

# 湖南大学

## HUNAN UNIVERSITY



# 毕业论文

|      |                          |
|------|--------------------------|
| 论文题目 | 强关联电子体系的连续时间<br>量子蒙特卡洛方法 |
| 学生姓名 | 徐远骥                      |
| 学生学号 | 20091110124              |
| 专业班级 | 应用物理一班                   |
| 学院名称 | 物理与微电子科学学院               |
| 指导老师 | 刘全慧教授 杨义峰研究员             |
| 学院院长 | 曾云 教授                    |

2013 年 5 月 20 日



## 强关联电子体系的连续时间量子蒙特卡洛方法

### 摘 要

强关联电子体系是一种具有丰富物理性质与在实际材料中广泛存在的复杂体系。在本文中，我们采用了近几十年来新发展出来的动力学平均场理论来研究强关联电子材料的新奇物理现象。动力学平均场理论就是将实际的晶格模型映射到量子杂质模型上去，并且这种映射在空间维度无限大的时候是精确的。

有非常多的解析与数值的方法求解量子杂质模型，在本次研究中我们采用计算速度快、适用范围广的强耦合展开连续时间量子蒙特卡洛方法求解了量子杂质模型中 Hubbard 模型的哈密顿量并从中研究 Mott 金属—绝缘相变。我们不仅研究了 Bethe 晶格上的强关联电子性质，还研究了二维平方晶格的强关联电子体系。我们采用高性能计算集群对我们的模型进行模拟并分析其计算结果。此外我们还用最大熵方法将得到的 Hubbard 模型虚时格林函数进行解析延拓，得到谱函数。我们通过对谱函数的观察，得到了选择轨道 Mott 金属—绝缘相变。

**关键词：**强关联电子；动力学平均场；量子杂质模型；金属—绝缘相变



---

## Continuous-time quantum Monte Carlo method for strongly correlated electron materials

### Abstract

Strongly correlated electron systems are one of the complex systems which contain abundant physical properties and widely exist in actual materials. In this dissertation, we use a new method developed in recent decades and named dynamical mean-field theory to study the novel physical phenomena of strongly correlated electron materials. Dynamical mean-field theory is based on a mapping of lattice onto quantum impurity models and this mapping is exact once the configuration is infinitely large.

There are a number of analytical and numerical methods to deal with the quantum impurity models. In this research, we use the hybridization expansion algorithm which has a faster calculation speed and a wide range of applications to solve the Hamiltonian of Hubbard model in order to exhibit the Mott metal-insulator transition. We not only use this algorithm to study the electron properties on Bethe lattice but also on square lattice. We use high-performance computing clusters to get the results from simulations and use the maximum entropy method to get spectral function from the imaginary time Green's function. We obtain the orbital-selective Mott metal to insulator transition through the observation of spectral function.

**Key Words:** strongly correlated electron; dynamical-mean field; quantum impurity model; metal-insulator transition



## 目 录

|                                |    |
|--------------------------------|----|
| 1.绪论 .....                     | 1  |
| 1.1 国内外研究现状 .....              | 1  |
| 1.1.1 动力学平均场理论的发展 .....        | 1  |
| 1.1.2 连续时间量子蒙特卡洛方法的发展 .....    | 3  |
| 1.2 本文的主要结构 .....              | 5  |
| 2.动力学平均场理论基本框架 .....           | 7  |
| 2.1 伊辛模型平均场近似 .....            | 7  |
| 2.1.1 伊辛模型 .....               | 7  |
| 2.1.2 平均场近似 .....              | 8  |
| 2.2 动力学平均场理论 .....             | 9  |
| 2.2.1 空间维度极限情形 .....           | 9  |
| 2.2.2 动力学平均场自治方程 .....         | 9  |
| 2.2.3 动力学平均场自治求解的一般步骤 .....    | 11 |
| 2.3 量子杂质模型哈密顿量 .....           | 12 |
| 2.3.1 量子杂质模型哈密顿量的一般形式 .....    | 12 |
| 2.3.2 几种特殊情况下的量子杂质模型哈密顿量 ..... | 12 |
| 3.连续时间量子蒙特卡洛杂质求解器 .....        | 14 |
| 3.1 蒙特卡洛算法初步 .....             | 14 |
| 3.1.1 什么是蒙特卡洛模拟 .....          | 14 |
| 3.1.2 蒙特卡洛方法的基本概念 .....        | 15 |
| 3.2 图形蒙特卡洛方法 .....             | 17 |
| 3.2.1 图形展开与路径积分抽样 .....        | 17 |
| 3.2.2 图新蒙特卡洛方法基本流程 .....       | 19 |
| 3.3 基于强耦合展开的连续时间蒙特卡洛求解器 .....  | 19 |
| 4.Bethe 晶格的金属—绝缘相变 .....       | 22 |
| 4.1 Bethe 晶格的相关概念 .....        | 22 |



---

|                              |    |
|------------------------------|----|
| 4.2 Mott 金属-绝缘相变 .....       | 23 |
| 4.2.1 金属-绝缘相变的基本概念 .....     | 23 |
| 4.2.2 实际材料中的金属绝缘相变 .....     | 24 |
| 4.3 程序测试 .....               | 25 |
| 5.平方晶格的金属—绝缘相变 .....         | 34 |
| 5.1 平方晶格的构造 .....            | 34 |
| 5.1.1 对布里渊区积分法构建自洽方程 .....   | 34 |
| 5.1.2 程序测试 .....             | 35 |
| 5.2 选择轨道 Mott 金属—绝缘相变 .....  | 38 |
| 5.2.1 两轨道金属—绝缘相变基本哈密顿量 ..... | 38 |
| 5.2.2 程序测试 .....             | 39 |
| 6. 总结与展望 .....               | 43 |
| 致 谢 .....                    | 45 |
| 参考文献 .....                   | 46 |
| 附 录 .....                    | 52 |
| 附录 A 格林函数的解析延拓 .....         | 52 |
| 附录 B 最大熵法求谱函数 .....          | 54 |



## 1. 绪论

本章我们简单的梳理一下动力学平均场理论的发展过程。通过历史的发展我们就可以看出动力学平均场理论相对于原先很多理论在处理问题中所表现出来的优越性。接下来我们还介绍了数值求解强关联电子体系中的连续时间量子蒙特卡洛算法的提出与发展。连续时间量子蒙特卡洛算法是求解量子杂质模型中的一种非常重要和有效的数值计算方法，在科学研究中已经得到了广泛的应用。我们本章内容的结构安排如下：

第 1.1 节我们将向大家着重介绍动力学平均场理论的发展背景以及连续时间量子蒙特卡洛方法发展的过程。

第 1.2 节我们将提及在此次毕业设计中我们所完成的主要工作与目标，并重点给出此本科学位论文的大纲。

### 1.1 国内外研究现状

#### 1.1.1 动力学平均场理论的发展

在凝聚态物理理论中，实验物理学家们在强关联电子材料中发现了很多用先前理论无法解释的有趣的物理现象。正是由于一开始这些现象就无法得到很好的解释，一代代的物理学家们才会一直都在对这些问题进行不断地深入探索。虽然我们在理论上处理这些问题遇到了各种各样的困难，但是由于人们的求知欲与实际上的科研效应，强关联电子体系一直以来都是理论与实验物理学家们非常感兴趣的方向之一。

近些年来，特别是高温超导在实验上的进展、重费米子化合物的发现、以及金属绝缘相变（metal-insulator transition, MIT）的研究都取得了很大的进展<sup>[1]</sup>。人们发现具有 d 电子的过渡元素金属化合物（像 NiO、MnO、CoO 等）很多都是能隙很大的绝缘体，这是传统能带论所无法解释的，必须考虑到电子—电子之间的相互作用。此外像多元复杂氧化物、4f 稀土化合物、5f 锕系化合物的性质的研究也必须考虑电子与电子之间的相互作用才可以得到与实验相符合的结果。

由于在强关联电子体系中，电子—电子之间的相互作用与电子动能的数量级已经可以比拟，有时电子—电子的相互作用能甚至超过了电子的动能。因此在理论上，尽管我们只考虑最为简单的 Hubbard 模型、Kondo 晶格模型作为实际哈密顿量的近似，在理论上处理起来还是极其的困难。早自 20 世纪 60 年代开始，人们就开始对 Mott 金属—绝缘相变的电子气与巡游铁磁质进行研究<sup>[2]</sup>。但是人们一直都因为找不到合适的理论方法



去处理这些问题，我们的理论探索也就受到了阻碍。在这样艰难的情况下，我们在对二维、三维晶格考虑时，既不能从给出的哈密顿量预测某些物理现象是否会真的发生，也不能确定我们是否真的从实际物理现象中俘获到了可靠的哈密顿量的表达形式。

争对这些复杂的强关联电子体系，经过物理学家们不断的努力探索，我们发展出了各种大不相同的解决方法<sup>[3]</sup>。例如对于  $U$  比较小的 Hubbard 模型，我们可以采用以  $U$  作为微扰项的微扰法进行处理。但是遗憾的是，大多数的物理系统并不总存在小的参量，这将导致微扰理论失效。为了使微扰法可以继续适用，我们就需要寻找新的小参量进行微扰展开。例如，在某些情况下，我们采用系统中电子数的倒数  $1/N$ 、晶格格点最近邻的倒数  $1/z$  做展开。此外我们还发展了一系列其它的方法，如双时格林函数法、复合算符法、基于变分原理的 Gutzwiller 方法以及辅助粒子法<sup>[4,5,6]</sup>。虽然我们发展了这么多方法，但是这些方法各自的通用性都不高。

近几十年来，一种新的被称之为动力学平均场理论（dynamical mean-field theory, DMFT）的理论方法被发展出来了。这种方法的精髓就是将我们要求解的晶格模型问题映射为一个嵌入在有效平均媒质中的单点量子杂质问题。这种杂质模型从直觉上给出了量子多体问题的局域动力学的物理图像。同时这种映射的正确性与合理性反映在自洽条件里。自洽条件是我们用来满足从晶格模型变换到杂质模型的物理不变性和一致性的必备条件。Georges、Kotliar 等人将这种条件称之为局域杂质自洽近似（local impurity self-consistent approximation, LISA）<sup>[2]</sup>。动力学平均场理论是类似于经典统计力学的 Weiss 平均场理论对量子多体问题的自然概括。LISA 之所以称之为动力学平均场是因为它忽略了电子的空间涨落，但是却包含了全部的局域量子涨落。因此我们经常说动力学平均场与经典平均场理论的不同就是动力学平均场单点量子问题保留了多体效应。

早在 1987 年，在 Kuramoto 和 Watanabe 的工作中，LISA 自洽方程首次出现在他们指定的空间维度足够大的周期性安德森模型中<sup>[7]</sup>。1989 年，Metzner 和 Vollhardt 他们也证明，在空间维度趋于无穷的时候，微扰理论就具有局域特性。同样在此期间，Muller-Hartmann 证明了多体格林函数微扰论的局域性，并将其用于推导自洽方程。在他们工作的基础上，Brandt 和 Mielsch 推导了 Falicov-Kimball 模型的自洽方程，并同时指出如何将它用于 Hubbard 模型。最重要的进展还是 Ohwawa、Georges 和 Kotliar 的工作，他们将量子模型的 Weiss 平均场理论与经典的平均场理论严格的对应起来了，这就也是我们后来一直用的 LISA 方法的主要内容<sup>[8-14]</sup>。





动力学平均场具有原来众多方法所不具有的优越性。从动力学平均场发展的早期阶段开始,此方法就经常用于 Mott 转变的相关研究。例如 Rozenberg, Zhang 和 Kotliar (1992); Georges 和 Krauth (1993) 等人都将此方法用于半满 Hubbard 模型的 Mott 转变。从现在的研究成果来看,动力学平均场方法的广泛性、适用性与先进性都已经十分清楚的显现出来了。

### 1.1.2 连续时间量子蒙特卡洛方法的发展

前面已经指出,对晶格模型的研究我们可以采用动力学平均场理论方法将晶格模型通过自洽的方式映射到量子杂质模型上去。计算机的普及和计算能力大幅度的提升,都促使着数值计算方法的不断发展。1986 年, Hirsch 和 Fye 提出了量子蒙特卡洛方法。1992 年 Jarrell, Rozenberg, Zhang 和 Kotliar 等人分别独立的将此方法用于了动力学平均场领域的有关计算当中。1994 年, Caffarel 和 Krauth 等人提出了精确对角化的数值计算方法。Sakai、Kuramoto 和 Shimizu 等人将数值重整化群的方法用于空间无穷维的 Hubbard 模型。下面我们就简单的回顾一下上面提到的过程<sup>[15-22]</sup>。

这些数值工作的开始要从 1975 年 Wilson 和后来的 White 在 1992 年间的工作说起。在处理多体问题中,他们明智的将希尔伯特空间进行截断。Wilson 的数值重整化群 (numerical renormalization group, NRG) 方法是基于将能量谱对数离散化的思想并将其用于对角项的迭代中。这在统计物理里正是临界现象中的标度率与普适性的理论应用。我们知道,在临界点附近关联长度是发散的。此时当我们对系统做尺度变换时,临界现象将不会发生改变<sup>[23]</sup>。在这种尺度变换不变的情况下,我们就可以不沿着传统的从统计系综的老路出发计算配分函数,而是找出重整化群变化确定其不动点,计算临界指数。White 提出的密度矩阵重整化群 (density matrix renormalization group, DMRG) 可以计算系统的基态能量。这些重整化方法的最大优点就是可以获得低能级或者基态的实频和实时间有关的信息。但是一旦要计算更宽范围的相关物理性质时,这些方法就不能适用。密度矩阵重整化群在计算一维体系基态性质上非常有效,但是推广到高维情形时,其动力学是很困难的。因此假如我们要精确计算单带 Anderson 模型的低能行为时,重整化的方法就被证实是非常关键和有效的。但是在 DMFT 的框架下,这两种方法并没有普遍和广泛的应用。

在动力学平均场理论发展的早期, Caffarel 和 Krauth 等人在 1994 年的工作中就发展了一种后来被广泛应用的称为精确对角化 (exact diagonalization, ED) 的数值计算方法。





他们变化地选取小数量的本征态和杂化函数来估计杂化项库的连续能量值。在这种思路下，系统的哈密顿量将变为有限系统的哈密顿量，此时就可以被精确的进行对角化，获得的杂质格林函数就可以被  $\delta$  函数谱描述。但是希尔伯特空间的指数型增长指出，精确对角化除了非常小尺寸的系统外根本不适用。此外在精确对角化方法中，杂质模型的连续能量被一系列分立的能级所取代，在对称性上就会受分立能级的误差的限制。在多轨道的情况下，希尔伯特空间也会急剧增加，这些都大大的限制了 ED 方法的发展。

正如文章前面所说的那样，在过去的几十年中，一种被认为有前景的“动力学平均场”方法被发展起来了。正如 Georges, Kotliar 和其他科研工作者所展示的那样，如果自能不依赖与动量，即  $\Sigma(p, \omega) \rightarrow \Sigma(\omega)$ ，那么解决晶格模型就可以从量子杂质模型的自洽条件中获得。量子蒙特卡洛技术就提供了一种广泛适用的方法来解决量子杂质模型的求解问题。连续时间量子蒙特卡洛的先驱要属 1986 年 Hirsch 和 Fye 提出的 Hirsch-Fye 量子蒙特卡洛方法<sup>[24-26]</sup>。在早期我们求解量子杂质模型我们最常用的方法就是这种 Hirsch-Fye 算法——一种离散的 Hubbard-Stratonovich 变换用于相互作用部分的解耦合算法。这样做我们就可以很关键地给出了附加场位形的权重，同时这种位形是可以被蒙特卡洛过程进行抽样的。在这种方法中，我们需要对虚时  $(0, \beta)$  进行  $N$  个等分的分立，这就等价于建立一个  $N \times N$  阶的矩阵。在低温和强关联情况下，格林函数有高度的时间不均匀性，在边缘点  $0$  和  $\beta$  附近斜率非常大，在中间部分则变化得非常慢。这种边缘陡峭的下降就意味着需要有非常大的  $N$  (约  $5U\beta$ )，这就限制了此算法在物理量温度依赖关系情形上的适用性<sup>[27]</sup>。而且，最为难办的是我们通常缺少一种可以对具有多轨道一般相互作用哈密顿量的有效的解耦合方法。

连续时间蒙特卡洛方法就是采用了对图形展开项的取样，从而避免了对时间的分立化。其中第一个重要的工作就是由 Handscomb 在 1964 年提出的 Handscomb 方法。这种算法以及后面的 1991 年由 Sandvik 和 Kurkijarvi 提出的随机级数展开方法都是将配分函数的指数  $\beta H$  进行泰勒展开。当我们将这种方法用于玻色系统时，我们需要对希尔伯特空间进行截断才能保证哈密顿量的有界。当我们将这种方法用于费米子系统时，将会产生非常严重的负符号问题。

现在我们所用的连续时间蒙特卡洛方法起源于 Prokof'ev、Beard 和 Wiese 等人在 1996 年的工作。在玻色子场论的背景下此方法被正式定义为配分函数的微扰展开。这些展开式中每一项都可以确切的被蒙特卡洛程序抽样。在之前 Rubtsov 和他合作者的重要



工作中，他们完成了对相互作用项的随机求值。在玻色系统中连续时间蒙特卡洛算法的巨大成功使我们迫切的想把此方法推广到费米子系统当中。1999 年，Rombouts 等人发现，在我们进行推广的过程中，依然存在着非常严重的负符号问题。如果我们将不同的符号类别抽样进行分类并解析的写成行列式的形式，此问题就应该可以得到改善。但是遗憾的是在 Rombouts 和他的合作者的努力中，他们的这种晶格的算法只能仅仅适用于具有密度—密度相互作用的形式。

随着动力学平均场量子杂质模型的引入，我们发现在量子杂质模型中，负符号问题要比原来的晶格模型的负符号问题要好的多。甚至在某些情况下，根本就不存在负符号问题，这就又引起了一大批数值计算物理学家们极大的兴趣。很快就由 Rubtsov 和 Lichtenstein 等人在 2005 年提出弱耦合展开的形式。在 2006 年又由 Werner 等人提出了弱耦合展开形式的补充形式，基于杂化项的强耦合展开形式。最近 2008 年又由 Gull 等人提出了辅助场的形式。很快，这些方法就被用于 Kondo 模型、多轨道问题、以及考虑空间关联效应的团簇动力学平均场领域。也使动力学平均场理论结合局域密度近似理论成为可能 (local density approximation combined with dynamical mean field, LDA+DMFT)。以上所说到方法的具体细节，我们可以参阅参考文献[15, 28-46]。

在本学位论文中，我们采用强耦合展开的连续时间蒙特卡洛方法进行相关物理问题的计算处理。我们发现随着相互作用  $U$  的不断增大，微扰展开项的阶数是不断减小的。正是由于强耦合展开方法具有这样的特点，这就使得这种方法在当今热点领域，如具有强相互作用特征的系统（高温超导铜氧化物等）变得特别的有效。此外，我们的方法在足够低的温度下，依然允许我们获得体系的基态性质和体系的温度依赖性，这些新的信息是其他方法所无法获得的。

