计算效率，因为 Arnoldi 算法并不保留所有的本征值本征态，而是仅保留有限个最小的本征值，本征态。之后为了提高我们的计算效率，我们在程序的精确对角化部分采取了并行的架构。这样就可以进一步减少时间的浪费以及内存的占用。

下面就是我们在改进算法以及编写程序过程中做的一些工作。

### 5.1 Hubbard 模型中的金属绝缘相变

Mott 金属绝缘相变是指，随着电子关联的增加体系从弱相互作用的费米液体转变成成为具有局域磁矩和有限电荷能隙的顺磁绝缘体。理论上，通常用单带 Hubbard 模型作为描述这种转变的最小模型。由于 Mott 金属绝缘转变发生在电子关联大小与能带宽度相当的时候，所以是一个强关联的多体问题，无法用微扰论来处理。近年来随着动力学平均场理论的发展和应用，我们已经可以很好地描述这个问题了。

这一节中，我们用动力学平均场方法结合精确对角化杂质求解器，研究半满 Hubbard 模型顺磁相的 Mott-Hubbard 金属绝缘相变。

下面的几幅图是在半满情况下  $U$  从 1 变化到 10 的过程中格林函数和自能的变化图。由于变化发生在  $U=8$  和  $U=10$  之间，所以我们不一一画出随  $U$  的变化图像。仅仅选择了几个有代表性的  $U$  来表示 Mott 金属绝缘相变的过程。

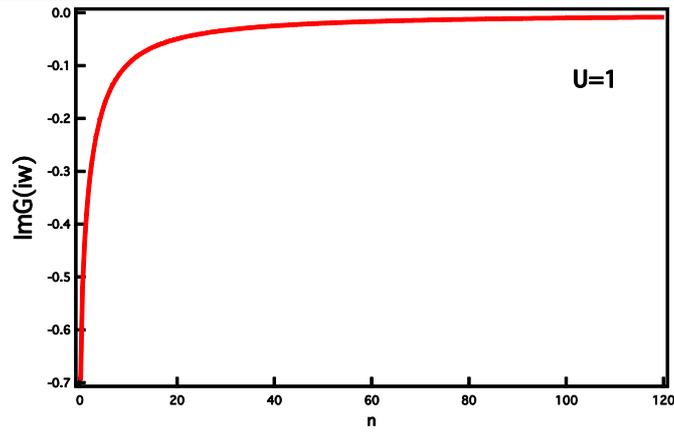


图 5-1 半满 Hubbard 模型  $U=1$  时的格林函数。

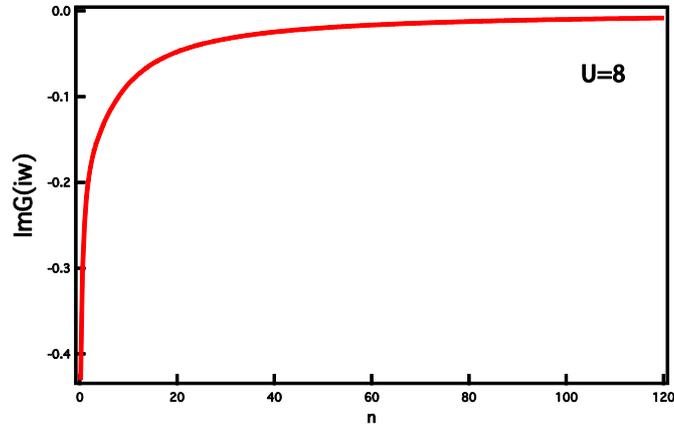


图 5-2 半满 Hubbard 模型  $U=8$  时的格林函数。

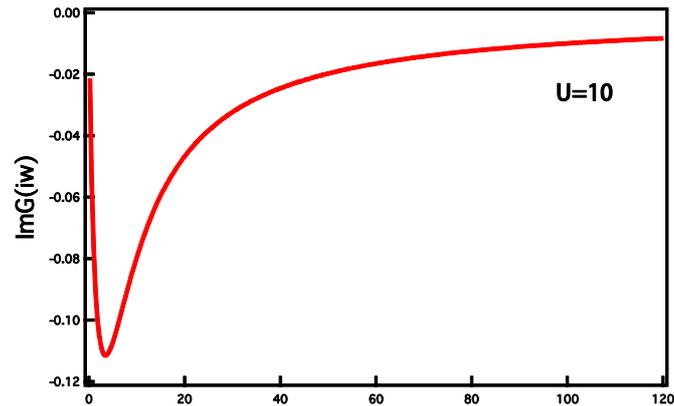


图 5-3 半满 Hubbard 模型  $U=10$  时的格林函数。

上面都是在  $\beta = 100$  也就是近似零温下的结果。从上面的三幅图中我们可以看到图 5-1 和图 5-2，表示的  $U=1$  和  $U=8$  的时候体系处于金属相。图 5-3 表示的  $U=10$  的时候体系处于绝缘相，金属绝缘相变发生在  $U=8$  与  $U=10$  之间。

同样的，我们从自能中也能看出金属绝缘相变发生的位置。

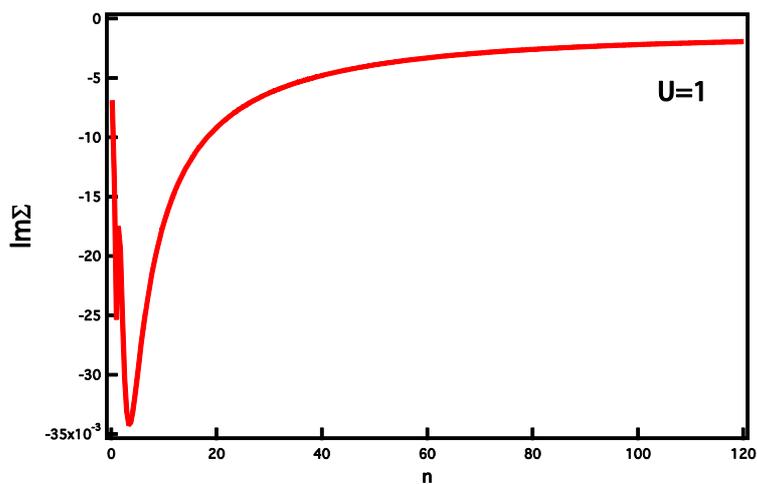


图 5-4 半满 Hubbard 模型  $U=1$  时的自能。

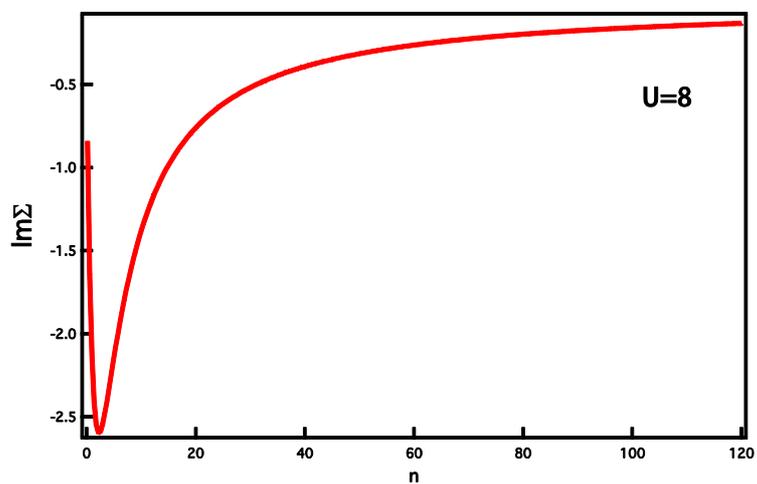


图 5-5 半满 Hubbard 模型  $U=8$  时的自能。

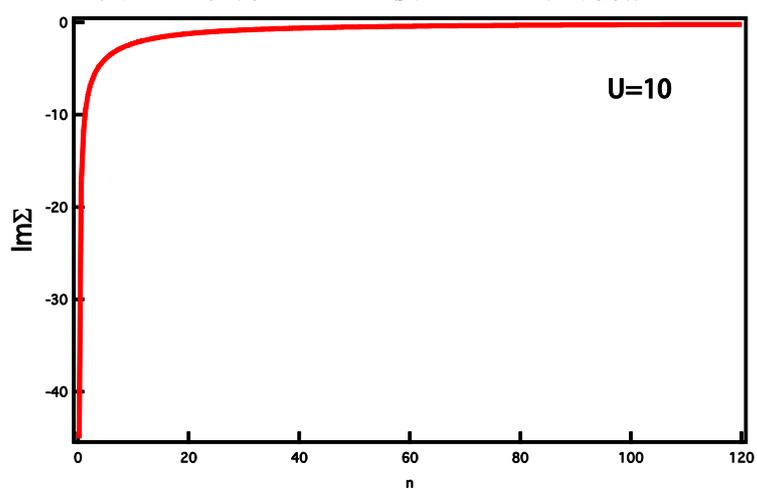
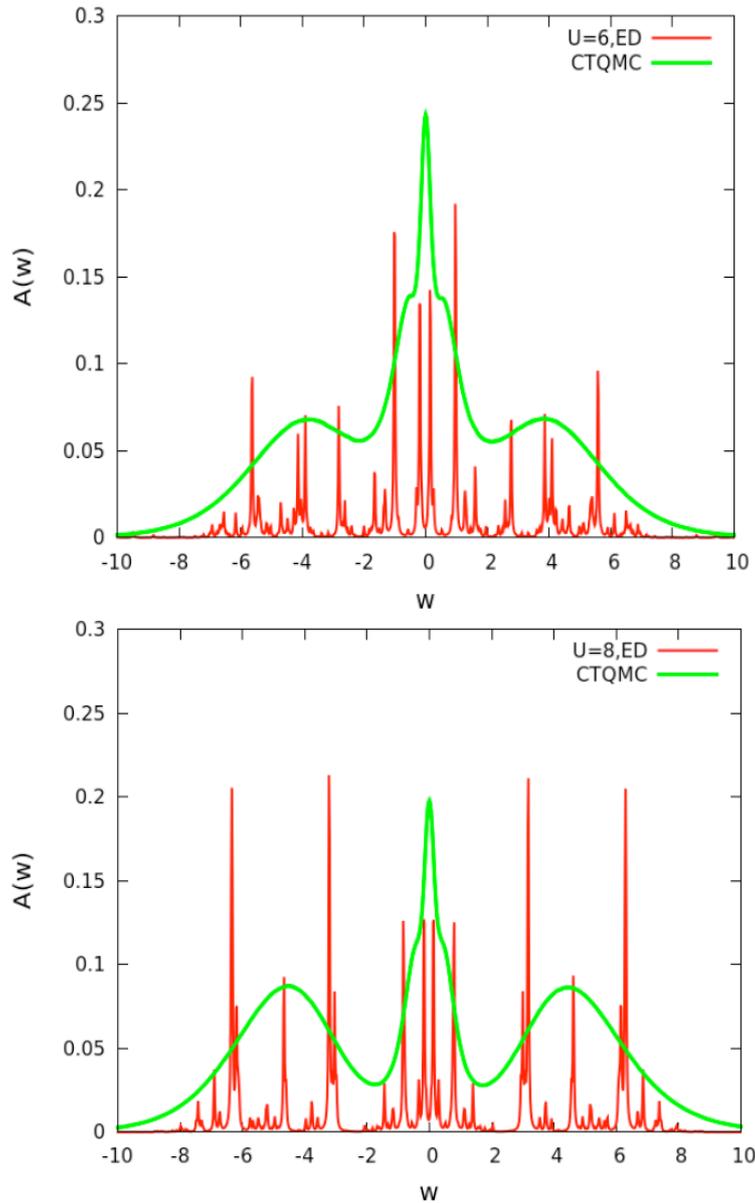