## 1.2 本文的主要结构

在做毕业设计期间，本人主要进行了动力学平均场理论的学习与强耦合展开连续时间蒙特卡洛求解器 (continuous-time hybridization expansion algorithm, CT-HYB) 的认识与使用。我们将动力学平均场这样完整的一套理论方法用于单带与多带 Hubbard 模型的研究中，并在 DMFT 循环迭代部分并完成了 Bethe 晶格与二维平方晶格的构建。最后我们将此程序在高性能计算机集群上运行，完成了相关物理量的测量，并在这个过程中深化与强关联电子体系数值计算相关的物理概念。我们还将计算得到的结果进行深入的分析处理，同时实现了用最大熵方法从虚时格林函数解析延拓获得其谱函数。并在此基础



上讨论了强关联电子领域非常热门的 Mott 金属—绝缘相变与选择轨道 Mott 转变的物理过程。

我这次毕业论文正文的主要部分安排如下：

第 2 章我们着重介绍了动力学平均场理论的框架与相关物理公式的推导。说明了我们是怎样将一个实际的物理系统用量子杂质模型表示出来的，并将要说明了动力学平均场理论的计算流程。

第 3 章介绍一般蒙特卡罗的过程与强耦合连续时间量子蒙特卡罗方法的基本概念与核心思想，完成相关公式的简单理论推导。

第 4 章介绍对于我们构造的 Bethe 晶格，我们用强耦合展开量子蒙特卡罗的方法完成对单带 Hubbard 模型的谱函数、格林函数、自能函数的数值计算，分析其中的物理，观察单轨道的金属—绝缘相变。

第 5 章我们进一步对多轨道 Hubbard 模型进行研究，通过对布里渊区的积分来构造平方晶格，并着重分析了选择轨道金属—绝缘相变的过程。

第 6 章是我们对全文的总结，归纳出我在此次毕业设计中所学习的主要知识与取得的研究进展，并对未来的研究目标进行一个展望。



## 2. 动力学平均场理论基本框架

在这一章中，我们将具体介绍动力学平均场的相关理论知识，从而使我们对量子杂质模型有一个初步的了解。本章的内容安排如下：

第 2.1 节将从经典的统计力学的伊辛模型开始，介绍经典情况下的平均场近似，以及此近似下的伊辛模型自洽方程。

第 2.2 节介绍动力学平均场理论下的自洽方程，给出一般情况下求解动力学平均场的一般步骤。

第 2.3 节将介绍几种量子杂质模型的哈密顿量，为下一章连续时间量子蒙特卡洛算法的介绍奠定基础。

### 2.1 伊辛模型平均场近似

#### 2.1.1 伊辛模型

在描述磁性系统相变的过程中，有一种最为简单的模型，我们称之为伊辛模型。例如二维的伊辛模型如图 2.1 所示，在每个晶格的格点之上都有一个自旋为  $s$  的电子，它们自旋的取值即可以向上也可以向下。对于共有  $N$  个格点的晶格系统，若我们只考虑最近邻的相互作用，我们可以写出这个系统的哈密顿量为：

$$H_{am} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \mu H \sum_{i=1}^N s_i \quad (2.1)$$

其中  $J$  为耦合系数， $s$  为电子的自旋，可以取  $\pm 1$ （分别代表自旋向上和自旋向下两个状态），其中  $\langle i,j \rangle$

代表只对最近邻格点进行求和， $\mu$  为与自旋有关的磁矩， $H$  为磁场强度矢量。在这里  $s$  只代表磁场的大小，而不是量子力学里的算符。所以伊辛模型在这种情况下实际上是一个准经典的模型。我们现在只讨论  $J>0$  的铁磁系统，我们可以写出正则系综的配分函数如下：

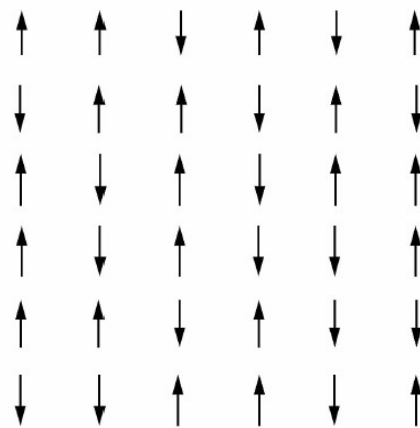


图 2.1 伊辛模型示意图<sup>①</sup>

<sup>①</sup>此图来自参考文献【23】，pp:465.



$$Z_N = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} e^{-H_{am}/kT} = \sum_{\{s_i\}} e^{-H_{am}/kT} \quad (2.2)$$

其中 $\{s_i\}$ 代表对  $N$  个自旋组合的求和。这样我们就可以求出其它的热力学量，如：

$$F = -kT \ln Z_N \quad (2.3)$$

$$\bar{E} = -T^2 \left( \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{F}{T} \right) \right) \quad (2.4)$$

$$\bar{M} = \overline{\mu \sum_i s_i} = N \mu \bar{s} = - \left( \frac{\partial F}{\partial H} \right) \quad (2.5)$$

### 2.1.2 平均场近似

在 2.1.1 节中，我们已经向大家介绍了伊辛模型晶格模型。但是由于电子—电子之间的耦合作用，要求解这个简单的模型也是十分困难的。除了一维模型可以严格求解外（1944 年昂萨格从平滑的哈密顿量出发对二维伊辛模型进行严格求解）至今人们也不能对三维的情况严格求解。在这样的情况下，经常我们可以采取某些近似。我们可以将(2.1)式所示的哈密顿量写成如下的形式：

$$H_{am} = - \sum_i \mu s_i \left( H + \frac{J}{\mu} \sum_j' s_j \right) = - \sum_i \mu s_i H_{eff} \quad (2.6)$$

其中  $H_{eff} = H + h_i$ ， $h_i = \frac{J}{\mu} \sum_j' s_j$ ，其中  $\sum_j' s_j$  代表对  $i$  的近邻求和。在这里，我们可以看出， $h_i$  与  $i$  点附近的电子自旋有关，因此是有涨落效应的。如果我们做这样的平均场近似， $s_j \rightarrow \bar{s}_j$ ，也就是说将格点  $i$  附近的近邻都用一个固定的平均值来代替。这样，

我们就可以写出： $h_i = \frac{J}{\mu} \sum_j' \bar{s}_j$ 。我们忽略空间涨落，进一步得到：

$$\bar{s}_j = \bar{s}, \quad \bar{h}_i = \bar{h} = \frac{zJ}{\mu} \bar{s} \quad (2.7)$$

其中  $z$  代表格点的配位数。最终，我们就得到了平均场下的哈密顿量的新形式：

$$H_{am} = - \sum_{i=1}^N \mu (H + \bar{h}) s_i \quad (2.8)$$

通过平均场近似的方法，我们就将  $N$  个自旋耦合的系统近似成了独立的  $N$  个电子自旋之和的形式。由于(2.7)式中也包含平均自旋，而平均自旋又是我们要求的，这样就



构成了一个自洽求解的方程。我们参阅相关的统计物理学的书籍（见参考文献[23]），可以知道确定  $\bar{s}$  的自洽方程为：

$$\bar{s} = \tanh\left(\frac{\mu H}{kT} + \frac{zJ}{kT}\bar{s}\right) \quad (2.9)$$

## 2.2 动力学平均场理论

### 2.2.1 空间维度极限情形

从人们对上面的伊辛模型的研究来看，对于一维伊辛模型来说，平均场给出的结果是错误的。对于二维晶格的伊辛模型来说，我们用平均场理论得到的结果还是可靠的。那么维度与动力学平均场理论到底又是否有这样的关系呢？

正如经典统计力学，在空间维度趋于无穷大的时候，动力学平均场将会变得十分的精确。正如上节推导伊辛模型那样，(2.7) 式的获得就是忽略了空间涨落。当空间维度趋于无穷大时，空间涨落正好可以忽略，这就为我们求解问题带来了很大方便。空间维度的增加实际上也就是近邻个数的增加。动力学平均场理论的正确性就可以由近邻数  $z$  来决定。对于一些三维的实际晶格模型，近邻的个数就已经很大了。比如说立方三维晶格的近邻数就已经达到了 6，面心立方晶格的近邻数就达到了 12。所以说，在实际求解晶格问题中，动力学平均场方法是一种非常有保证的方法。

### 2.2.2 动力学平均场自洽方程

正如绪论中所说的那样，动力学平均场方法的本质就是将具有很大自由度的实际晶格模型映射为一个自由度相对较小的单点有效系统<sup>[47,48]</sup>。从物理思想上最根本的说来就是将动力学体现在杂质点与其他自由度构成的库之间的相互作用上，其示意图如图 2.2 所示。

通过这样的映射，我们只要找到一组自洽方程组，使得我们在单点参考系统中测得的物理量和实际晶格中的一致即可。下面我们就给出量子杂质模型的自洽方程组，处理的方式类似上面我们对伊辛模型的处理。

我们考虑这样的 Hubbard 模型的哈密顿量：

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.10)$$

其中  $t$  为代表跃迁(hopping)系数, 在这里我们的跃迁仅仅局限于近邻格点上的跃迁。 $c_{i\sigma}^\dagger$



代表电子在格点  $i$  上的产生算符,  $c_{j\sigma}$  则表示电子在格点  $j$  上的湮灭算符。也就是说上式第一项表示电子在格点之间的跃迁过程,  $n_{i\uparrow}$ 、 $n_{i\downarrow}$  是粒子占据数算符。其中  $n_{i\uparrow} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ 。如果我们用平均场的思想来描述实际哈密顿量所对应的量子杂质模型的话, 对于这样的一个单点杂质参考系统, 我们一般用虚时形式的有效作用量来进行描述:

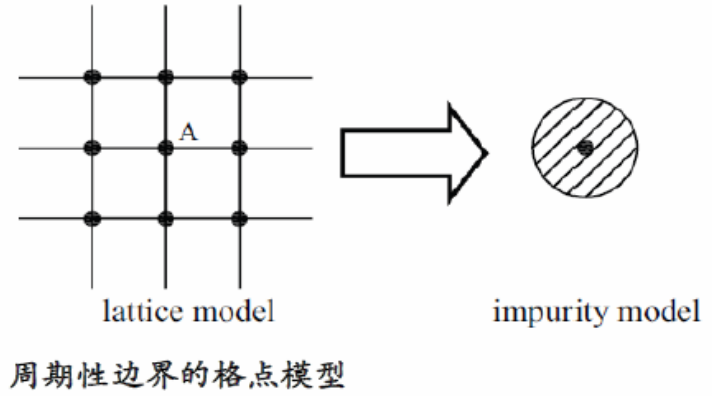


图2.2 量子杂质模型

$$S_{eff} = -\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{o\sigma}^\dagger(\tau) g_0^{-1}(\tau - \tau') c_{o\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{o\uparrow}(\tau) n_{o\downarrow}(\tau) \quad (2.11)$$

其中  $g_0(\tau - \tau')$  就扮演着经典统计物理里有效 Weiss 场的身份,  $g_0$  在这里就表示库的格林函数。它与经典情形不同的是, 这里的“Weiss 函数”是一个有关时间的函数而不是一个定值。它表示在  $\tau$  时刻有一个电子从库中进入到了杂质点, 在  $\tau'$  时刻又从杂质点回到了库中。这是一个动态的过程, 虽然在这样的情形下我们忽略了空间的涨落, 但是我们还是包括了所有与时间有关的涨落, 这也就是为什么叫动力学平均场的原因所在。

为了得到闭合的动力学平均场自治方程, 我们就需要将 (2.11) 式中的  $g_0$  用有效作用量  $S_{eff}$  本身的形式表示出来:

$$g_0(iw_n)^{-1} = iw_n + \mu + G(iw_n)^{-1} - R[G(iw_n)] \quad (2.12)$$

其中  $G(iw_n)$  代表单点杂质上的格林函数, 它可以从有效相互作用量  $S_{eff}$  得到:

$$G(\tau - \tau') = -\langle T c(\tau) c^\dagger(\tau') \rangle_{S_{eff}} \quad (2.13)$$

$$G(iw_n) = \int_0^\beta d\tau G(\tau) e^{iw_n \tau}, w_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (2.14)$$

其中  $R(G)$  是晶格态密度的希尔伯特变换的倒数函数。对于无相互作用的态密度而言, 有:

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \quad , \quad \varepsilon(k) = \sum_{ij} t_{ij} e^{ik \cdot (R_i - R_j)} \quad (2.15)$$

希尔伯特变换与它的倒数函数为:





$$\tilde{D}(\zeta) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\zeta - \varepsilon}, \quad R[\tilde{D}(\zeta)] = \zeta \quad (2.16)$$

从这里我们就可以看出，由有效相互作用量  $S_{eff}$ ，我们可以得到  $g_0$ ，由  $g_0$  我们可以得到杂质格林函数  $G$ ，因此 (2.11)、(2.12) 和 (2.13) 就构成了一个闭合的方程组。

将 (2.13) 式写成傅里叶变换的形式，我们可以得到：

$$G(k, iw_n) = \frac{1}{iw_n + \mu - \varepsilon_k - \Sigma(iw_n)} \quad (2.17)$$

其中  $\Sigma(iw_n)$  为自能函数，我们可以这么计算自能，

$$\Sigma(iw_n) = g_0^{-1}(iw_n) - G^{-1}(iw_n) \quad (2.18)$$

这样 (2.17) 式和 (2.18) 式就可以代替 (2.12) 式。这样我们就得到了量子杂质模型的自洽方程组，我们将其统一写在这里：

$$\begin{cases} S_{eff} = -\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\sigma} c_{0\sigma}^{\dagger}(\tau) g_0^{-1}(\tau - \tau') c_{0\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{o\uparrow}(\tau) n_{o\downarrow}(\tau) \\ G(\tau - \tau') = -\langle T c(\tau) c^{\dagger}(\tau') \rangle_{S_{eff}} \\ G(k, iw_n) = \frac{1}{iw_n + \mu - \varepsilon_k - \Sigma(iw_n)} \\ \Sigma(iw_n) = g_0^{-1}(iw_n) - G^{-1}(iw_n) \end{cases}$$

### 2.2.3 动力学平均场自洽求解的一般步骤

在这次的毕业设计中，我使用的连续时间量子蒙特卡洛程序是中国科学院物理研究所黄理博士自主研发的基于强耦合展开的 HYB-QMC 算法<sup>[49]</sup>。结合他的程序与内置 DMFT 循环，我们给出它的动力学平均场自洽求解的一般步骤：

- (1) 开始我们给出一个初始的 Weiss 函数  $g_0(iw_n)$  与初始自能  $\Sigma(iw_n)$ ；
- (2) 根据 (2.11) 式， $g_0(iw_n)$  就定义了一个量子杂质模型，我们通过调用量子杂质模型求解器进行求解，就可以得到局域的杂质格林函数  $G(iw_n)$ 。
- (3) 根据 (2.18) 式，我们由初始  $g_0(iw_n)$  与量子杂质求解器求解的  $G(iw_n)$  就可以算出新的杂质的自能  $\Sigma(iw_n)$ 。
- (4) 根据 (2.17) 式，我们可以由新的自能函数  $\Sigma(iw_n)$  算出新的杂质格林函数  $G(iw_n)$ 。



(5) 再次利用 (2.18) 式, 我们就可以得出新的 Weiss 函数  $g_0(iw_n)$ , 混合新旧的 Weiss 函数, 看是否收敛, 如果不收敛, 返回 (2) 继续循环执行下去。

## 2.3 量子杂质模型哈密顿量

### 2.3.1 量子杂质模型哈密顿量的一般形式

量子杂质模型的哈密顿量一般来说由三个基本的项构成, 所以我们就将总的哈密顿量写成如下的形式:

$$H_{QI} = H_{loc} + H_{bath} + H_{hyb} \quad (2.19)$$

其中  $H_{loc}$  代表具有有限自由度的杂质点的哈密顿量, 一般来说杂质点的自由度是很小的;  $H_{bath}$  表示与杂质点相耦合的自由度为无限大的库的哈密顿量;  $H_{hyb}$  则表示杂质点与库之间相互耦合的部分。

进一步我们可以将局域的哈密顿量  $H_{loc}$  写成两个部分的和, 如下所示:

$$H_{loc} = H_{loc}^0 + H_{loc}^I \quad (2.20)$$

其中,  $H_{loc}^0 = \sum_{ab} E^{ab} d_a^\dagger d_b$  为与裸的能级结构有关的部分,  $H_{loc}^I = \sum_{ijkl} I^{ijkl} d_i^\dagger d_j^\dagger d_k d_l + \dots$  为电子-电子相互作用的部分 (此式中写出的部分为 4 个费米算符之间的作用量, 省略号表示还有 6 个、8 个等等费米算符之间的相互作用情况)。a,b,i,j,k,l 等参数表示单费米子的量子数, 取值为 1,2, ..., N。  $d^\dagger$  为杂质电子的产生算符,  $d$  则为杂质电子的湮灭算符。

库的哈密顿量  $H_{bath}$  则可以表示为由动量  $k$  与轨道  $\alpha$  为参数的形式:

$$H_{bath} = \sum_{k\alpha} \varepsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} \quad (2.21)$$

这样库的哈密顿量  $H_{bath}$  就可以看成是巡游电子带有关的部分。

杂化项的哈密顿量  $H_{hyb}$  最普遍的情况下写成含有杂化矩阵  $V$  的形式:

$$H_{hyb} = \sum_{kab} V_k^{ab} c_{k\alpha}^\dagger d_b + H.c. \quad (2.22)$$

### 2.3.2 几种特殊情况下的量子杂质模型哈密顿量

最典型的量子杂质模型是单杂质点的单轨道 Anderson 模型<sup>[50,51]</sup>。在这个模型中,  $H_{loc}$  就表示一个单一的轨道, 因此指标 a 就表示自旋向上和自旋向下,  $E^{ab}$  就表示能级  $\varepsilon_0$



并且相互作用项塌缩为  $Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$ ，因此：

$$H_{AIM} = \sum_{\sigma} \varepsilon_0 d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + Un_{\uparrow}n_{\downarrow} + \sum_{k\sigma} (V_k c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + H.c.) + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \quad (2.23)$$

在实际问题中，拥有更多自由度的杂质模型由于能够显示出更多的物理现象，将变得非常重要。有一种常用的“Slater-Kanamori”形式：

$$\begin{aligned} H_{loc}^I = H_{SK} = & U \sum_a n_{a\uparrow} n_{a\downarrow} + (U - 2J) \sum_{a \neq b} n_{a\uparrow} n_{b\downarrow} + (U - 3J) \sum_{a > b, \sigma} n_{a\sigma} n_{b\sigma} \\ & - J \sum_{a \neq b} (d_{a\uparrow}^{\dagger} d_{a\downarrow}^{\dagger} d_{b\uparrow} d_{b\downarrow} + d_{a\uparrow}^{\dagger} d_{b\downarrow}^{\dagger} d_{b\uparrow} d_{a\downarrow}) \end{aligned} \quad (2.24)$$

在纳米科学中，我们还经常用到团簇动力学平均场理论，例如对一个具有两个杂质点的 Hubbard 模型来说，我们有

$$\begin{aligned} H_{loc} = H_{cl} = & \sum_{\sigma} \varepsilon_0 (d_{1\sigma}^{\dagger} d_{1\sigma} + d_{2\sigma}^{\dagger} d_{2\sigma}) \\ & + \sum_{\sigma} t (d_{1\sigma}^{\dagger} d_{2\sigma} + d_{2\sigma}^{\dagger} d_{1\sigma}) + U (n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow}) \end{aligned} \quad (2.25)$$

至此，这一章的内容就介绍完毕了。



### 3. 连续时间量子蒙特卡洛杂质求解器

在这一章中，我们将着重介绍求解动力学平均场理论中量子杂质模型的量子杂质模型求解器。在求解这样的问题中，人们一直以来都在探求一种既能在能量标度高和又能在能量标度低的这样一种适用范围广泛的杂质求解器。连续时间量子蒙特卡洛方法就接受了这样的挑战，并在实际的物理研究中取得了丰厚的成果。这一章论文的内容具体安排如下：

第 3.1 节我们将介绍基本的蒙特卡洛的概念，让读者们对什么是蒙特卡洛算法有一个大致的了解。

第 3.2 节我们将介绍连续时间蒙特卡洛算法中的图形蒙特卡洛方法，它是弱耦合展开、附加场展开、强耦合展开等其它各种算法的出发点。

第 3.3 节我们则具体介绍本次毕业设计所用的强耦合展开连续时间量子蒙特卡洛的原理以及相关理论公式的推导。

#### 3.1 蒙特卡洛算法初步

##### 3.1.1 什么是蒙特卡洛模拟

蒙特卡洛方法是一种以概率论和统计理论作为它基础的数值计算方法<sup>[52]</sup>。随着计算机技术的发展，这种方法被广泛的应用。不论是在物理学、数学、计算机科学上都取得了重要的成果。既然蒙特卡洛是以概率统计理论作为它的理论基础，顾名思义，它所解决的就必然不是像那些具有严格运动形式的时间依赖过程（例如，在经典力学里，如果我们运用牛顿运动方程，就可以精确求解小球在空气中的运动），它所要解决的是那些运动是随机变化的且运动的方式依赖于一系列在模拟中产生的随机数的过程。对于同样一个初始状态，产生不同序列的随机数我们所得到的结果就不会完全相同，但是这些模拟结果是在一定的统计误差里波动的。

在统计力学中，我们去估计一个模型特定的性质，就需要尝试着在相空间中进行抽样。很显而易见，由于是蒙特卡洛是一个随机的过程，我们在相空间中移动的路径一定是与模型随时间依赖关系的演化路径是不相同的。但是在平衡态统计力学中，像具有相互作用的多粒子体系这样的模型，我们的任务是去计算热力学量的平均值。蒙特卡洛方法就是在考虑合理的统计涨落的情况下可以得到这些模型的相关性质。所以说，蒙特卡洛的应用范围真的是非常的广泛，很多那些可以用离散化方法近似的模型，蒙特卡洛方



法都不失是一种很有效的模拟方法。

### 3.1.2 蒙特卡洛方法的基本概念

虽然我们要考虑的是连续时间量子蒙特卡洛方法在量子多体问题中的应用，我们的思想和经典的情形下在相空间  $C$  中的求和是一致的。 $C$  在通常情况下代表很高的维度，在这样高的维度下，蒙特卡洛方法有时候就成为有效求和实际可行的唯一方法。我们知道配分函数  $Z$  是统计问题中的一个重要的函数，在这里我们通常写成在相空间  $C$  中具有权重  $p(x)$  的积分形式：

$$Z = \int_C dx p(x) \quad (3.1)$$

在经典的系统中， $x$  很显然就表示相空间中的一点。它的权重常常由玻尔兹曼权重描述为  $p(x) = \exp(-\beta E(x))$ ，其中  $E(x)$  是出于这样位形下的能量。值得注意的是，在量子问题中， $x$  就将表示配分函数图形展开中确定的一项。

对于一个物理量  $A$  的期望值，我们可以通过遍历相空间中的权重  $p$  以及位形中  $A(x)$  的平均值来确定，我们写出这样的公式：

$$\langle A \rangle_p = \frac{1}{Z} \int_C dx A(x) p(x) \quad (3.2)$$

在具体的算法中，我们选取不同的表象， $A(x)$  的情况就当然不同。

蒙特卡洛方法的精髓就是将连续问题就行分立化，(3.2) 式的平均值就可以通过在相空间取一定数量的位形来确定，当我们的位形取得越大的时候，我们的计算结果就越精确，我们就可以得到下面的公式：

$$\langle A \rangle_p \approx \langle A \rangle_{MC} = \frac{1}{M} \sum_1^M A(x_i) \quad (3.3)$$

根据中心极限定理<sup>①</sup>的内容，如果我们的位形取得足够的多，那么我们通过蒙卡得到的平均值就会找期望值的附近变化，我们有：

$$(\Delta A)^2 = \langle (A_{MC} - A_p)^2 \rangle = \frac{Var A}{M} \quad (3.4)$$

有时候，我们为了使得蒙特卡洛取样更加合理，就需要选择与  $p(x)$  的分布不同的  $\rho(x)$  进行计算，这样我们就可以将  $\langle A \rangle_p$  写成下面的形式：

<sup>①</sup>有关概率论与中心极限定理的具体内容可以参看参考文献【53】。



$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \frac{1}{Z} \int_C dx A(x) p(x) = \frac{\int_C dx A(x) [p(x) / \rho(x)] \rho(x)}{\int_C dx [p(x) / \rho(x)] \rho(x)} \\ &= \frac{\langle A(p / \rho) \rangle_\rho}{\langle p / \rho \rangle_\rho}\end{aligned}\quad (3.5)$$

注意，要算上式的平均值，我们就需要对分子、分母分别进行取样计算。

对于 (3.1) 式与 (3.5) 式这种最为一般的分布，我们最好是用马科夫 (Markov) 过程生成位形进行蒙特卡洛的采样。Markov 过程完全由从状态  $x$  到状态  $y$  这样的转移矩阵  $W_{xy}$  来描述。由几率守恒我们就可以得知  $\sum_y W_{xy} = 1$ 。如果满足下面两个条件，我们的 Markov 过程就将以指数形式从任意一个分部收敛到固定的位形分布  $p(x)$ 。

1. 各态历经性 (Ergodicity): 我们必然可以通过有限次数的 Markov 过程，从任意一个位形  $x$  变换到另一个任意位形  $y$ 。也就是说，对于任意的  $x$  和  $y$ ，必然存在着一个整数  $N < \infty$ ，使得  $n > N$  时，有  $(W^n)_{xy} \neq 0$ 。
2. 细致平衡 (detailed balance) 条件: 首先我们要说的是平衡条件。当系统处于平稳状态时，就要求分布  $p(x)$  满足平衡条件:  $\int_C dx p(x) W_{xy} = p(y)$ ，其中  $p(x)$  为转移矩阵  $W_{xy}$  的左本征矢。但是一般情况下我们用的是平衡条件的充分不必要条件进行计算，这就是我们所说的细致平衡条件，形式如下:

$$\frac{W_{xy}}{W_{yx}} = \frac{p(y)}{p(x)} \quad (3.6)$$

最后，我们再在这里提一下蒙特卡洛中的算法。其中满足细致平衡条件且最先被提出也是被最广泛应用的算法是 Metropolis-Hastings 算法。这种算法的基本思想就是我们认为从位形  $x$  到位形  $y$  的更新分别由产生概率  $W_{xy}^{prop}$  与接受概率  $W_{xy}^{acc}$  决定。如果更新被拒绝，那么我们就继续使用原来的位形  $x$ 。我们可以写出 Metropolis-Hastings 算法下的转移矩阵为:

$$W_{xy} = W_{xy}^{prop} W_{xy}^{acc} \quad (3.7)$$

如果我们将接受概率设为:

$$W_{xy}^{acc} = \min[1, R_{xy}] \quad (3.8)$$

其中



$$R_{xy} = \frac{p(y)W_{yx}^{prop}}{p(x)W_{xy}^{prop}} \quad (3.9)$$

这样就可以满足细致平衡条件 (3.6) 式。此外，我们还要提醒大家一点， $R_{yx} = 1/R_{xy}$ 。

### 3.2 图形蒙特卡洛方法

#### 3.2.1 图形展开与路径积分抽样

连续时间量子蒙特卡洛方法的出发点非常的简单，我们通常将哈密顿量写成两个部分和的形式，即  $H = H_a + H_b$ 。在这个基础上，我们将配分函数写成关于  $H_a$  与  $H_b$  幂级数展开的形式：

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} T_\tau e^{-\beta H_a} \exp\left[-\int_0^\beta d\tau H_b(\tau)\right] \\ &= \sum_k (-1)^k \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^\beta d\tau_k \text{Tr}[e^{-\beta H_a} H_b(\tau_k) \times H_b(\tau_{k-1}) \cdots H_b(\tau_1)] \end{aligned} \quad (3.10)$$

为了写成 (3.1) 式的形式，我们将上式写成图形展开对积分求和的形式：

$$Z = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\gamma \in \Gamma_k} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^\beta d\tau_k w(k, \gamma, \tau_1 \cdots \tau_k) \quad (3.11)$$

我们将单独的位形记为：

$$x = (k, \gamma, (\tau_1 \cdots \tau_k)) \quad (3.12)$$

其中  $k$  代表图形展开的阶数， $\tau_1 \cdots \tau_k \in [0, \beta]$  表示  $k$  点在位形空间中的时间，参量  $\gamma \in \Gamma_k$  包含了像自旋图形的拓扑结构、轨道、晶格格点等离散变量。

位形  $x$  所具有的权重为：

$$p(x) = w(k, \gamma, \tau_1 \cdots \tau_k) d\tau_1 \cdots d\tau_k \quad (3.13)$$

在这里我们不考虑负符号问题。

下面我们就举个简单的例子来说明这个问题，我们将配分函数取成这样的形式：

$$Z = \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \int_{\tau_1}^{\tau_2} \cdots \int_{\tau_{k-1}}^\beta d\tau_k w(k) \quad (3.14)$$

此时，位形的权重为：

$$p(k, \tau_1 \cdots \tau_k) = w(k) \prod_{i=1}^k d\tau_i \quad (3.15)$$

我们通常认为  $\tau_1 \leq \tau_2 \leq \cdots \leq \tau_k$ 。如图 3.1 所示，相空间中的位形的阶数可以用点的个数来





表示；从上到下依次代表  $k=0,1,2,3$ ；每一个代表点分别代表在虚时间点  $\tau_1$ 、 $\tau_2$ 、 $\tau_3$ 。

我们从任意一个旧的位形出发，通过插入新的点与删除旧的点，就可以得到任意一个新的位形，这正满足了各态历经性。

对于这样的插入与删除操作，我们假设初始的位形（设阶数为  $k$ ）数学表达式为：

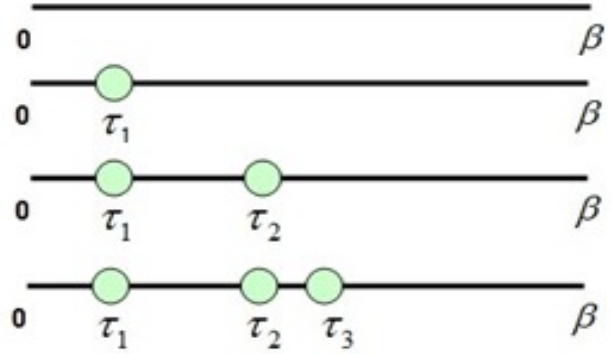


图 3.1 相空间位形的图形表示

$$(k, \vec{\tau}) = (k, \tau_1, \dots, \tau_k) \quad (3.16)$$

我们若在虚时间点  $\tau$  时在区间  $[0, \beta]$  均匀的插入这个点，得到这个新的位形就可以表示为：

$$(k+1, \vec{\tau}') = (k+1, \tau_1, \dots, \tau, \dots, \tau_k) = (k+1, \tau'_1, \dots, \tau'_{k+1}) \quad (3.17)$$

这样的插入几率我们定为：

$$W_{(k, \vec{\tau}), (k+1, \vec{\tau}')}^{prop} = \frac{d\tau}{\beta} \quad (3.18)$$

相反的，我们删除一个点的操作，例如从  $(k+1, \vec{\tau}')$  到  $(k, \vec{\tau})$ ，我们同样可以给出它的几率密度为：

$$W_{(k+1, \vec{\tau}'), (k, \vec{\tau})}^{prop} = \frac{1}{k+1} \quad (3.19)$$

我们必须先计算接受比率从而获得 Metropolis-Hastings 算法下的接受概率。首先我们可以得到接受比率为：

$$\begin{aligned} R_{(k, \vec{\tau}), (k+1, \vec{\tau}')} &= \frac{p(k+1, \vec{\tau}')}{p(k, \vec{\tau})} \frac{W_{(k+1, \vec{\tau}'), (k, \vec{\tau})}^{prop}}{W_{(k, \vec{\tau}), (k+1, \vec{\tau}')}^{prop}} \\ &= \frac{w(k+1) d\tau'_1 \dots d\tau'_{k+1} \frac{1}{(k+1)}}{w(k) d\tau_1 \dots d\tau_k \frac{d\tau}{\beta}} \\ &= \frac{w(k+1)}{w(k)} \frac{\beta}{k+1} \end{aligned} \quad (3.20)$$

在这里我们可以清楚的看到虽然位形的权重如 (3.15) 式所示，带有  $k$  个无穷小量相乘



的形式，但是接受比率中已经将它们相消。

通过上面的分析，最终我们就可以得到插入点与消除点的接受概率分别为：

$$W_{(k,\bar{\tau}),(k+1,\bar{\tau}')}^{acc} = \min[1, R_{(k,\bar{\tau}),(k+1,\bar{\tau}')}] \quad (3.21)$$

$$W_{(k+1,\bar{\tau}'),(k,\bar{\tau})}^{acc} = \min[1, 1/R_{(k,\bar{\tau}),(k+1,\bar{\tau}')}] \quad (3.22)$$

这样关于图形蒙特卡洛方法的相关基本知识，我们就介绍到这。具体的细节与更多的问题，有兴趣的读者可以参阅更多的文献与书籍。

### 3.2.2 图新蒙特卡洛方法基本流程

如下图 3.2 所示，这就是图形蒙特卡洛方法的计算流程<sup>[3, 15]</sup>。我们将简要概括如下：

- (1) 首先我们将图形初始化，得到一个初始的位形。初始化其实包括很多内容，包括程序环境的初始化，也包括蒙特卡洛方法图形的热身，使我们的系统达到稳定的状态后才开始下面的统计步骤；
- (2) 选择图形的更新方式，我们可以选择插入点的方式，也可以选择删除点的做法。有时候为了提升模拟的性能与效率，我们还可以选择其他的图形更新方式；
- (3) 通过已经选择的更新方式，实际上我们就得到了一个新的位形，根据得到的位形计算更新的比率与接收比率；
- (4) 根据 Metropolis-Hastings 算法，看图形更新是被接受还是被拒绝；
- (5) 如果图形被接受，我们就保存新的位形；如果图形更新被拒绝，我们就保存原有的位形；
- (6) 通过对当前图形的测量，我们可以得到相关的物理量；
- (7) 看物理量是否收敛在我们的标准内，如果不收敛，返回第（2）步继续循环；如果相关物理量已经收敛，我们就退出循环，程序执行结束。

### 3.3 基于强耦合展开的连续时间蒙特卡洛求解器

在 2.3 节我们就提到了量子杂质模型哈密顿量的一般形式为 (2.13) 式所示的形式：

$H_{QI} = H_{loc} + H_{bath} + H_{hyb}$ 。在强耦合展开中，对应与图形蒙特卡洛方法的哈密顿量形式，如公式 (3.10) 所表示的那样，我们将把哈密顿量分成如下的两个部分，其中：

$H_a = H_{loc} + H_{bath}$ ， $H_b = H_{hyb}$ 。在实际的典型应用中，我们发现在 Mott 转变附近，我们的图形微扰展开阶数要远远小于相互作用方法展开的阶数。因为这种强耦合展开的

方法可以用于更低的温度。

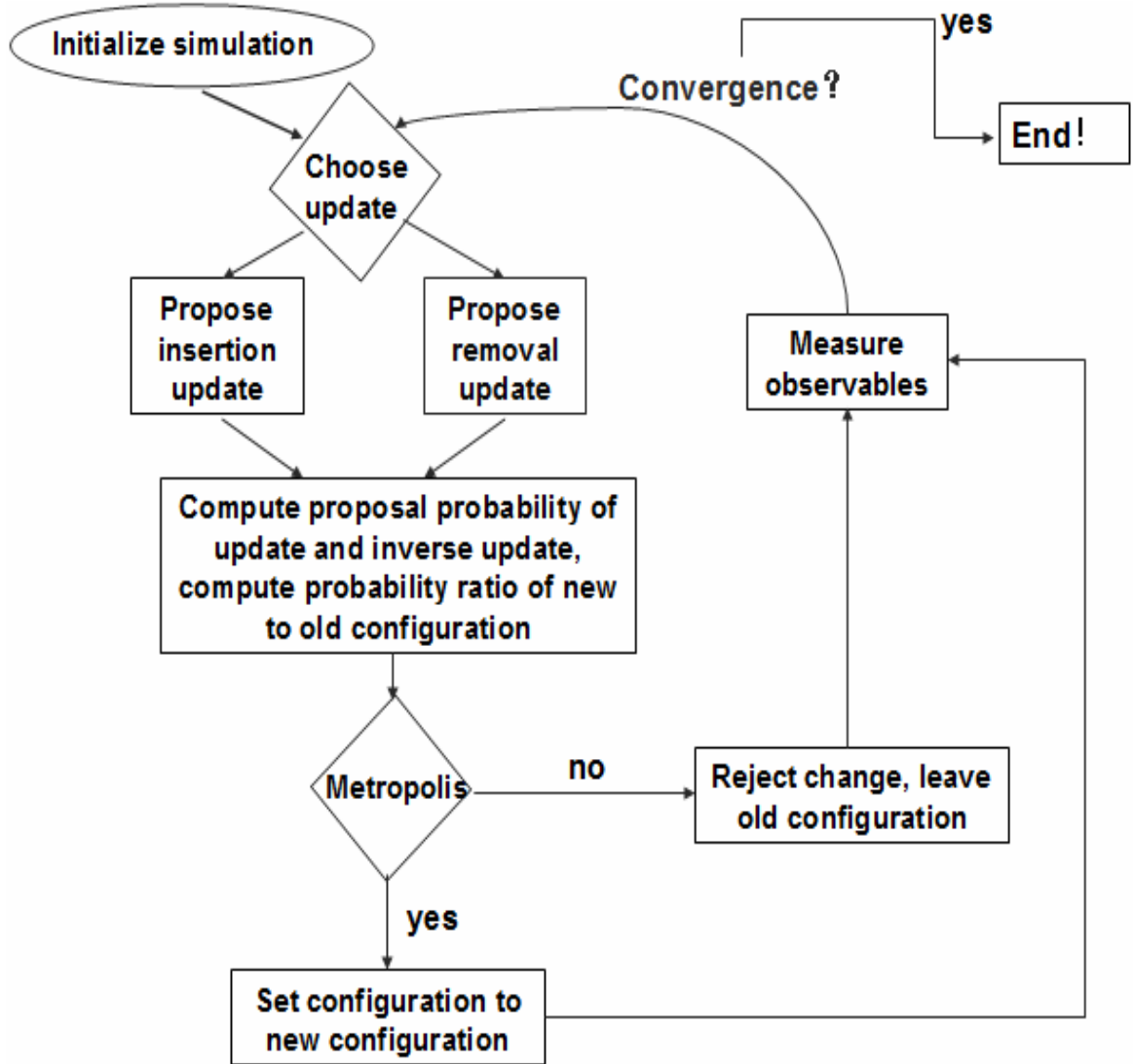


图 3.2 图形蒙特卡洛方法计算流程<sup>①</sup>

在强耦合展开的思想下，我们将杂化项做幂级数展开，那么杂化项就将具体表示为这样的形式：

$$H_{\text{hyb}} = \sum_{pj} (V_p^j c_p^\dagger d_j + V_p^{j*} d_j^\dagger c_p) = \tilde{H}_{\text{hyb}} + \tilde{H}_{\text{hyb}}^\dagger \quad (3.23)$$

我们就可以得到配分函数：

$$Z = \sum_{K=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^\beta d\tau_k \int_0^\beta d\tau'_1 \cdots \int_{\tau'_{k-1}}^\beta d\tau'_k \\ \times \text{Tr}[T_\tau e^{-\beta H_a} \tilde{H}_{\text{hyb}}(\tau_k) \tilde{H}_{\text{hyb}}^\dagger(\tau'_k) \cdots \tilde{H}_{\text{hyb}}(\tau_1) \tilde{H}_{\text{hyb}}^\dagger(\tau'_1)] \quad (3.24)$$

①此流程图来自参考文献【15】，pp: 357.