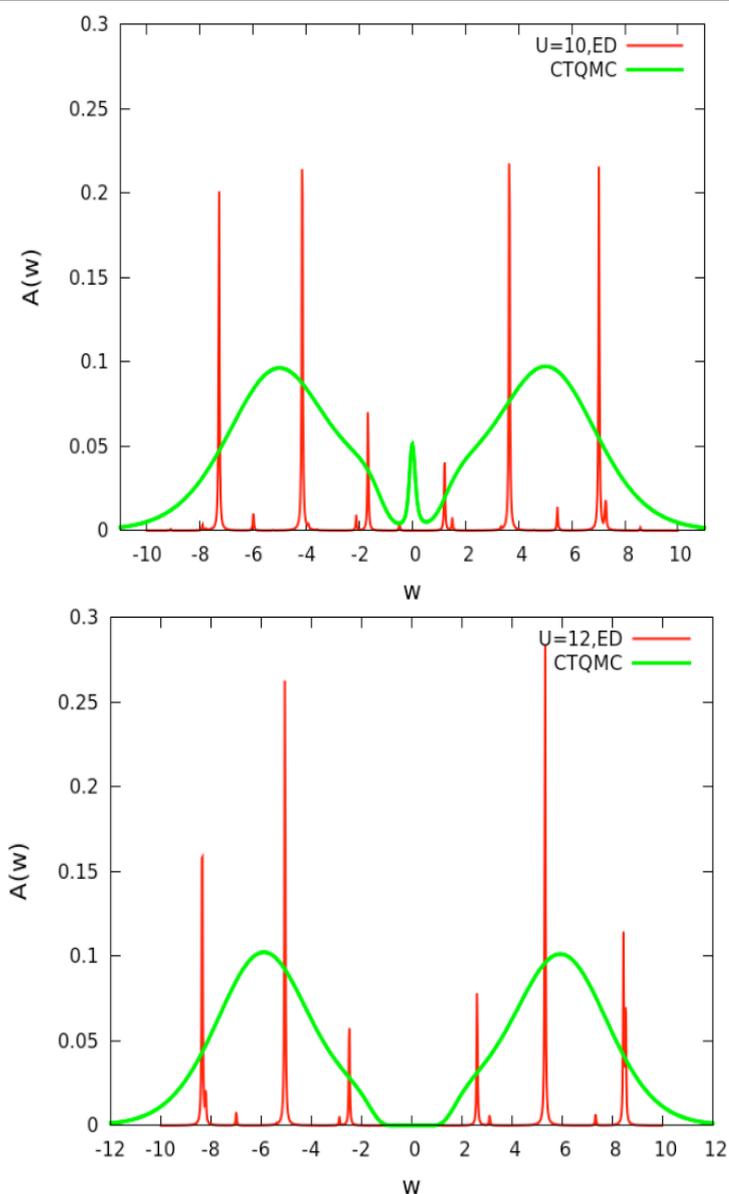
图 5-6 半满 Hubbard 模型  $U=10$  时的自能。

首先我们观察到在  $U=1$  的时候，得到的虚频自能函数并不是十分的光滑，而且

自能与格林函数的图像在形状上是相反的。当自能的曲线呈现一个对号的形状时体系处在一个金属相的情况。我们从图中也能观察出来金属绝缘相变依然发生在  $U=8$  到  $U=10$  之间。与格林函数图像分析的结果一致。

以上的分析还不完全，我们为了观察到最直观最可靠的金属绝缘相变的机制，还是来计算一下谱函数。



图 5-7 谱函数随  $U$  变化示意图

由谱函数可以看出金属绝缘相变发生在  $U=10$  左右。图中红色的线是我们的程序得到的谱函数的图，因为精确对角化本身有这个特性就是画出的谱函数是离散的，所以呈现出这种尖锐的峰状，这种形状对我们观察费米面附近的谱权重产生了很大的困难，所以我们选择了另一种杂质求解器 CTQMC 算出的谱函数做了一个对比。图中绿色的线就是 CTQMC 算出的结果。可看到两种方法算出的结果定性上是有相同的趋势的。这也从另一个侧面说明了我们程序的正确性。

## 5.2 一维两杂质情况的结果对比

本节内容主要是将程序中的单杂质换成包含两个点的团簇之后的一个验证结

果。主要根据文献[40]的结果进行对比验证。

计算的模型是半满的 Hubbard 模型，团簇中杂质的个数为 2 个，当库的个数为 4 个时就可以获得较好的结果了。图 5-8 就是在  $U/t=1$  和  $U/t=7$  条件下的在位格林函数  $G_{11}$  的虚部与近邻格林函数  $G_{12}$  的实部的结果。