将 (3.23) 式带入上式，并将库的算符与杂质算符分类合并，就可以得到：

$$\begin{aligned}
 Z = & \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^{\beta} d\tau_k \int_0^{\beta} d\tau'_1 \cdots \int_{\tau'_{k-1}}^{\beta} d\tau'_k \\
 & \times \sum_{j_1 \cdots j_k} \sum_{p_1 \cdots p_k} V_{p_1}^{j_1} V_{p'_1}^{j_1^*} \cdots V_{p_k}^{j_k} V_{p'_k}^{j_k^*} \\
 & \times Tr_d [T_{\tau} e^{-\beta H_{loc}} d_{jk}(\tau_k) d_{j'_k}^{\dagger}(\tau'_k) \cdots d_{j_1}(\tau_1) d_{j'_1}^{\dagger}(\tau'_1)] \\
 & \times Tr_c [T_{\tau} e^{-\beta H_{bath}} c_{p_k}^{\dagger}(\tau_k) c_{p'_k}(\tau'_k) \cdots c_{p_1}^{\dagger}(\tau_1) c_{p'_1}(\tau'_1)]
 \end{aligned} \quad (3.25)$$

我们定义库的配分函数如下：

$$Z_{bath} = Tr e^{-\beta H_{bath}} = \prod_{\sigma} \prod_p (1 + e^{-\beta \varepsilon_p}) \quad (3.26)$$

和反周期杂化函数：

$$\Delta_{lm}(\tau) = \sum_p \frac{V_p^{l*} V_p^m}{e^{\varepsilon_p \beta} + 1} \times \begin{cases} -e^{-\varepsilon_p(\tau - \beta)}, & 0 < \tau < \beta \\ -e^{-\varepsilon_p \tau}, & -\beta < \tau < 0 \end{cases} \quad (3.27)$$

现在我们的任务是要将 (3.25) 式中的有关库算符  $c_p(\tau)$  的部分积分掉。由于它们是无相互作用的，时间演化算符就不再将杂质与库耦合起来。通过上面两个定义式，我们得到：

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{Z_{bath}} Tr [T_{\tau} e^{-\beta H_{bath}} \sum_{p_1 \cdots p_k} \sum_{p'_1 \cdots p'_k} V_{p_1}^{j_1} V_{p'_1}^{j_1^*} \cdots V_{p_k}^{j_k} V_{p'_k}^{j_k^*} \\
 & \times c_{p_k}^{\dagger}(\tau_k) c_{p'_k}(\tau'_k) \cdots c_{p_1}^{\dagger}(\tau_1) c_{p'_1}(\tau'_1)] = \det \Delta
 \end{aligned} \quad (3.28)$$

其中  $\Delta$  是一个  $k \times k$  阶的矩阵，矩阵的元素为：  $\Delta_{lm} = \Delta_{j_l j_m}(\tau_l - \tau_m)$ 。

最终 (3.25) 式就可以写为：

$$\begin{aligned}
 Z = & Z_{bath} \sum_k \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^{\beta} d\tau_k \int_0^{\beta} d\tau'_1 \cdots \int_{\tau'_{k-1}}^{\beta} d\tau'_k \sum_{j_1, \cdots, j_k} \sum_{j'_1, \cdots, j'_k} Tr_d [T_{\tau} e^{-\beta H_{loc}} \\
 & \times d_{jk}(\tau_k) d_{j'_k}^{\dagger}(\tau'_k) \cdots d_{j_1}(\tau_1) d_{j'_1}^{\dagger}(\tau'_1)] \det \Delta
 \end{aligned} \quad (3.29)$$

这样我们就得到图形蒙特卡洛方法如 (3.11) 式的一般形式，其权重就为：

$$w = Tr_d [T_{\tau} e^{-\beta H_{loc}} \times d_{jk}(\tau_k) d_{j'_k}^{\dagger}(\tau'_k) \cdots d_{j_1}(\tau_1) d_{j'_1}^{\dagger}(\tau'_1)] \det \Delta \quad (3.30)$$



## 4. Bethe 晶格的金属—绝缘相变

在这一章中，我们将介绍这次毕业设计中我们的主要工作之一。我们完成了用量子杂质求解器求解 Bethe 晶格上单带 Hubbard 模型的相关物理量，并观察到了单带 Hubbard 模型上的 Mott 金属—绝缘相变。这一章的内容概要如下：

第 4.1 节我们将介绍有关 Bethe 晶格的相关概念与蒙特卡洛抽样的相关物理量在此晶格上的具体形式。

第 4.2 节我们将介绍 Mott 金属—绝缘相变的一些相关概念，让读者对 Mott 金属—绝缘相变有一个初步的了解。

第 4.3 节我们将展示我们的计算结果，说明了我们用 CT-HYB 方法观察到了单带 Hubbard 模型的金属—绝缘相变。

### 4.1 Bethe 晶格的相关概念

Bethe 晶格在统计物理与凝聚态物理中一直都是人们研究的对象。Bethe 晶格是一种无限大的树状结构晶格。它的每一个原子都有相同的配位数  $Z$ ，每两个原子之间都由一条路径连接起来<sup>[54,55]</sup>。如图 4.1 所示，它表示的就是一个配位数  $Z=4$  的 Bethe 晶格。由于 Bethe 晶格所具有的自相似的结构，所以我们可以采用递归的方法求解这个模型。在研究无序与相互作用有关问题时，我们可以对其进行严格的求解。

在 Bethe 晶格中，如果空间维度趋于无穷大，只考虑最近邻的作用，此时如第 2.2 节所讨论的那样，此时，我们将得到半圆态密度（semicircular density of states）：

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi t^2} \sqrt{4t^2 - \varepsilon^2} \quad |\varepsilon| < 2t \quad (4.1)$$

此时的希尔伯特变换与倒数函数为：

$$\tilde{D}(\xi) = (\xi - s\sqrt{\xi^2 - 4t^2}) / 2t^2 \quad (4.2)$$

$$R(G) = t^2 G + 1/G \quad (4.3)$$

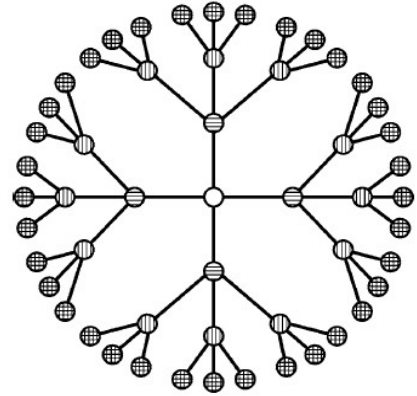


图 4.1 bethe 晶格示意图<sup>①</sup>

①此图来自参考文献【54】



我们将得到局域格林函数与 Weiss 函数的关系：

$$G_0^{-1}(iw_n) = iw_n + \mu - t^2 G(iw_n) \quad (4.4)$$

在我们的程序中，我们采用杂化函数与格林函数的关系来进行计算，我们用量子蒙特卡罗杂质求解器求解出来的格林函数带入 DMFT 自洽循环子程序，利用如下关系：

$$\Delta(\tau - \tau') = t^2 G(\tau - \tau') \quad (4.5)$$

这样就得到了满足晶格结构的杂化函数。我们通过混合新旧杂化函数，把它作为下次蒙特卡罗计算的初始值，通过 20 次的自洽迭代，我们一般是可以达到所需要的精度要求。

## 4.2 Mott 金属-绝缘相变

在早期的能带理论中，我们在不考虑电子相互作用或是考虑非常弱的电子相互作用，我们得到这样的结论：对于能带为填满的情形，我们此时费米能级穿过能带，我们得到就将是金属；如果下面的能带填满了，而上面的带是空着的，此时我们得到的就将是绝缘体；若带隙较小，我们称之为半导体，若带隙较大，我们称之为绝缘体<sup>[56]</sup>。然而在很多材料中，电子-电子之间的相互作用相当大，即使能带没有被填满，它也将表现出绝缘体的性质。这就表现出了非常新奇的物理现象。也就是我们后来称之为的 Mott 绝缘体。

### 4.2.1 金属-绝缘相变的基本概念

对于 Hubbard 模型，这个在凝聚态物理里最简单最标准的模型是 Hubbard 在 20 世纪 60 年代提出来的。Hubbard 模型的哈密顿量如 (2.10) 式所示。如果我们将电子-电子相互作用  $U$  取为 0，很显然，这将对应与传统的周期场中单电子紧束缚模型。此时能量色散关系为：

$$\varepsilon(k) = \varepsilon^{at} - J_0 - \sum_m J(R_m) e^{ik \cdot R_m} \quad (4.6)$$

$J_0$  相当于能带中心相对于原子能级有一个小的平移。最后一项求和是对所有最近邻交叠积分的求和。详细内容请大家参看参考文献[56]。

其实，能量色散关系的表达式与 Hubbard 模型哈密顿量中的跃迁系数有很大的关系。跃迁系数的对角矩阵元就对应能带的平均能量，有  $t_{ii} = \varepsilon^{at} - J_0$ 。非对角矩阵元与能量色散关系中的交叠积分相对应。



Hubbard 模型中当电子-电子相互作用不为 0 时，这样相比紧束缚模型来说，就多出了非常重要的一项。后面  $U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$  这一项就是反应了同一个格点上不同自旋电子的排斥导致的能量的增加。从这里我们就可以清楚的看出，跃迁系数  $t$  所包含的交叠积分（电子可以在不同的格点之间运动）与  $U$  所代表的电子排斥作用形成了竞争的关系。同样的，我们可以这样分析，当跃迁系数矩阵非对角元为 0 时，就对应于孤立原子的情形，我们可以知道体系的能量可以很简单的写成：

$$\varepsilon = N_1 T_0 + N_2 (2T_0 + U) \quad (4.7)$$

也就是说每个格点的电子都有两个能级  $T_0$  和  $T_0 + U$ 。很显然从 (4.7) 式我们可以看出，有  $N_1$  个格点被一个电子占据， $N_2$  个格点被两个电子占据。当非对角元不为 0 的时候，此时就将形成以  $T_0$  和  $T_0 + U$  为中心的两个能带，且能带的带宽是随  $B/U$  变化的，如图 4.2 所示。这时我们就观察到了两个能带，能量低的那个带我们通常称之为下 Hubbard 带，能量相对较高的带我们称之为上 Hubbard 带。

特别的，对于能带半满的情形，按照传统紧束缚的观点，这将是一个导体，但是我们考虑  $U$  的效应之后，我们发现，当  $U$  比较大的时候，上、下 Hubbard 带之间没有交叠，此时下 Hubbard 带被填满，上 Hubbard 带是空着的，这就对应着一个绝缘态。因此当  $U$  从小逐渐增大时，半满带的 Hubbard 将会从金属态转变为绝缘态，这就是我们所说的 Mott 金属—绝缘相变。

#### 4.2.2 实际材料中的金属绝缘相变

在实验上，我们研究最广泛的是 d 电子体系。特别是铜氧化物高温超导体的研究和庞磁电阻效应的相关进展，越来越多的科学家对过渡族金属产生了很大的兴趣。特别的是 Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu 和 Ru 的相关化合物，它们都展现了非常丰富的物理现象。通常 Mott 金属—绝缘相变的决定性参数有能带的填充情况，带宽和维度等。在实验上，我们可以采用掺杂、压力、不同的化学组成以及磁场等参数来实现理论上这些关键因素的改变，因此有大量的实验用于金属—绝缘相变的研究，很多在理论上都可以很

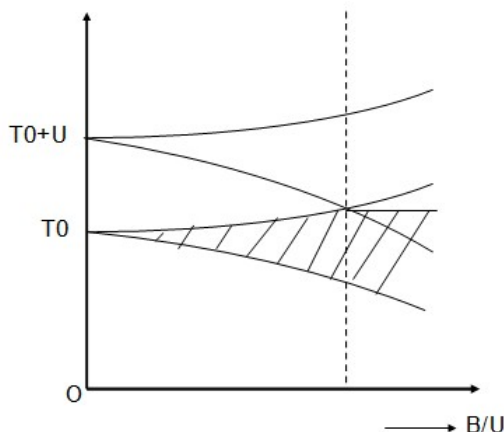


图 4.2 上下 Hubbard 带能量随  $B/U$  变化示意图





好的进行解释。

在 Imada, Fujimori 和 Tokura 的文章第四章中, 它们较全面的阐述了各种实验上对 Mott 金属—绝缘相变的事例分析<sup>[57]</sup>。比如实验物理学家用光电效应和 X 射线吸收光谱来研究带宽决定型三氧化二钒的 MIT。如图 4.3 所示, 这就是三氧化二钒的相图, 其中带宽就由我们所加的压强来决定。

在 2007 年 Science 上发表了一篇由中科院物理所与美国合作的一篇有关纯电子关联驱动的 Mott 金属—绝缘相变的文章<sup>[58]</sup>。这种纯电子的驱动就避免了以往电荷、电子自旋以及晶格三者的相互影响。首次实现了对理论上纯的电子驱动的 Mott 相变的验证。对于研究 Mott 金属—绝缘相变具有非常重要的意义。

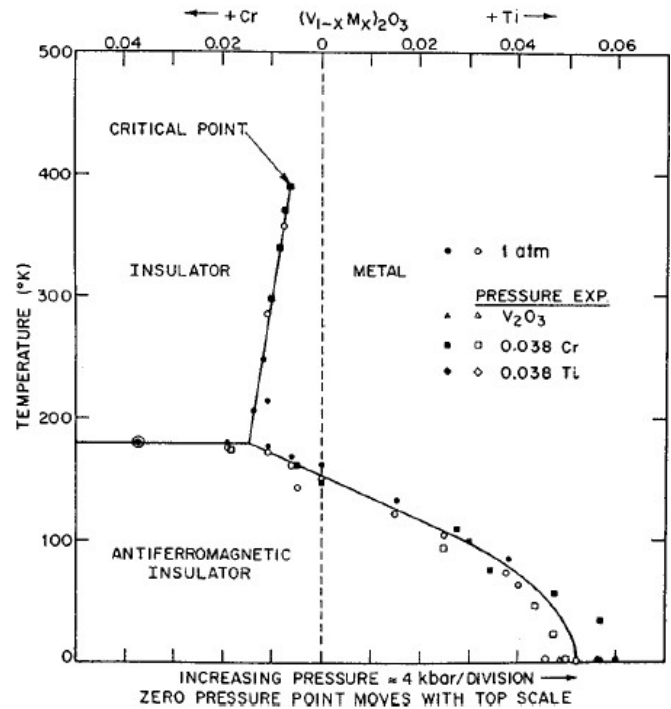


图 4.3  $V_2O_3$  的相图<sup>①</sup>

### 4.3 程序测试

下面是我们用连续时间蒙特卡洛方法来观察 Bethe 晶格上的 Mott 金属—绝缘相变的过程。我们设定反温度  $\beta=40$  (对应室温的情形), 跃迁系数  $t=0.5$ 。我们只考虑半满的情况, 此时有化学式  $\mu=\frac{U}{2}$ 。我们采用自洽 DMFT 循环 20 次, 在相互作用  $U$  不是特别小的情形下, 我们都可以得到很好的收敛的结果。为了加速我们程序的实现, 这里我们采用 MPI 并行的方法就行抽样。在这次蒙特卡洛抽样中, 为了节约时间和提高抽样的次数, 我们采用 8 个 CPU 的计算核心, 每个核心抽样的次数为 200,000,000 次, 加上我们采用 20 个 DMFT 的迭代循环与一次 bin 文件的采集(为计算谱函数用), 这样总的蒙卡抽样数目就为  $21 \times 8 \times 200,000,000$  次。可见这将是一个非常大的蒙卡抽样次数, 但是我们的基于强耦合展开的连续时间蒙特卡洛方法特别是在仅有密度-密度相互作用时(不考虑自旋翻转项与对跃迁项)是非常高效的。

①此图选自参考文献【2】, pp:59.