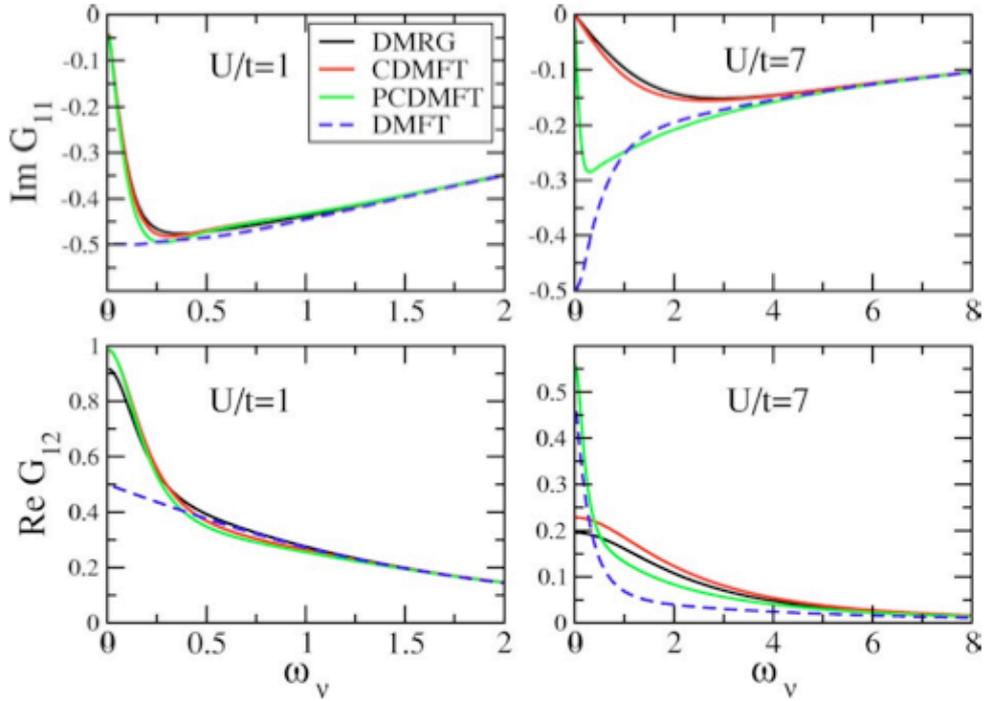


图 5-8 在位格林函数的虚部与近邻格林函数的实部 (应标明文献来源)

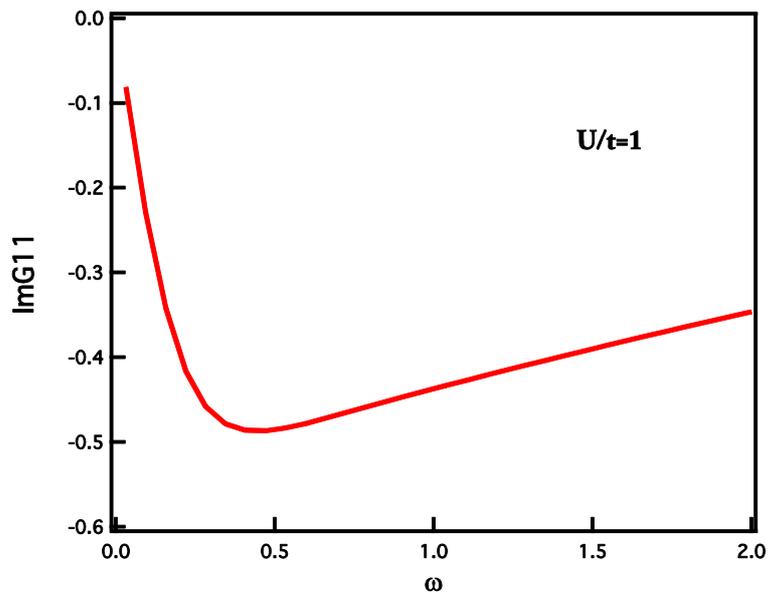


图 5-9

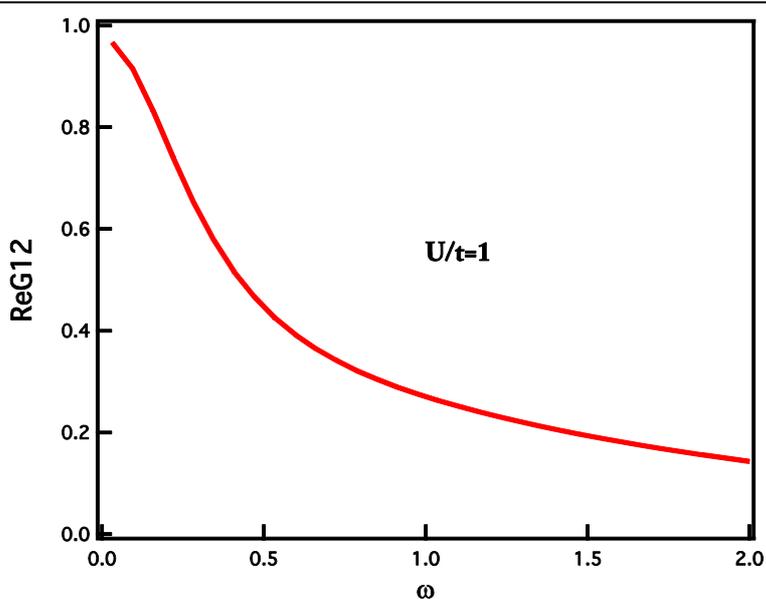


图 5-10

图 5-9 和图 5-10 是  $U/t=1$  时的格林函数实部虚部的曲线，将上面两个图与文献中的图相对比，拟合基本较好。

图 5-11 和图 5-12 是  $U/t=7$  时的格林函数实部和虚部的曲线，若将这两个图和文献对比，拟合结果更好。这里就有了一个问题，就是在相互作用弱的情况下拟合结果没有相互作用强的情况下好。这是因为弱相互作用时库与杂质点之间杂化更强，所以需要更多的库来模拟 Weiss 场对杂志的作用。这也是 ED 中的一个关键问题。

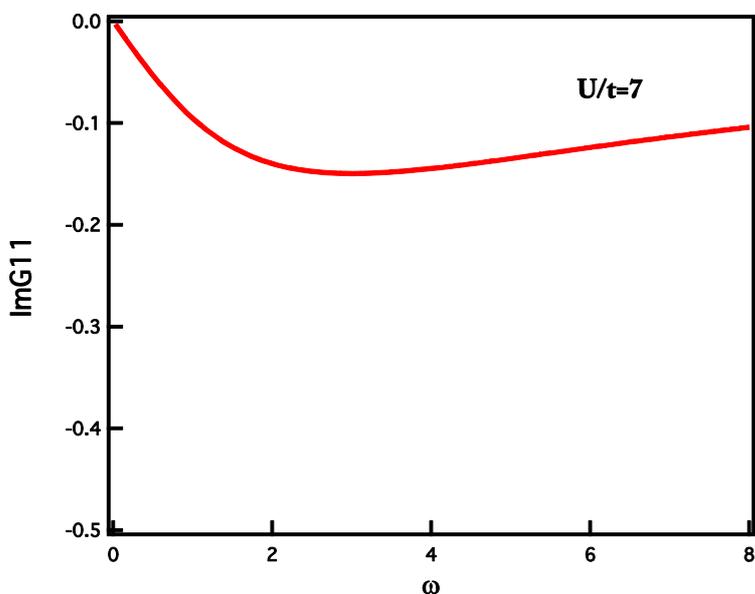


图 5-11

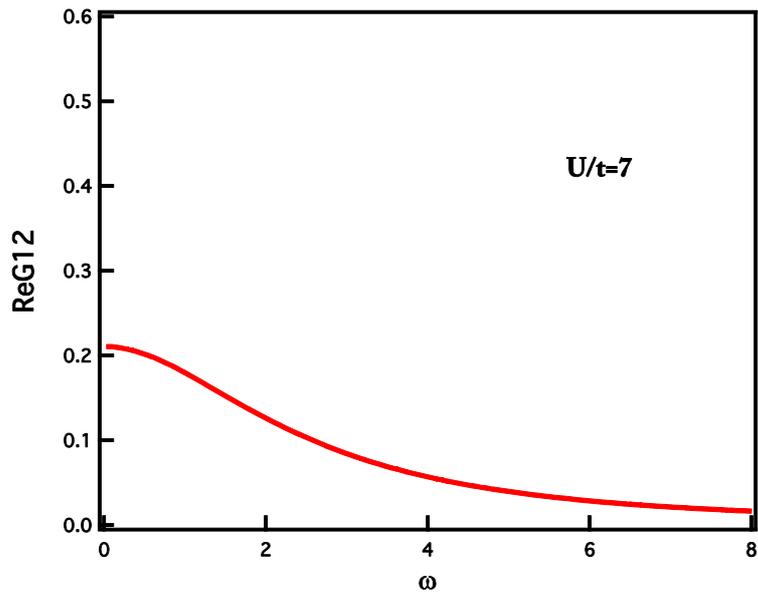


图 5-12

### 5.3 重费米子中反铁磁与超导的竞争机制

这一节中我们开始研究重费米子材料中反铁磁相与超导相的竞争机制问题。这也是我们之前工作的最终目的。

下图是 Nature 456, 366—368(2008)中的一个重费米子材料的温度压力相图。

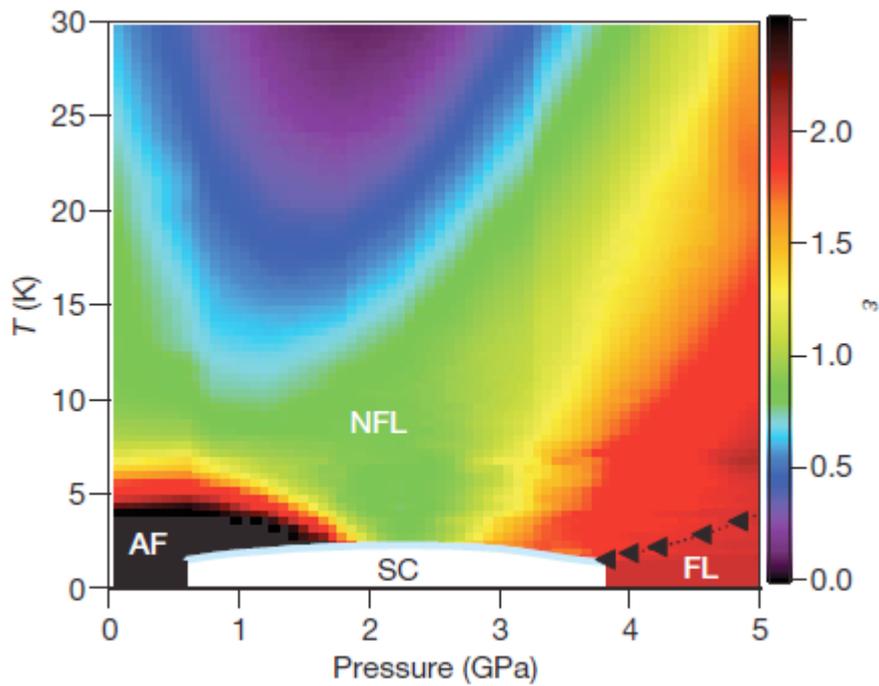


图 5-13 CeRhIn5 的温度压力相图

实验使用的重费米子材料是 CeRhIn5。在低温下随着压力的变化清晰地观察到了相变[41]。压力较低时材料处于反铁磁相，随着压力的增加材料出现一个超导相，最终形成费米液体相。而重费米子材料中的超导也不是一个常规超导机制，不能用 BCS 理论进行解释。所以关于重费米子材料的超导机制的理论研究也是现在比较热门的一个问题。