首先我们观察计算结果自能在 DMFT 自洽迭代循环中是否达到了收敛的情况,如图

4.4 所示。我们可以清楚的看见, 在自洽循环的前几步中, 我们的 sig\_curr 的值很大, 随着迭代循环的次数增多, 我们发现 sig\_curr 的值在很迅速的下降。但是我们也很容易发现一个问题, 到最后我们的 sig\_curr 的值在我们的收敛值附近波动, 并不能完全收敛到我们所设的精度上, 但这并不是我们的计算程序出现了问

```
AZALEA >>> sig_curr:0.1221E-03 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.2159E-04 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.5744E-05 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.1694E-05 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.4483E-06 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.1628E-06 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.1001E-06 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.9034E-08 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.1329E-07 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.2916E-07 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.6135E-07 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.8422E-07 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.1915E-07 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.4122E-07 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.3820E-07 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.4778E-07 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.1271E-06 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.2270E-07 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.3707E-07 eps_curr:0.1000E-07
AZALEA >>> sig_curr:0.2850E-07 eps_curr:0.1000E-07
```

图 4.4 电子自能收敛情况

题。我们知道量子蒙特卡洛方法本来就是一个随机抽样过程, 在抽样过程中就存在着物理量的涨落。一般而言, 当我们的结果在精度范围内波动且连续两次与所设精度在同一数量级时, 我们就认为我们的结果达到了精度的要求。

下面我们观察我们所得到的格林函数, 首先是虚时格林函数, 如图 4.5 所示, 当  $U=1.0$ ,  $\beta=40$ ,  $t=0.5$  时, 为了达到半满的情况, 我们就必须将化学势设为  $\mu=\frac{U}{2}=0.5$ 。

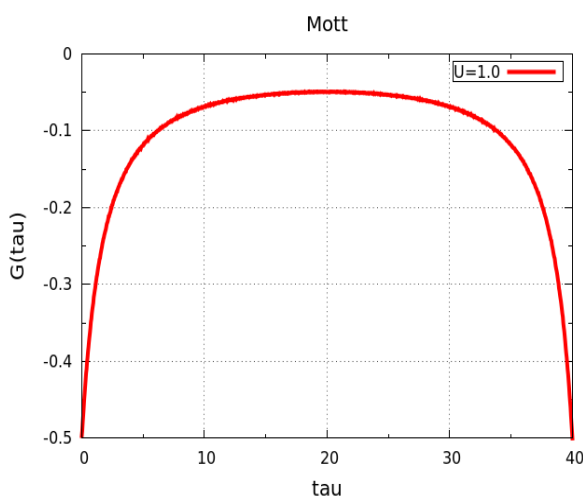


图 4.5 虚时格林函数  $G(\tau)$   
( $U=1.0$ )

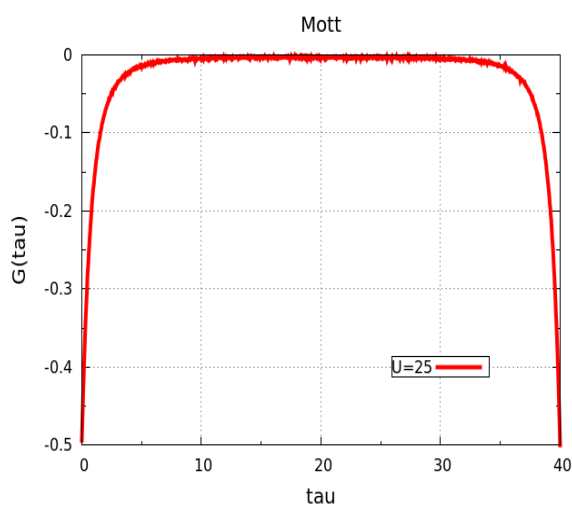


图 4.6 虚时格林函数  $G(\tau)$   
( $U=2.5$ )



这时虚时格林函数曲线将非常的平滑，在  $\beta=0$ ， $\beta=40$  时， $G(\tau)$  对应着 -0.5，这就是对应着粒子占据数为 0.5 的情形。此外在曲线中部平滑的部分，曲线与 0 轴之间有一定的距离。一般而言，这样的情形对应着金属态，所以  $U=1.0$  对应着金属相。

同样的分析，对于  $U=2.5$  时的情形，如图 4.6 所示。在这里我们看到曲线的形状并没有大的改变，只是在曲线中部贴到了 0 轴上，这就是典型的绝缘态的特征。虽然这种判断方法只是定性上的判断，最终的结果分析还是得从谱函数上去分析。但是我们可以确定 Mott 转变点就在  $U=1.0$  与  $U=2.5$  之间。

我们做出  $G(\tau)$  随  $U$  的变化示意图如图 4.7 所示，我们可以很清楚的看到金属—绝缘相变的变化趋势与过程。

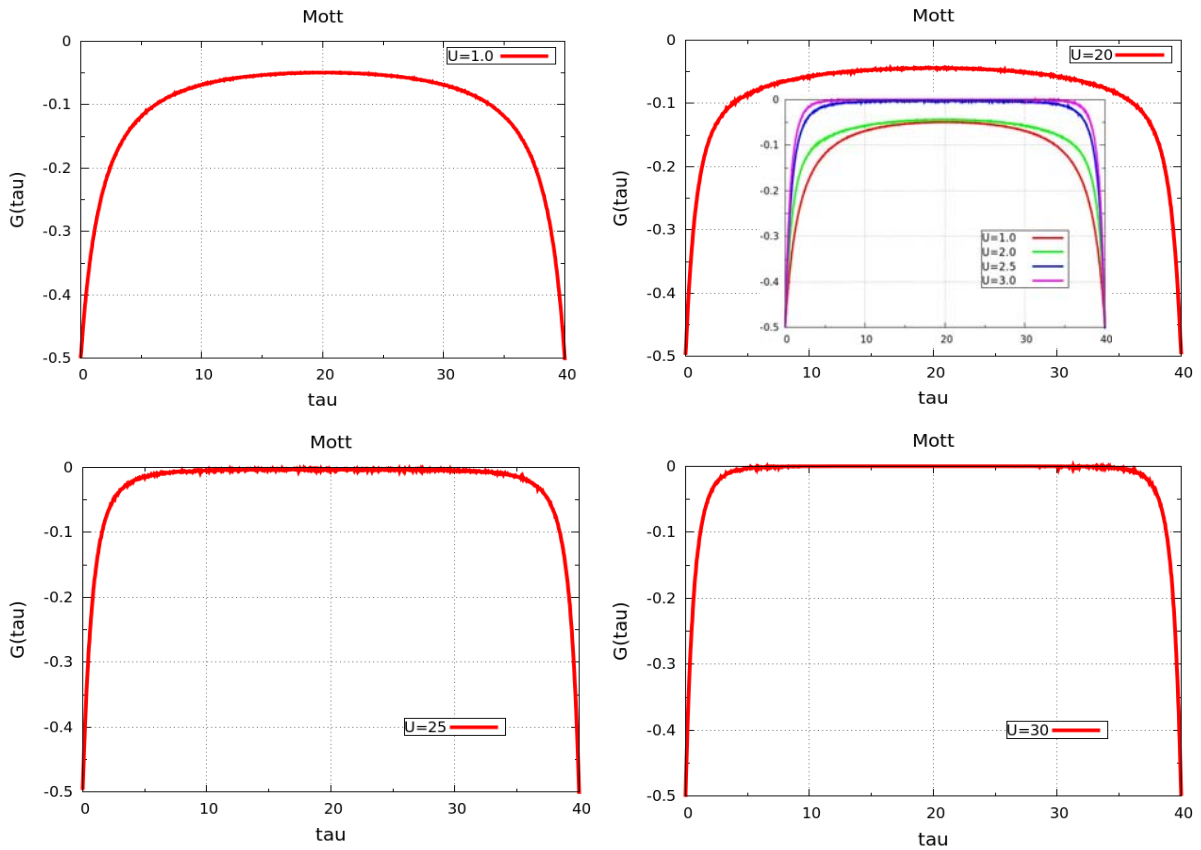
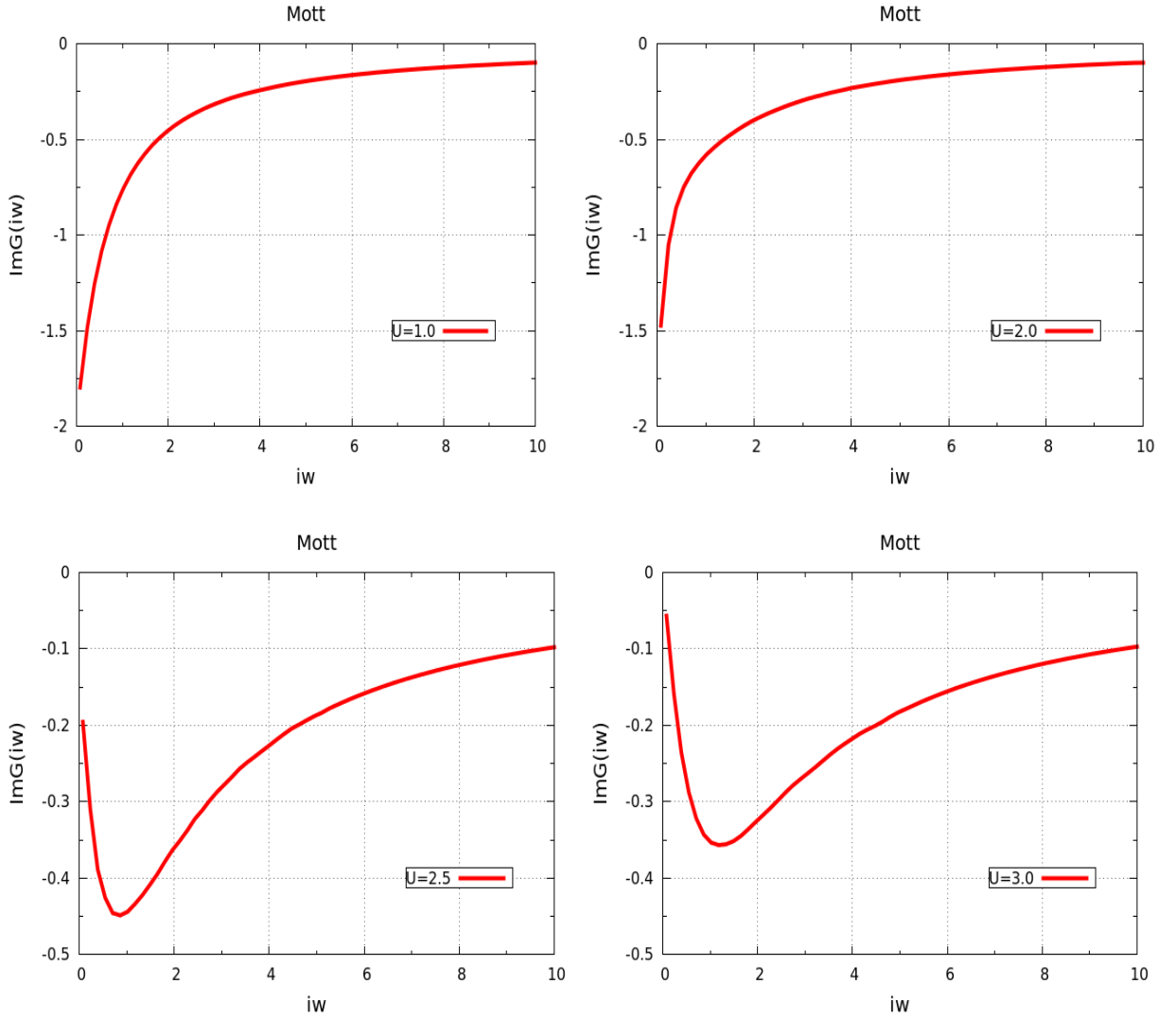


图 4.7  $G(\tau)$  随  $U$  的变化示意图

同样的，我们还可以分析虚频格林函数的虚部。首先我们也需要保证曲线足够的平滑，这样说明我们的取样是合理的。在虚频格林函数的低频区，我们就可以判断系统时处在什么样的相上。当曲线的形状呈现一个勾的形状时，就说明我们的系统处在绝缘相，当然这样方法判断也是定性上的。正如如图 4.8 所示，就给出了虚频格林函数的虚部随  $U$  变化的示意图。

图 4.8  $G(iw)$  虚部随  $U$  变化示意图

在此程序中，由于对松原频率点的所有点进行采集数据的话，将具有非常大的工程量。而且在蒙特卡洛抽样过程中，我们可以直接测量  $G(iw)$  的值，这是一个复数运算，这样多种因素的共同作用下，将会导致我们的采集效率变低。通常情况下，我们只测量低频下的一些松原频率点，在本此计算中，我们采用 128 个低频的松原频率点，高频时的那些点我们采用原子极限时的数据补齐。上图也可以看出，我们发生的 Mott 金属—绝缘相变的相变点也在  $U=2.0$  与  $U=2.5$  之间。

同样的，我们从自能函数也能大致看出发生 Mott 金属—绝缘相变的相关情况。如图 4.9 所示，

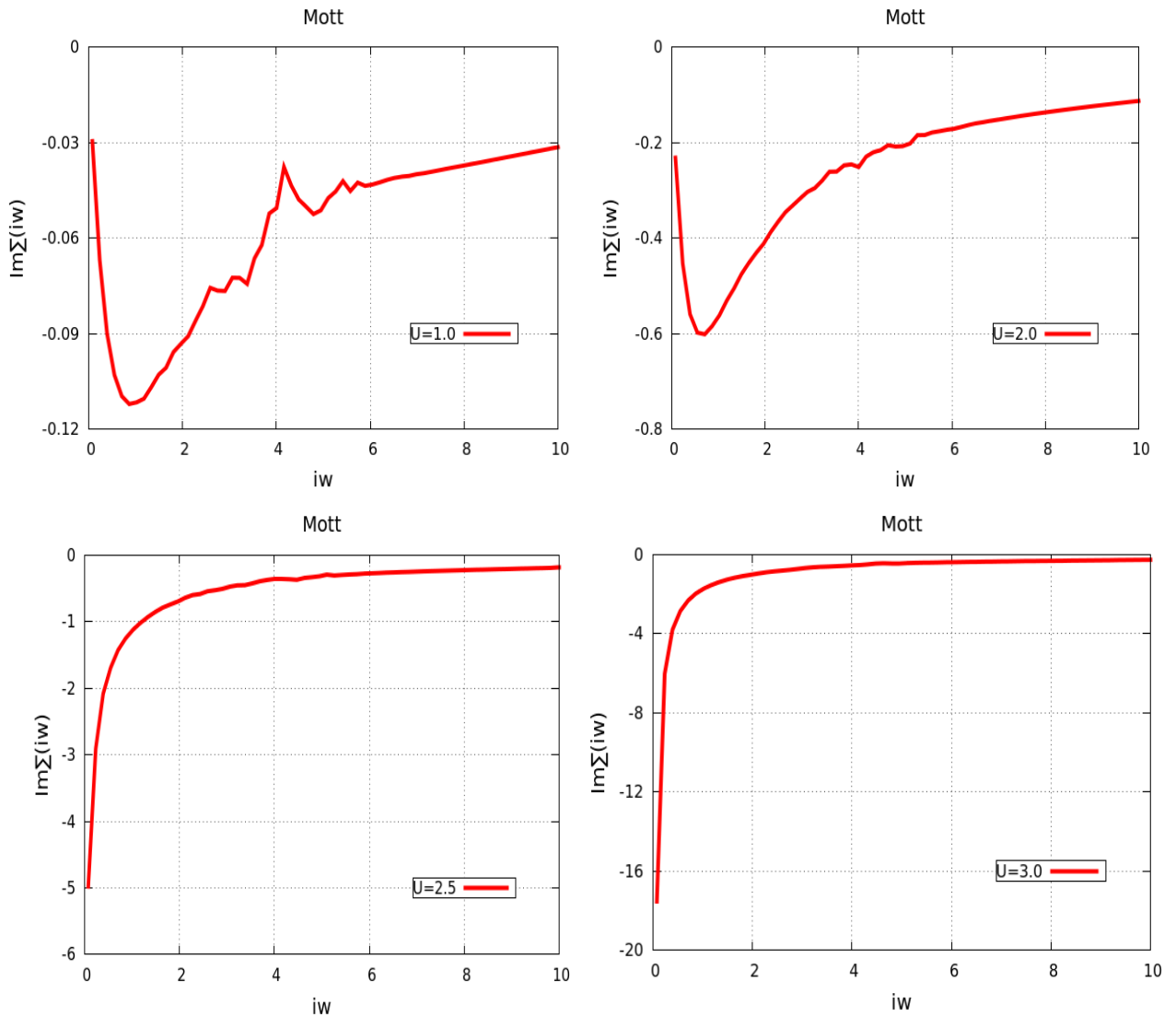


图 4.9  $\Sigma(i\omega)$  虚部随  $U$  变化示意图

首先我们也需要观察我们的曲线是否光滑，从图中我们可以看出对  $U$  较小时，我们的虚频自能函数的曲线并不是十分的光滑，与  $G(i\omega)$  相反的是，当曲线呈现一个勾的形状时，对应的是体系处在金属相的情况。从这个图中我们也清楚的看到，我们的 Mott 金属绝缘相变同样是发生在  $U=2.0$  与  $U=2.5$  之间。为了解决  $U=1.0$  时曲线不光滑的情况，我们将我们的取样个数乘以 10 倍，将两个自能函数的曲线进行了对比，我们可以看出，随着取样次数增加，曲线将变得更加光滑。如图 4.10 所示，其中用小圆点表示的红色曲线对应着取样次数乘以 10 的情形。



以上的分析都只是定性上来看的。观察 Mott 金属—绝缘相变最直观、可靠的方法就是观察其谱函数  $A(k, \omega)$  <sup>[59]</sup>。谱函数  $A(k, \omega)$  的确切物理意义可以解释为给定自旋的电子在状态空间  $k$  点的态密度。在固体物理理论中，特别是相互作用电子系统的谱函数是我们经常需要用到的。对于无相互作用的自由电子系统，其格林函数可以写为如下形式：

$$G_r^{(0)}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - E_k + i\eta} \quad (4.8)$$

其中  $E_k = k^2 / 2m$ ， $\eta = +0$ 。所以电子的谱函数为：

$$A^{(0)}(\vec{k}, \omega) = (-1/\pi) \text{Im} G_r^{(0)}(\vec{k}, \omega) = \delta(\omega - E_k) \quad (4.9)$$

是一个  $\delta$  函数。在  $A$ - $\omega$  平面上自由电子的谱函数是一个中心位于  $E_k$  处的表示电子寿命无限长的稳定电子态的谱函数。

对于有相互作用的这种较为复杂的体系，根据 Dyson 方程，我们可以求出其谱函数为：

$$A(k, \omega) = \frac{(-1/\pi) \text{Im} \Sigma_r(\vec{k}, \omega)}{[\omega - E_k - \text{Re} \Sigma_r(\vec{k}, \omega)]^2 + [\text{Im} \Sigma_r(\vec{k}, \omega)]^2} \quad (4.10)$$

这里谱函数  $A(k, \omega)$  的峰宽的倒数就是准粒子的寿命。

例如在我们这个问题里，当系统处在金属相时，在费米面附近有电子的占据。当发生金属—绝缘相变而使系统处于绝缘相时，费米面附近就没有电子的占据，相应的能隙就被打开了。为了得到电子的谱函数，我们需要对虚时格林函数进行解析延拓<sup>①</sup>，我们用最大熵求谱函数的方法<sup>②</sup>[60-64]。如图 4.11 所示，这就是我们用最大熵方法获得的  $A(\omega)$

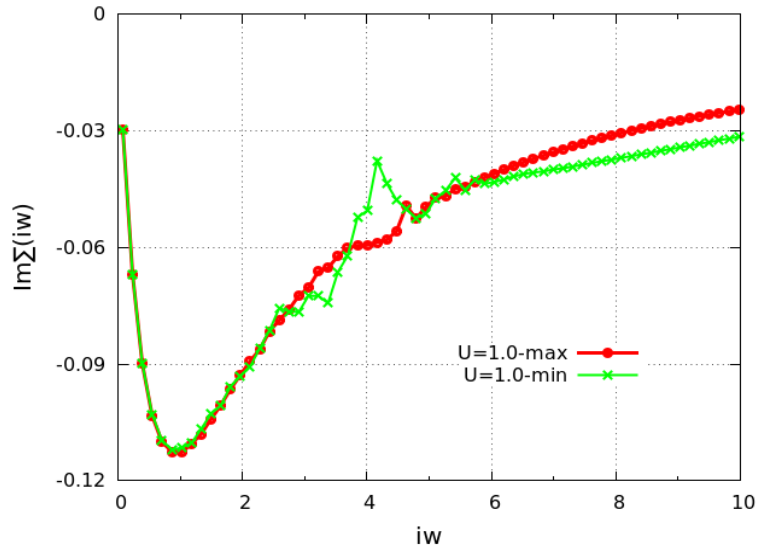


图 4.10 对比不同抽样次数对自能函数的影响

① 格林函数解析延拓的有关介绍可参看附录 A.

② 最大熵求谱函数的基本思想可以参看附录 B.

随  $U$  变化的示意图，在这个图里我们人为的把谱函数的值依次总体平移 0.5 个单位，这样就可以很清楚的看到能隙的变化情况。我们看到在  $U=1.0$  的时候，费米面附近存在很宽的峰，费米面附近的电子参与导电，这就是典型的金属特征。当  $U=2.0$  时，中间的准粒子峰依然存在，两边的 Hubbard 峰更加的明显，但是我们发现 Hubbard 峰相对理论值  $\pm 1.0$  更向外偏移了。这种偏移在我们的计算中是可以理解的，因为我们所采用的强耦合展开的方法在  $U$  较小的时候就会表现的误差较大。当  $U=2.5$  时，能隙就已经被打开，此时的准粒子峰消失，Hubbard 峰与理论值  $\pm 1.25$  相差很小。当  $U=3.0, 4.0$  时，能隙打开的

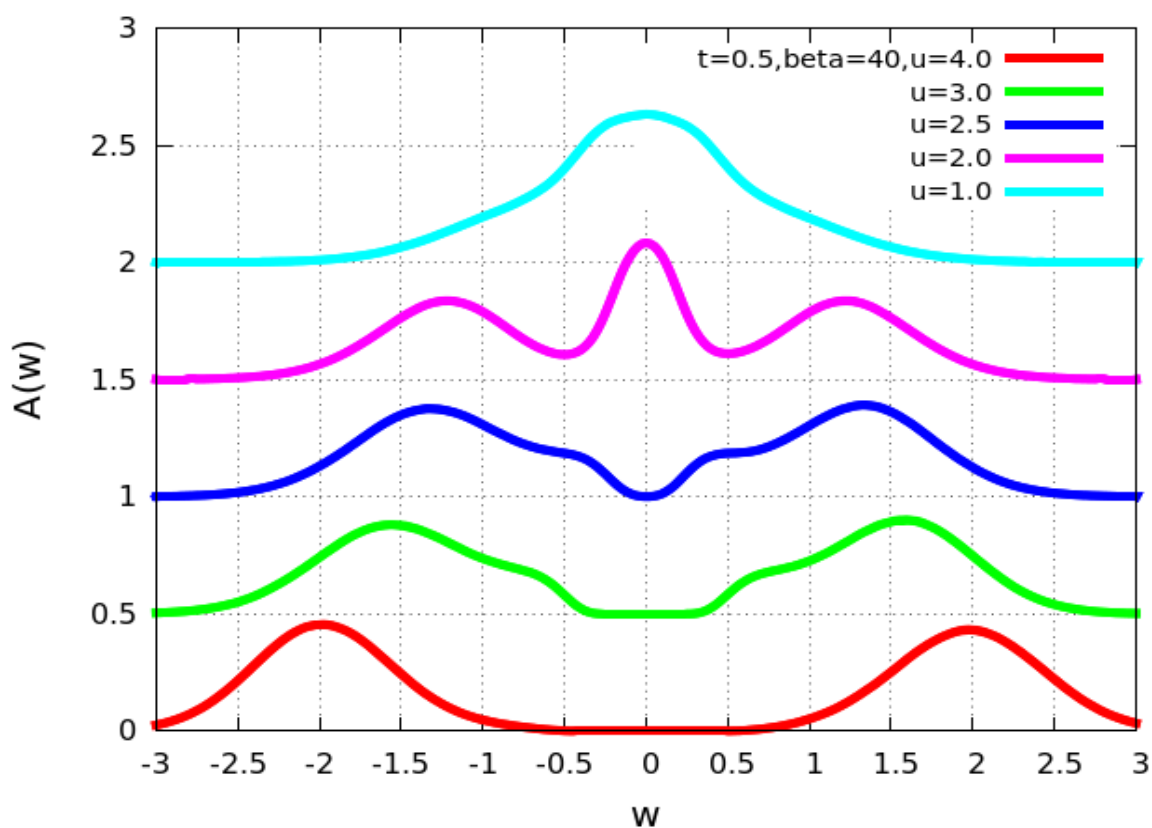


图 4.11 谱函数  $A(\omega)$  随  $U$  变化示意图

更加明显，Hubbard 峰的位置也与理论值相符的很好。在这里，我们就观察到了 Bethe 晶格上单带 Hubbard 模型的 Mott 金属—绝缘相变。

对于 Mott 金属—绝缘相变，我们还可以从准粒子权重  $Z$  来观察相变的过程。准粒子权重  $Z$  大于 0 的有限值时意味着金属相，当权重  $Z$  趋于 0 时则表示体系此时是处在绝缘相。准粒子权重  $Z$  的定义由  $A(k, \omega) = Z_k \delta(\omega - E(k))$  出发，理论公式为：



$$Z_k = \left[ \frac{\partial}{\partial \omega} (\omega - \xi(k) - \text{Re} \Sigma(k, \omega)) \Big|_{\omega=E(k)} \right]^{-1}$$

$$= \frac{1}{1 - \frac{\partial \text{Re} \Sigma(k, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=E(k)}} \quad (4.11)$$

通常在数值计算时，我们采用近似的计算公式：

$$Z \approx \frac{1}{1 - \frac{\Im \Sigma(i\omega_0)}{\omega_0}} \quad (4.12)$$

在(4.12)中， $\omega_0$  表示第一个松原频率点的值，相应的  $\Im \Sigma(i\omega_0)$  就表示在第一个松原频率点上所对应的电子自能函数的虚部。如图 4.12 所示，我们给出了  $t=0.5$  与  $t=1.0$  时准粒子权重  $Z$  随  $U$  的变化示意图。我们可以看到在  $t=0.5$ ， $U \approx 2.5$ ， $Z$  的值确实趋于 0。

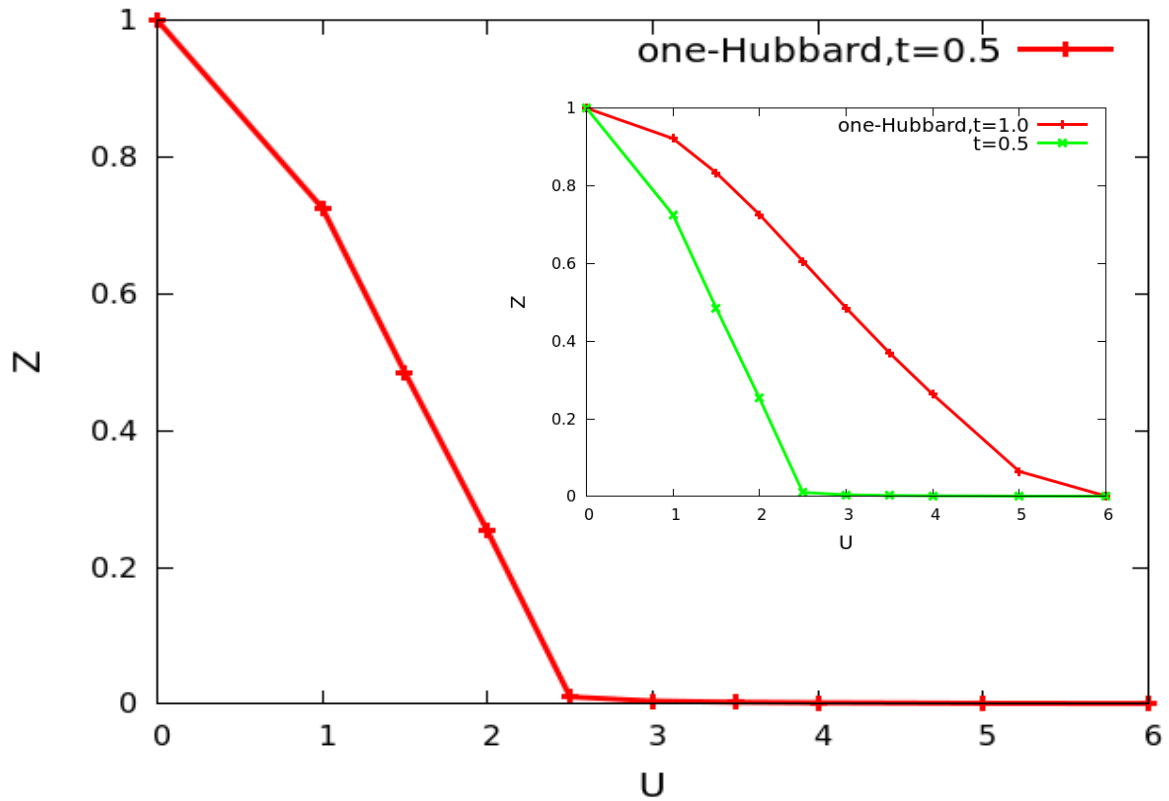


图 4.12 准粒子权重  $Z$  随  $U$  的变化示意图

我们前面已经提到，在 Hubbard 模型中， $t$  表示的跃迁系数与  $U$  之间存在着一种竞争关系，这种竞争关系从上图两种不同跃迁系数  $t$  的分析就可以看出， $t$  越大时，也就是说电子的巡游性越强时，就需要用更大的  $U$  与之平衡。一般情况下我们用  $U/t$  作为 Mott 金属—绝缘相变的一种量度。这样的话参照  $t=0.5$  时的情形，对于  $t=1$  的情况，我



们分析在  $U=5$  左右将发生金属—绝缘相变，从图 4.12 内图中，我们发现，在  $U=5$  附近，准粒子权重  $Z$  的值确实趋于 0。

前面多次提及在  $U$  比较小的时候，我们的算法所暴露的不足，比如自能函数的曲线不够光滑，得提高蒙特卡洛取样的次数。另一方面我们的谱函数在  $U$  较低时与理论上还是有所偏差。前面我们已经提到我们的强耦合展开是图形量子蒙特卡洛算法的一种，我们需要将我们哈密量的杂化项进行  $k$  阶展开。但是我们知道我们的矩阵是一个  $k \times k$  阶的矩阵， $k$  的增大将会导致矩阵计算量迅速的增大，不仅影响到我们的计算效率，而且对

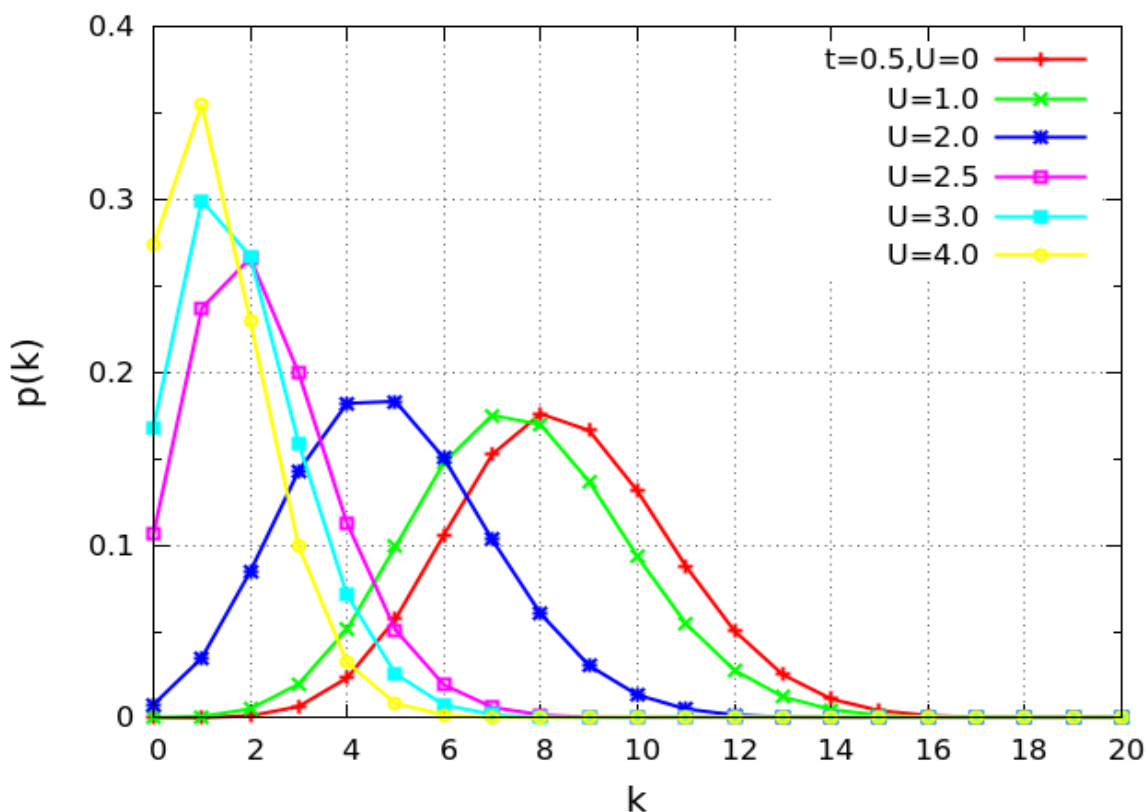


图 4.13 图形微扰展开阶数分布示意图

我们的抽样次数也提出了新的挑战。如图 4.13 我们就可以看出图形微扰展开阶数随  $U$  变化的示意图。

所以在  $U$  较小的时候，我们的计算存在一定的误差。此外，从大量的计算实践中我们也很明显的可以得出，当  $U$  较小时，系统处于金属相时的计算时间要高于系统处在绝缘相时的计算时间。自此，我们的单轨道 Hubbard 模型 Mott 金属—绝缘相变就分析结束了。



## 5. 平方晶格的金属—绝缘相变

在上一章我们已经向大家介绍了 DMFT 自洽循环中 Bethe 晶格的构造以及此晶格上单带 Hubbard 模型的金属—绝缘相变。在这一章中，我们将对上一章的问题更深一步，我们将这一章的内容分为如下几个部分：

第 5.1 节将介绍一般晶格的构造方法，并给出二维平方晶格的构造过程，当我们构造平方晶格之后，就可以在此基础上就行进一步的计算，并简要讨论此金属—绝缘相变是否是一级相变。

第 5.2 节我们将给出对平方晶格两轨道 Hubbard 模型的计算，并从中寻找轨道选择 Mott 金属—绝缘相变。

### 5.1 平方晶格的构造

#### 5.1.1 对布里渊区积分法构建自洽方程

在上一章之所以我们选用 Bethe 晶格作为研究对象，就是在于它的拓扑结非常特殊，在研究中具有它的方便性（具有递归的特征）和参考性（研究无序相互作用）。但是对于更一般的晶格我们该如何去构造呢？

正如第 2 章动力学平均场自洽方程所说的那样，如果我们知道晶格的态密度，就可以根据希尔伯特变换以及倒数函数求出格林函数。对于比平方晶格更普通的方晶格来说，假设晶格常数为 1，维度为  $d$ ，我们得到：

$$\varepsilon_k = -\frac{2t}{\sqrt{2d}} \sum_{i=1}^d \cos k_i \quad (5.1)$$

得到能量色散关系之后，我们就可以计算它的态密度：

$$D(\varepsilon) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) = \langle \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \rangle \quad (5.2)$$

因为 (5.2) 式中包含着  $\delta$  函数，要数值求解的话必须采用  $\delta$  函数的其他形式：

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 + x^2} \quad (5.3)$$

但是在本次测试中，我们并没有采取求态密度的方法构造晶格，而是采用直接对布里渊积分的形式进行平方晶格自洽方程的构造：



$$G(iw_n) = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \frac{1}{iw_n + \mu - \varepsilon_k - \Sigma(iw_n)} dk_x dk_y \quad (5.4)$$

通过上面这个式子我们就得到了虚频格林函数与自能函数的关系，使函数得以更新，构成 DMFT 自洽循环的一部分。

### 5.1.2 程序测试

当我们用对布里渊区积分的方法构成 DMFT 自洽循环的一部分之后，我们在此基础上进行了单轨道二维平方晶格的测试。

我们选取反温度  $\beta=16$ ，跃迁系数  $t=1$ 。同样采用单带半满的情况，此时化学势  $\mu=\frac{U}{2}$ 。我们分别测试了  $U=0,1,2,4,6,8,10,12$  这八组数据。为了检测我们程序的可靠性，我们将我们得到的谱函数与精确对角化方法这种方法得到的谱函数进行对比。如图 5.1 所示，我们展示了六组数据，在  $U$  较小的时候，我们看到体系也是出于金属相，在费米能级附近有电子的占据。随着  $U$  的不断增大，费米面附近的电子密度逐渐降低，准粒子峰逐渐消失，Hubbard 峰的距离逐渐增大。同时由于我们的体系是单带半满下的情况，所以位于费米面上下的带具有对称性，也就是所谓的电子—空穴对称性。注意图中红色曲线部分为精确对角化方法给出的结果<sup>①</sup>，我们可以清楚的看出，红色曲线由一系列的尖峰构成，这些尖峰是分立的，所以精确对角化的分立谱函数中蕴含着非常多的物理，但是这些分立的尖峰来观察谱函数并不是一件非常直观的过程，这也是精确对角化方法在我们观察谱函数时所遇到的苦难。反之，我们的量子蒙特卡洛给出的连续曲线谱函数就非常的直观，因此在量子蒙特卡洛方法在研究 Mott 金属—绝缘相变细节问题时将变得非常受大家的亲睐。从图中我们可以清楚的看出，我们两种方法所得到的谱函数非常的一致。这也间接说明我们方法的正确性。但是这其中也存在一个问题，从谱函数随电子库仑相互作用  $U$  变化的过程中去看，当我们的  $U=10$  时，从精确对角化的方法中我们已经得到了一个较小的能隙，此时说明体系已经进入了绝缘相，发生了 Mott 金属—绝缘相变。但是我们的连续时间量子蒙特卡洛方法所得到的谱函数在费米面附近还是存在一个小的准粒子峰，这说明我们的体系还是处在金属相，并没有发生说预期的金属—绝缘相变。