我们根据现有的条件首先先模拟出 AF 相的一个温度掺杂相变，如图 5-14 所示，所采用的模型是周期性 Anderson 模型。

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} - \mu \sum_i c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + V \sum_i (f_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + H.c) \\
 & + (E_f - \mu) \sum_i f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f
 \end{aligned} \tag{5-1}$$

这个模型是在重费米子问题理论研究中常用的模型。我们研究一个有两个点的团簇杂质问题。

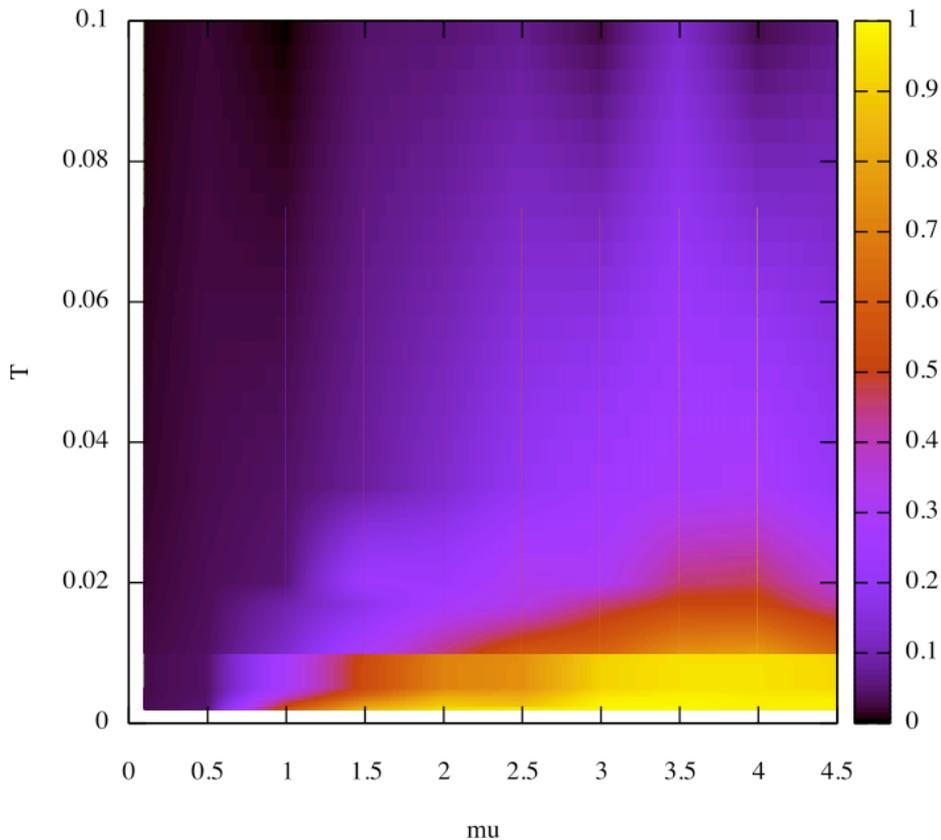


图 5-14 模型的温度压力相图

图 5-14 就是计算结果，其中参数的取值为  $E_f = -5.5$ ， $U = 10$ ， $t = 1$ ， $V = 0.7$ ，

可以看到 AF 相随着掺杂的变化有一个起伏的变化。这和实验中观察到的定性的温和了。从而可以说明我们的程序可以得出有物理意义的计算结果。

但是 SC 相的计算需要更多的库，所以我们之后改进了算法。下面的图 5-15 是改进后的 Arnoldi 算法与之前的全对角化计算结果的一个对比。

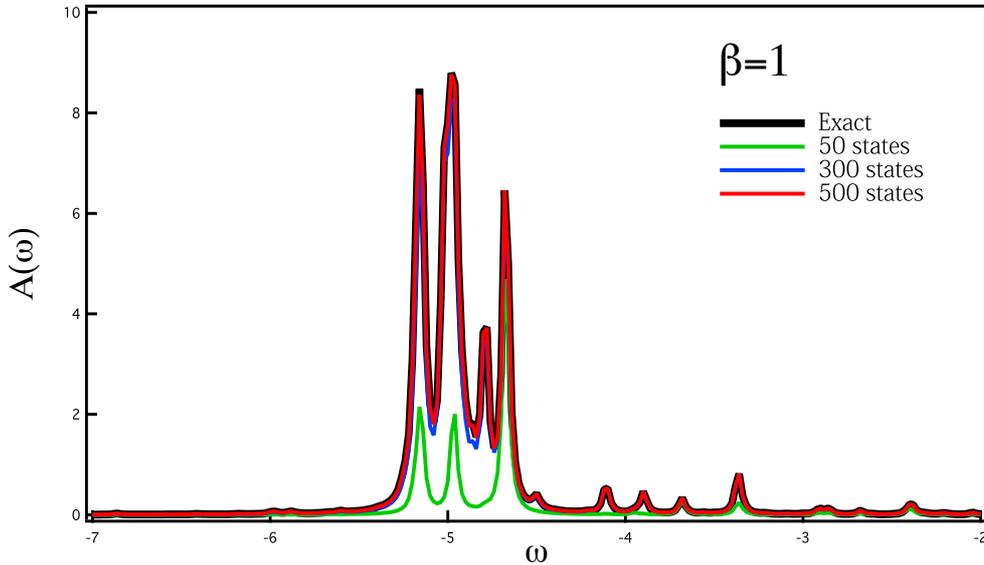


图 5-15 full-ED 与 Arnoldi 算法结果的对比。

从图 5-15 中我们看到，在温度很高的情况下，当 Arnoldi 算法保留 500 个态时就已经能和全对角化得出基本上相同的结果了。而随着温度的降低得到相同结果所需要保留的态也越来越少。

这对我们提高计算效率意义是十分巨大的。

## 5.4 本章小结

本章主要介绍了伴随着程序的编写和改进而做的工作。这些工作都主要是对程序的精确性稳定性进行的测试。

首先我们研究了一个 Mott 金属绝缘相变问题，同时将结果与 CTQMC 的结果进行对比，我们可以看到相变都是发生在  $U=10$  左右，且对格林函数，谱函数，及自能的计算结果是一样的。

之后我们对一个包涵 2 个格点的团簇杂质的模型进行计算并与文献作对比进一步证明了程序的可靠性。



## 结 论

本文第一章做一个背景的简单介绍。在凝聚态物理强关联领域中，有一类材料它们自由运动的导带电子与晶格上的局域  $f$  电子耦合形成有效质量很大的准粒子，这类材料就是重费米子材料。

第二章主要讲了我们要计算这种材料所选用的方法，团簇动力学平均场方法。CDMFT 是动力学平均场方法的一个团簇扩展。动力学平均场方法是一个研究强关联系统的非常有效的工具。并且该方法在无穷维下至精确的。但是，动力学平均场方法方法中却不能包含进去空间涨落，所以它不适合研究低维以及具有阻挫的体系里的量子相变问题。所以，人们发展了团簇动力学平均场方法。我们之后所有的问题都是基于团簇动力学平均场的框架完成的。

第三章介绍了我们选用的杂质求解器。精确对角化杂质求解器。这种杂质求解器的优点，以及与 CDMFT 结合起来的计算流程。

而由于计算所用的程序是本人在硕士期间的主要工作，所以在第四章中简单介绍一下程序的内容，在程序中我们将原来的全对角化方法改进成了 Arnoldi 算法，该算法是讲大矩阵映射到小空间中进行截断，变成一个小矩阵，之后精确对角化这个小矩阵。改进后的程序不论从时间上还是效率上都提高了很多。并且简单介绍一下两种用到的并行架构，可以应用于进一步提高程序的计算效率。

最后，在第五章中展示了一些计算结果。

## 结 论

---

## 参考文献

- [1] W. Metzner, and D. Vollhardt Correlated Lattice Fermions in  $d = \infty$  Dimensions, Phys. Rev. Lett. 62, 324 (1989).
- [2] E. Müller-Hartman The Hubbard model at high dimensions: some exact results and weak coupling theory, Z. Phys. B 76, 211 (1989).
- [3] E. Müller-Hartman Correlated fermions on a lattice in high dimensions, Z. Phys. B 74, 507 (1989).
- [4] P. G. J. van Dongen, and D. Vollhardt, Exact mean-field Hamiltonian for fermionic lattice models in high dimensions, Phys. Rev. Lett. 65, 1663(1990).
- [5] V. Janiš, A new construction of thermodynamic mean-field theories of itinerant fermions: application to the Falicov-Kimball model, Z. Phys. B 83, 227(1991).
- [6] F. J. Ohkawa, Electron correlation in the Hubbard-model in  $d=\infty$  dimension, J. Phys. Soc. Jpn. 60, 3218 (1991).
- [7] A. Georges, and G. Kotliar, Hubbard model in infinite dimensions, Phys. Rev. B 45, 6479 (1992).
- [8] M. H. Hettler, M. Mukherjee, and M. Jarrell, H. R. Krishnamurthy, Dynamical cluster approximation: Nonlocal dynamics of correlated electron systems, Phys. Rev. B 61, 12739 (2000).
- [9] M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke, and H. R. Krishnamurthy, Nonlocal dynamical correlations of strongly interacting electron systems, Phys. Rev. B 58, R7475 (1998).
- [10] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, G. Pálsson, and G. Biroli, Cellular Dynamical Mean Field Approach to Strongly Correlated Systems, Phys. Rev. Lett. 87, 186401 (2001).
- [11] N. H. Tong, Extended variational cluster approximation for correlated systems, Phys. Rev. B 72, 115104 (2005).
- [12] A. Macridin, M. Jarrell, T. Maier, and G. A. Sawatzky, Physics of cuprates with the two-band Hubbard model: The validity of the one-band Hubbard model, Phys. Rev. B 71, 134527 (2005).
- [13] T. A. Maier, G. Alvarez, M. Summers, and T. C. Schulthess, Physics of cuprates with the two-band Hubbard model: The validity of the one-band Hubbard model, Phys. Rev. Lett. 104, 247001 (2010).