①此 ED 算法的计算与数据由中科院物理所 T03 组师姐林赫羽提供。



我们不禁要思考，就不知道到底是精确对角化方法在提前估计了金属—绝缘相变的相变点还是我们的连续时间量子蒙卡估计的不准确还是这其中蕴含着别的物理现象。

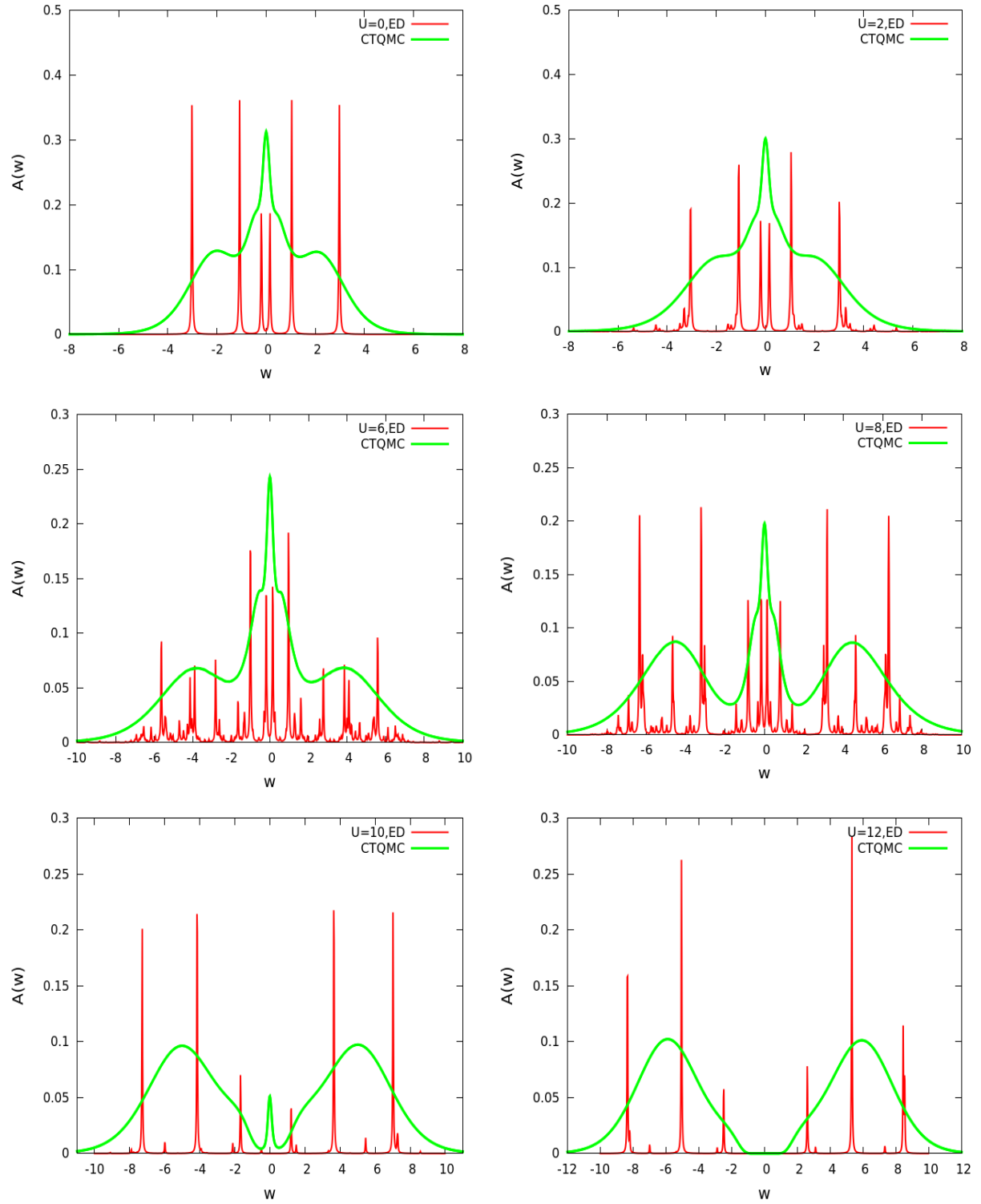


图 5.1 平方晶格谱函数  $A(\omega)$  随  $U$  变化示意图



在 2005 年 R.Arita 与 K.Held 的工作中，他们就讨论了 Mott-Hubbard 相变是一级相变还是二级相变<sup>[65,66]</sup>。很早之前 Liebsch 就观察两带 Hubbard 模型每个带各自发生了一阶金属—绝缘相变。在统计物理里，艾伦费斯特（Ehrenfest）在 20 世纪 30 年代就提出了相变的分类方案，其中一级相变是在相变点两相的化学势相等，化学势的一级偏微商不相等。二级相变在相变点，两相的化学势和化学式的一级偏微商全部相等，但化学势的二级偏微商不相等。我们知道与一级相变相比，二级相变没有两相共存，也没有亚稳态。因此我么就在考虑这个问题，是不是在  $U=10$  的附近，我们也可以观察到两相共存的状态，即从不同的状态出发，我们就可以得到不同的稳定状态。在我们的程序中，我们可以用不同状态的杂化函数作为初始输入，比如我们从绝缘相出发就是将绝缘态的杂化函数带入 DMFT 循环的初始条件中，同样的，从金属相出发就是将金属态的杂化函数带入自洽循环初始条件。在 R.Arita 与 K.Held 的文章里，他们就提到，绝缘相是一个亚稳态的相，我们也可以想象，当只有我们从亚稳态绝缘相的初始杂化函数出发，才有可能使体系最终落在绝缘相上。如图 5.2 所示，在  $U=10.54$  时，我们从不同的相出发就得到了不同的体系状态，其中绿线表示绝缘相，红线表示在费米面附近好有少量的粒子状态，此时还是具有金属的某些特性。换句话说，就是在  $U=10.54$  时，我们发现了金属

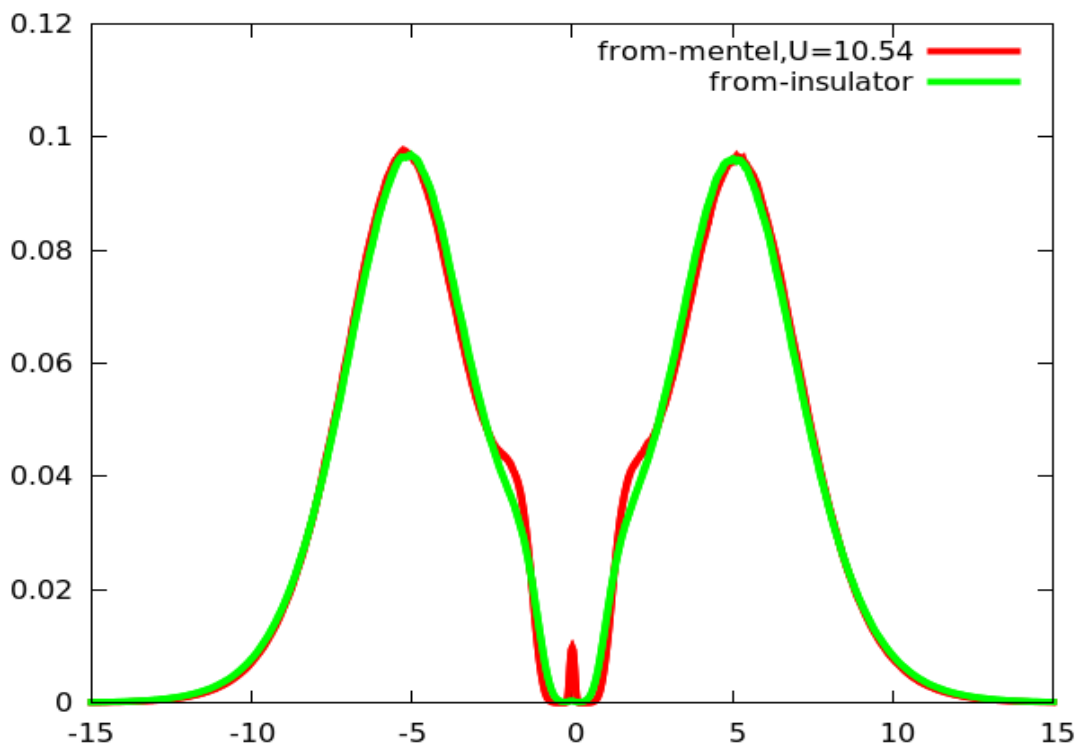


图 5.2 金属—绝缘相变两相共存





相与绝缘相的共存，这也说明了二维平方晶格的 Mott—Hubbard 相变是一级相变。这也是我们所采用连续时间量子蒙特卡洛方法在研究金属—绝缘相变时优于严格对角化方法的原因，我们的方法可以更细节更直观的表现出相变的某些特性。

## 5.2 选择轨道 Mott 金属—绝缘相变

在前面的研究中，我们已经对单轨道的 Mott 金属—绝缘相变有了一定程度的理解。我们分别在 Bethe 晶格与二维平方晶格上观察到了相变的过程，并简要说明了此相变是一个一级相变。但是我们的讨论只是一个简单的分析，其中还是有些问题等待以后的具体深入，比如我们从绝缘相出发有时会得到一个金属相，对应的此时若从金属相出发对应的确是一个绝缘相。我们猜测可能是因为蒙卡包含量子涨落的原因，导致结果从一个相出发演化至另一个相，这些不确定性就在共存相时通过蒙卡过程的随机性给表现出来了，具体的分析可以参考 R.Arita 与 K.Held 等其他的相关文献[65]。

### 5.2.1 两轨道金属—绝缘相变基本哈密顿量

下面我们开始讨论更为复杂的选择轨道 Mott 金属—绝缘相变。选择轨道 Mott 金属—绝缘相变的提出是为了解释某些材料的电子混合性质。在这种材料中，一部分导带电子具有巡游性质，表现出金属性，另一些导带电子则表现出局域性。这种奇特的物理性质引起了物理学家们广泛的关注，为了解释这种现象，我们提出了一系列的机制，选择轨道 Mott 转变的概念也就这样被提出来了<sup>[67-81]</sup>。一般情况下，为了方便，我们先研究最为简单的两轨道 Hubbard 模型。我们写出两带 Hubbard 模型的哈密顿量为：

$$\begin{aligned}
 H = & -\sum_{m=1}^2 t_m \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \hat{c}_{im\sigma}^\dagger \hat{c}_{jm\sigma} + U \sum_{im\sigma} \hat{n}_{im\uparrow} \hat{n}_{im\downarrow} \\
 & + \sum_{i,\sigma < \sigma'} (U' - \delta_{\sigma\sigma'} J) \hat{n}_{i1\sigma} \hat{n}_{i2\sigma'} \\
 & - \frac{J}{2} \sum_{i\sigma, l \neq m} \hat{c}_{il\sigma}^\dagger \hat{c}_{il\bar{\sigma}} \hat{c}_{im\bar{\sigma}}^\dagger \hat{c}_{im\sigma} - \frac{J}{2} \sum_{i\sigma, l \neq m} \hat{c}_{il\sigma}^\dagger \hat{c}_{il\bar{\sigma}}^\dagger \hat{c}_{im\sigma} \hat{c}_{im\bar{\sigma}}
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

在上面的式子中， $m$  代表能带指标， $\hat{c}^\dagger$  代表电子的产生算符， $\hat{c}$  代表电子的湮灭算符。 $U'$  代表轨道间的库仑相互作用，表现为轨道间电子的库仑排斥相互作用。 $U$  代表轨道内的相互作用，表示电子在同一个格点上自旋向上与自旋向下电子之间很强的排斥相互作用。 $J$  为 Hund 交换相互作用，上式的最后两项分别代表自旋翻转项和对跃迁项。在



具有  $SU(2)$  对称性电子中，我们选取  $U'=U-2J$ ，这样我们的哈密顿量就具有旋转对称性，这样的形式就被称为广义相互作用的形式。但是我们现在的程序还不具有广义相互作用的形式，相应的程序还在编写之中。因为广义相互作用具有较严重的负符号问题，要解决这个问题，我们就需要将我们的程序就进一步的改进，采用更为复杂的计算方法。现在我们采用的依然是研究单带问题中的密度—密度相互作用。密度—密度相互作用就不存在这样的负符号问题，所以开发此程序也较为简单。但是采用密度—密度相互作用就不能考虑自旋翻转项与对跃迁项，因此采用这种算法展现出来的物理现象就没有那么的丰富，但是依然可以看到选择轨道 Mott 金属—绝缘相变的精髓。

### 5.2.2 程序测试

在此次程序测试中，我们将两带的带宽选择为不同的值，其中宽带的跃迁系数  $t=1$ ，窄带的跃迁系数为  $t=0.5$ 。然后我们选取了 3 组不同的 Hund 交换相互作用  $J$ ，每组  $J$  中又选取了不同的  $U$ ，从而研究相变与  $U$  的关系。首先我们看  $J=1$  时候的情形，由于我们采用  $U'=U-2J$  这个限定关系，所以我们的  $U$  值最小取为 2，然后依次逐渐增大。从测试结果中我们可以看出带宽是发生选择轨道 Mott 金属—绝缘相变的一个决定性因素，窄带由于带宽小，所以先从金属相进入绝缘相。当  $U$  不断的增大宽的那个带也从金属相也进入了绝缘相。例如在  $J=1$  时，我们看到当  $U=1$  的时候，窄带和宽带都处在金属相之中，在费米面附近有很高的准粒子峰，此时的电子具有很高的巡游性质。在  $U$  一直增大到  $U=6$  时，准粒子峰的高度不断下降，Hubbard 峰越来越明显。当  $U$  增大到  $U=7$  时，窄带的能隙被打开，但是此时我们的宽带依然处在金属相当中，我们此时就可以认为我们观察到了选择轨道 Mott 金属—绝缘相变。随着  $U$  的进一步增大，窄带的能隙将打开的越来越大，宽带也逐渐向绝缘相演变，在  $U=11$  时，很明显两带都进入了绝缘相。这样我们就观察到了选择轨道 Mott 金属—绝缘相变的全过程。这个过程也是由于  $U$  的增大导致的，只不过是窄带和宽带发生相变的  $U$  不同而已。也就是说我们分别的观察到了两个带各自发生了 Mott 金属—绝缘转变，但是具体的这两个带是如何相互影响的，我们这里还无法具体的观察出更为细节过程。在以后的研究中，我们将继续深入探讨这个问题，看看窄带和宽带是因为什么机制相互影响着的。如图 5.3 所示，我们就给出了  $J=1$  时谱函数随  $U$  变化的示意图。

前面我们已经提到，准粒子权重  $Z$  可以很准确的体现出金属—绝缘相变的相变过程。因此我们继续采用 (4.12) 式



$$Z \approx \frac{1}{1 - \frac{\Im \Sigma(i\omega_0)}{\omega_0}}$$

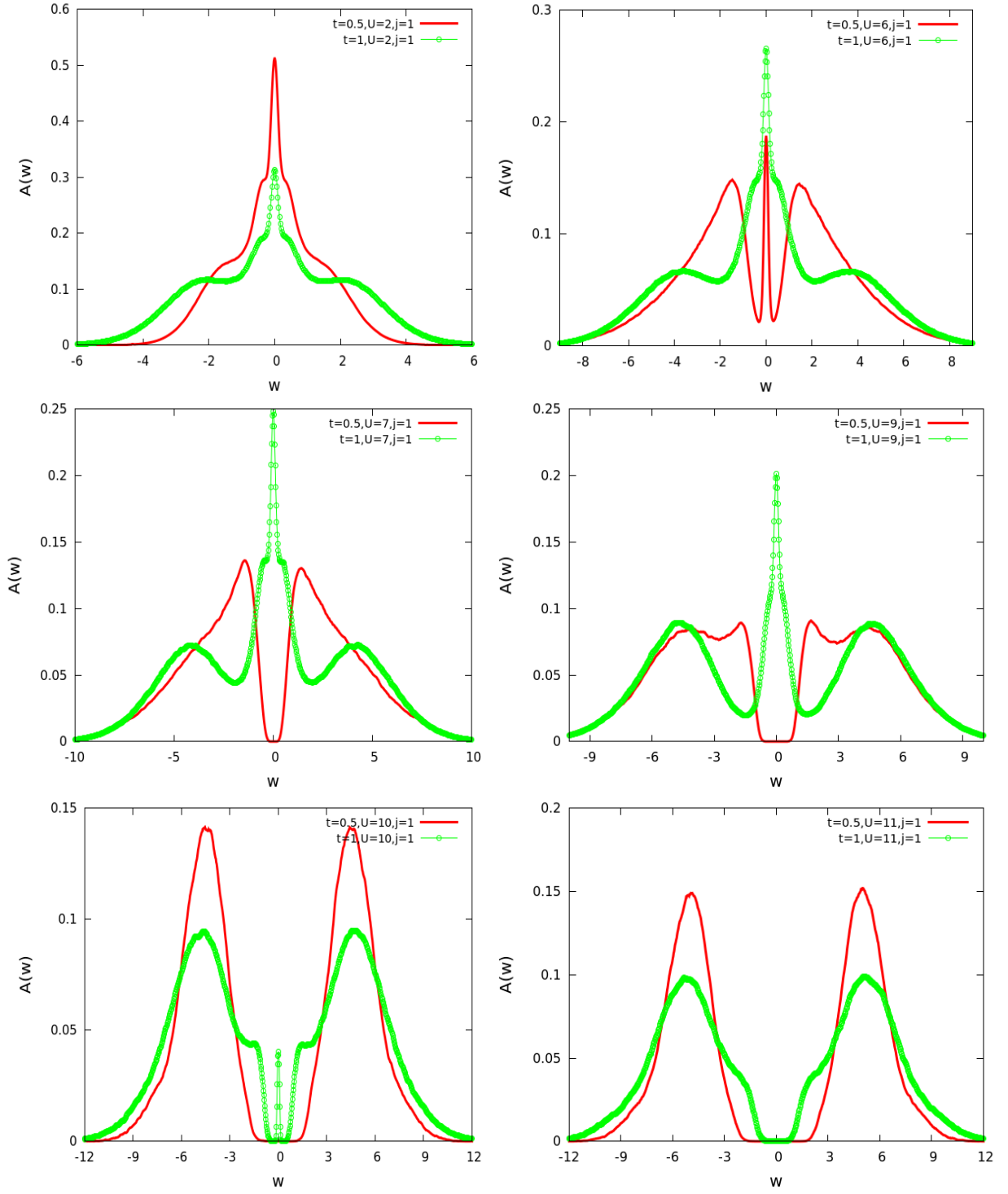


图 5.3 选择轨道金属—绝缘相变 ( $J=1$ )