- 
- [14] M. Jarrell, and H. R. Krishnamurthy, Systematic and causal corrections to the coherent potential approximation, *Phys. Rev. B* 63, 125102 (2001).
- [15] S. Q. Su, D. E. Sheehy, J. Moreno, and M. Jarrell, Dynamical cluster quantum Monte Carlo study of the single-particle spectra of strongly interacting fermion gases, *Phys. Rev. A* 81, 051604 (2010).
- [16] S. Moukouri, and M. Jarrell, Absence of a Slater Transition in the Two-Dimensional Hubbard Model, *Phys. Rev. Lett.* 87, 167010 (2001).
- [17] C. Huscroft, M. Jarrell, Th. Maier, S. Moukouri, and A. N. Tahvildarzadeh, Pseudogaps in the 2D Hubbard Model, *Phys. Rev. Lett.* 86, 139 (2001).
- [18] T. A. Maier, M. Jarrell, T. C. Schulthess, P. R. C. Kent, and J. B. White, Systematic Study of d-Wave Superconductivity in the 2D Repulsive Hubbard Model, *Phys. Rev. Lett.* 95, 237001 (2005).
- [19] H. Lee, G. Li, and H. Monien, Hubbard model on the triangular lattice using dynamical cluster approximation and dual fermion methods, *Phys. Rev. B* 78, 205117 (2008).
- [20] S. S. Kancharla, and S. Okamoto, Band insulator to Mott insulator transition in a bilayer Hubbard model, *Phys. Rev. B* 75, 193103 (2007).
- [21] C. J. Bolech, S. S. Kancharla, and G. Kotliar, Cellular dynamical meanfield theory for the one-dimensional extended Hubbard model, *Phys. Rev. B* 67, 075110 (2003).
- [22] G. Sordi, K. Haule, and A. M. S. Tremblay, Mott physics and first-order transition between two metals in the normal-state phase diagram of the twodimensional Hubbard model, *Phys. Rev. B* 84, 075161 (2011).
- [23] B. Kyung, Electronic properties of the Hubbard model on a frustrated triangular lattice, *Phys. Rev. B* 75, 033102 (2007).
- [24] K. Haule, Quantum Monte Carlo impurity solver for cluster dynamical mean-field theory and electronic structure calculations with adjustable cluster base, *Phys. Rev. B* 75, 155113 (2007).
- [25] G. Biroli, O. Parcollet, and G. Kotliar, Cluster dynamical mean-field theories: Causality and classical limit, *Phys. Rev. B* 69, 205108 (2004).
- [26] T. Ohashi, T. Momoi, H. Tsunetsugu, and N. Kawakami, Finite Temperature Mott Transition in Hubbard Model on Anisotropic Triangular Lattice, *Phys. Rev. Lett.* 100, 076402 (2008).
- [27] O. Parcollet, G. Biroli, and G. Kotliar, Cluster Dynamical Mean Field Analysis of the Mott

- Transition, Phys. Rev. Lett. 92, 226402 (2004).
- [28] A. Yamada, K. Seki, R. Eder, and Y. Ohta, Mott transition and ferrimagnetism in the Hubbard model on the anisotropic kagome lattice, Phys. Rev. B 83, 195127 (2011).
- [29] H. Park, K. Haule, and G. Kotliar Cluster Dynamical Mean Field Theory of the Mott Transition, Phys. Rev. Lett. 101, 186403 (2008).
- [30] D. Galanakis, T. D. Stanescu, and P. Phillips, Mott transition on a triangular lattice, Phys. Rev. B 79, 115116 (2009).
- [31] G. Biroli, and G. Kotliar, Cluster methods for strongly correlated electron systems, Phys. Rev. B 65, 155112 (2002).
- [32] K. Held, Electronic structure calculations using dynamical mean field theory, Advances in Physics 56, 829 (2007).
- [33] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, C. A. Marianetti, Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory, Rev. Mod. Phys. 78, 865 (2006).
- [34] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Dynamical meanfield theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions, Rev. Mod. Phys. 68, 13 (1996).
- [35] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, M. H. Hettler Quantum cluster theories, Rev. Mod. Phys. 77, 1027 (2005).
- [36] E. Dagotto, Correlated electrons in high-temperature superconductors, Rev. Mod. Phys. 66, 763 (1994).
- [37] A. N. Rubtsov, V. V. Savkin, and A. I. Lichtenstein, Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions, Phys. Rev. B 72, 035122 (2005).
- [38] E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models, Rev. Mod. Phys. 83, 349 (2011).
- [39] John Francis, QR Algorithm for Computing Eigenvalues, The Computer Journal (1961).
- [40] M Capone, M Civelli, SS Kancharla, Cluster-dynamical.mean-field.theory.of.the density-driven Mott transition in the one-dimensional Hubbard model, Phys.Rev.B 69 195105(2004).
- [41] T Park, VA Sidorov, F Ronning, JX Zhu, Isotropic quantum scattering and unconventional superconductivity Nature 456, 366—368(2008)

## 参考文献

---



## 攻读硕士学位期间承担的科研任务与主要成果

参与的科研项目



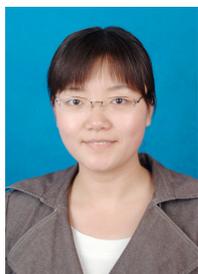
致谢

---

## 致 谢



## 作者简介



姓 名 : 林赫羽  
性 别 : 女  
民 族 : 汉  
政治面貌 : 中共党员  
出生年月 : 1988 年 7 月  
籍 贯 : 黑龙江省大庆市

### 学习经历

2006 年 09 月-----2010 年 06 月燕山大学理学院应用物理专业, 获理学学士学位。

2011 年 09 月-----2014 年 06 月考燕山大学理学院凝聚态物理专业, 攻读理学硕士学位。