来计算准粒子权重。我们做出两轨道的准粒子权重随  $U$  的图如图 5.4 所示，其中红色曲线表示窄带的准粒子权重  $Z$  随  $U$  的变化示意图，绿色曲线代表宽带的准粒子权重随  $U$  变化示意图。此时对应着  $J=2$  的情形，我们看到  $J=2$  时，当  $U=6$  时，窄带就进入了绝缘相，此时宽带处在金属相，我们可以说此时我们观察到了选择轨道金属—绝缘相变。我们继续增大  $U$ ，当  $U=10$  时，宽带和窄带都进入了绝缘相。我们再将此结果与  $J=1$  的情形进行对比， $J=1$  时， $U=7$

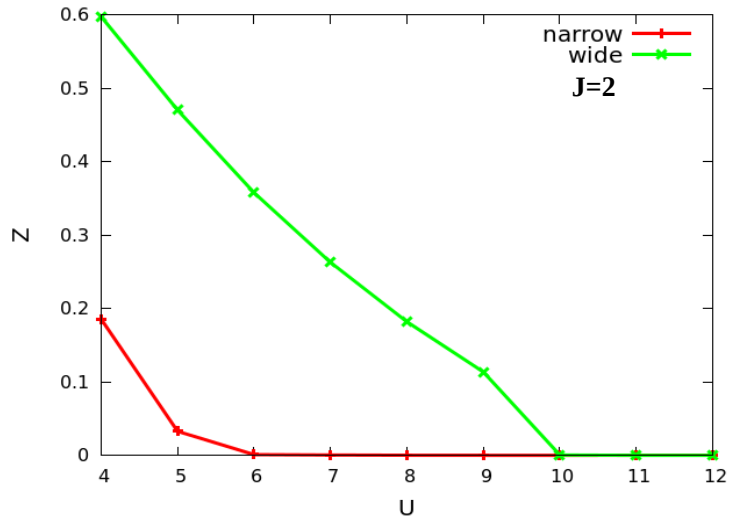


图 5.4 两轨道准粒子权重  $Z$  随  $U$  变化示意图

才发生窄带的转变比  $J=2$  时  $U=6$  要大。同样的宽带的情形也正是如此。我们可以看出  $J$  的增大有利于选择 Mott 金属—绝缘相变的到来。如图 5.5 我们还给出了  $J=3$  时的谱函数随  $U$  变化在相变点附近的示意图，我们清楚的看到，在  $U=6$  时窄带就已经进入了绝缘相，不存在金属相的情况。我们分析可知，交换作用  $J$  越大，代表着电子波函数交叠产生的相互作用越强，有利于绝缘相的形成。

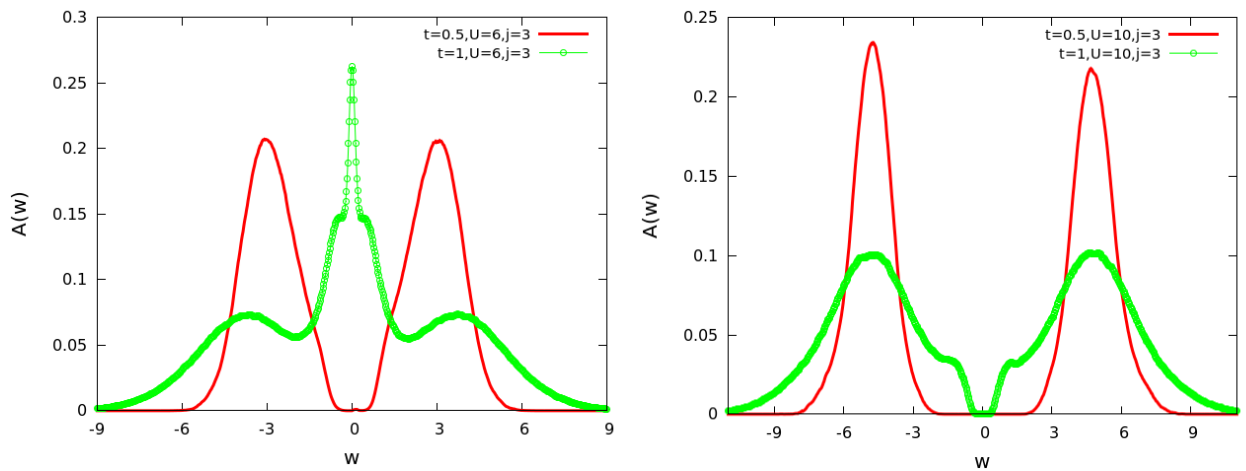


图 5.5  $J=3$  时的谱函数在相变区示意图

在这里，我们不再对两轨道的 Mott 金属—绝缘相变是一级相变还是二级相变进行讨论。由于我们程序密度—密度相互作用算法的局限性，我们也不在对选择轨道 Mott—Hubbard 转变是否融合为一个单一的相变的具体细节进行讨论。我们在 R.Arita 与



K.Held 的工作中就可以看到在考虑全 Hund 交换作用的情况下, 选择轨道 Mott 金属—绝缘相变是一级相变, 且两个轨道的相变是各不相同的, 并不会融合为单一的一级相变。通过我们前面的工作, 我们用基于强耦合展开的连续时间量子蒙特卡洛对两轨道二维平方晶格的选择轨道 Mott 金属—绝缘相变进行了研究, 首先是证实了带宽驱动的 Mott 转变, 然后进一步证实  $U$  是 Mott 相变发生的决定性因素, 最后还说明了 Hund 相互交换作用  $J$  有利于 Mott 转变的形成。至此, 我们的工作就基本完成了。



## 6. 总结与展望

在此次毕业设计中，我们学习和应用了研究强关联电子体系非常广泛和有效的动力学平均场理论。前面我们已经提到这种新方法开创于上个世纪末，由于它具有非常大的优势，在短短的几十年间，已经成为求解强关联体系最有力的工具。量子杂质模型是动力学平均场理论的核心部分，而量子杂质模型的数值计算更是在强关联体系中取得了一系列突飞猛进的成就，和实验上的符合也相当的成功。

因此在我的工作中，我主要学习了动力学平均场理论的基本知识，对 DMFT 自洽循环有了更进一步的认识。在对量子杂质模型理解的基础上，着重对基于强耦合展开的连续时间蒙特卡洛算法进行了解，在基于前人工作成果的基础上学习自己编写 CT-HYB 程序。目前对程序总体框架已经把握，并开始对晶格够建的部分进行修改和扩展，用不同的方法完成了 Bethe 晶格与二维平方晶格的构建。还将单带 Hubbard 模型的量子杂质模型求解器扩展为两个带宽不同两带量子杂质模型求解器。

在实际的程序测试与应用上，我们用量子杂质求解器求解了 Bethe 晶格单带 Hubbard 模型，通过对格林函数、自能函数、谱函数、准粒子权重的分析，完成了对单带 Mott-Hubbard 转变的研究。此后我们还研究了二维平方晶格上的单带与两带 Hubbard 模型。为了展示我们 CT-HYB 算法的可靠性与优越性，我们将得到的结果与精确对角化算法 (ED) 进行比较，发现我们结果的一致性。我们还从谱函数的对比上看，展示了我们算法对谱函数观察的直观性。在单带 Hubbard 模型的情况下，我们还简要分析了 Mott 金属-绝缘相变是一级相变。在两带 Hubbard 模型的研究中，我们取了跃迁系数  $t=1$  的宽带和  $t=0.5$  窄带的情况，发现带宽不同导致的选择轨道 Mott-Hubbard 转变，随着  $U$  的不断增大，窄带先进入绝缘相，宽带仍然为金属相，最后到两个带都转变为绝缘相。通过对上面几个模型的测试，我对其中的理论与程序的把握和理解都更进了一步，也看到了强关联电子体系一些新奇的物理现象。

但是现在我们的程序还只是仅仅考虑了密度-密度相互作用，没有包含全部的 Hund 交换相互作用，因此我们下一步的目标就是将密度-密度相互作用推广到包括全部 Hund 交换相互作用的这种广义相互作用程序的开发。这其中我们要克服我们必然要遇到的负符号问题。此外，我们还需要对我们的程序进行进一步的改进，我们还要把它推广到多个轨道每个轨道都具有不同带宽的情形，不同轨道间具有不同相互作用  $U$  的情形，甚至是否可以考虑带与带之间跃迁的问题以及考虑多个格点的情况。这些推广是困





难的，需要我们一步一步的去解决。

研究多体问题一般我们可以从两种角度去考虑，一种是从费米面附近的电子态出发，构造相应的哈密顿量，这也就是我们量子杂质模型采用的方法。还有一种方法就是从给定的晶格参数与结构出发，通过第一性原理的计算获得相关的物理量。由于我们的量子杂质求解器仅仅是一个求解器而已，对于简单的晶格我们可以给定自设的 DMFT 自洽循环与初识的杂化函数作为输入。但是对于实际的很多复杂晶格来说，我们的 DMFT 自洽循环就不好构造，用任意的杂化函数作为初始的输入收敛可能也会比较慢。同样的，第一性原理计算也是应用了局域密度近似（LDA），在强关联体系  $U$  较大时，所得到的结果也并不是十分的可靠，与实验上数据对比也有很多的不同。我们就在想，能不能把 LDA 与 DMFT 结合起来。

现在的强关联体系的研究中，已经有越来越多的人把 LDA+DMFT 结合起来了，并在研究中取得了非常大的优势。现在我已经开始熟悉 WIEN2K，下一步就是用正交基的变换与 WIEN2K 提供的初始数据作为量子杂质求解器的初始输入，把两种方法结合起来，用于强关联体系的研究。



## 致 谢

首先我要衷心的感谢湖南大学这四年来对我的栽培，特别是物理与微电子科学学院刘全慧教授对我的言传身教。刘老师充满活力，思维活跃，治学严谨，工作热情，使我在学习科研的道路上获益颇多。刘老师对学生的要求严格，对工作一丝不苟，在生活上关心我们，在我们遇到困难时给我们很大的鼓励与希望。刘老师在理论物理上造诣很深，阅历丰富，物理直觉非常优秀，在科研工作中给了我很大的启发，但凡我的每一点进步，都与刘老师的教导有关。刘老师带着我进入理论物理的门槛，推荐我参加中科院理论物理研究所 2012 年统计物理与复杂系统暑期学校，让我第一次在学术交流上开阔视野。刘老师鼓励、帮助我去中科院物理所理论物理组继续深造，刘老师对我所付出的，我都会铭记在今后的科研道路上。

在这里，我还要感谢应用物理系王玲玲教授、陈克求教授、胡望宇教授、余亚斌教授、邓辉求教授、胡慧芳教授、唐黎明教授和刘天贵老师的悉心教导，感谢院领导对我生活上和学习上的关怀。

在这里我还要特别感谢中科院物理所的老师 and 领导，特别是杨义峰研究员对我的学习上的指导与帮助。杨义峰老师对我非常关心，在忙碌的科研工作中也不忘抽出大量时间指导我，改正我身上不适合科研的坏习惯，让我尽快的进入到科研的状态，让我非常的感动。在北京中科院物理所两个多月的时间里，我获得了巨大的进步。此外，我还要感谢组里的师兄、师姐对我耐心的帮助。

最后我还要感谢我的父母，我的父母善良、勤劳、踏实肯干，我的性格里的斑斑点点无不闪现着我父母的特点。感谢 23 年前他们把我带到了这个世上，父母的养育之恩我永世难忘。



## 参考文献

- [1] Patrick A. Lee, Naoto Nagaosa, and Xiao-Gang Wen. Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity[J]. Rev. Mod. Phys., 2006, 78:17-85.
- [2] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, and Marcelo J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions[J]. Rev. Mod. Phys., 1996, 68:13-125.
- [3] 黄理. 强关联电子体系的 LDA+DMFT 第一性原理计算方法[D]. 北京: 中国科学院研究生院, 2012.
- [4] F. Mancini and A. Avella. The Hubbard model within the equations of motion approach[J]. Adv. Phys., 2004, 53:537-768.
- [5] Martin C. Gutzwiller. Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals[J]. Phys. Rev. Lett., 1963, 10:159-162.
- [6] Raymond Fresard, Johann Kroha, and Peter Wolfle. Strongly Correlated Systems Theoretical Methods[M], volume 171 of Springer Series in Solid-State Sciences, chapter 3, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2012: 65-101.
- [7] Kuramoto, Y. and T. Watanabe. Theory of momentum-dependent magnetic response in heavy-fermion systems[J]. Physica B, 1987, 148:80-83.
- [8] Metzner, W. and D. Vollhardt. Correlated Lattice Fermions in  $d=\infty$  Dimensions[J]. Phys. Rev. Lett., 1989, 62:324.
- [9] Muller-Hartmann, E. Correlated fermions on a lattice in high dimensions[J]. Z. Phys. B, 1989, 74:507.
- [10] Brandt, U. and C. Mielsch. Thermodynamics and correlation functions of the Falicov-Kimball model in large dimensions[J]. Z. Phys., 1989, 75:365.
- [11] Brandt, U. and C. Mielsch. Z. Phys., 1990, 79:295.
- [12] Brandt, U. and C. Mielsch. Z. Phys., 1991, 82:37.
- [13] Ohkawa, F. J. Electron Correlation in the Hubbard Model in  $d=\infty$  Dimension[J]. J. Phys. Soc. Jpn. 1991a, 60:3218.
- [14] Ohkawa, F. J. Simulation of the Electron-Phonon Interaction in Infinite Dimensions [J]. Prog. Theor. Phys. (Suppl.), 1991b, 106:95.
- [15] Emanuel Gull, Andrew J. Millis, Alexander I. Lichtenstein, Alexey N. Rubtsov, Matthias Troyer, and Philipp Werner. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models[J]. Rev. Mod. Phys., 2011, 83:349-404.



- [16]J. E. Hirsch and R. M. Fye, Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals[J]. Phys. Rev. Lett., 1986, 56:2521.
- [17]Caffarel M. and W. Krauth. Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity[J]. Phys. Rev. Lett., 1994, 72:1545.
- [18]K. G. Wilson. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem[J]. Rev. Mod. Phys., 1975, 47:773.
- [19]S. R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups[J]. Phys. Rev. Lett., 1992, 69:2863.
- [20]U. Schollwöck. The density-matrix renormalization group[J]. Rev. Mod. Phys., 2005, 77:259.
- [21]R. Bulla, T. A. Costi and T. Pruschke. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. Rev. Mod. Phys., 2008, 80:395.
- [22]M. Caffarel and W. Krauth. Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity[J]. Phys. Rev. Lett., 1994, 72:1545.
- [23]林宗涵.热力学与统计物理学.北京:北京大学出版社[M].2007:172-178.
- [24]J. E. Hirsch and R. M. Fye. Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals. Phys. Rev. Lett., 1986, 56:2521.
- [25]M. Jarrell. Hubbard model in infinite dimensions: A quantum Monte Carlo study[J]. Phys. Rev. Lett., 69:168-171, 1992.
- [26]Shiro Sakai, Ryotaro Arita, Karsten Held and Hideo Aoki. Quantum Monte Carlo study for multi-orbital systems with preserved spin and orbital rotational symmetries[J]. Phys. Rev. B, 2006, 74:155102.
- [27]Philipp Werner, Armin Comanac, Luca de' Medici, Matthias Troyer, and Andrew J. Millis. Continuous-Time Solver for Quantum Impurity Models[J]. Phys. Rev. Lett., 2006, 97:076405.
- [28]D. Handscomb. The Monte Carlo method in quantum statistical mechanics[J]. Proc. Cambridge Philos. Soc., 1962, 58:594.
- [29]D. Handscomb. A Monte Carlo method applied to the Heisenberg ferromagnet[J]. Proc. Cambridge Philos. Soc., 1964, 60:115.
- [30]A. W. Sandvik and J. Kurkijärvi. Quantum Monte Carlo simulation method for spin systems[J]. Phys. Rev. B, 1991, 43:5950.
- [31]N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov and I. S. Tupitsyn. Exact quantum Monte Carlo process for the statistics of discrete systems[J]. JETP Lett., 1996, 64:911.
- [32]B. B. Beard and U. J. Wiese. Simulations of Discrete Quantum Systems in Continuous



- Euclidean Time[J]. Phys. Rev. Lett., 1996,77:5130.
- [33]N. V. Prokof'ev and B. V. Svistunov. Polaron Problem by Diagrammatic Quantum Monte Carlo. Phys. Rev. Lett., 1998,81:2514.
- [34]N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov and I. S. Tupitsyn. Exact, Complete and Universal Continuous-Time Worldline Monte Carlo Approach to the Statistics of Discrete Quantum Systems[J]. Sov. Phys. JETP, 1998, 87:310.
- [35]S. M. A. Rombouts, K. Heyde and N. Jachowicz. Quantum Monte Carlo Method for Fermions, Free of Discretization Errors[J]. Phys. Rev. Lett., 1999,82:4155-4159.
- [36]A. N. Rubtsov, V. V. Savkin and A. I. Lichtenstein. Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions[J]. Phys. Rev. B, 72:035122, 2005.
- [37]F. F. Assaad and T. C. Lang. Diagrammatic determinantal quantum Monte Carlo methods: Projective schemes and applications to the Hubbard-Holstein model[J]. Phys. Rev. B, 2007, 76:035116.
- [38] Philipp Werner and Andrew J. Millis. Hybridization expansion impurity solver: General formulation and application to Kondo lattice and two-orbital models[J]. Phys. Rev. B, 2006, 74:155107.
- [39]Philipp Werner and Andrew J. Millis. Efficient Dynamical Mean Field Simulation of the Holstein- Hubbard Model[J]. Phys. Rev. Lett., 2007, 99:146404.
- [40]Philipp Werner and Andrew J. Millis. Dynamical Screening in Correlated Electron Materials. Phys. Rev. Lett., 2010,104:146401.
- [41]Andreas M. Lauchli and Philipp Werner. Krylov implementation of the hybridization expansion impurity solver and application to 5-orbital models[J]. Phys. Rev. B, 2009,80:235117.
- [42] Kristjan Haule. Quantum Monte Carlo impurity solver for cluster dynamical mean-field theory and electronic structure calculations with adjustable cluster base[J]. Phys. Rev. B, 2007, 75:155113.
- [43]E. Gull, P. Werner, O. Parcollet and M. Troyer. Continuous-time auxiliary-field Monte Carlo for quantum impurity models[J]. Europhys. Lett., 2008, 82:57003.
- [44]Junya Otsuki, Hiroaki Kusunose, Philipp Werner and Yoshio Kuramoto. Continuous-time quantum monte carlo method for the coqblin-schrieffer model[J]. J. Phys. Soc. Japan, 2007, 76:114707.
- [45] Emanuel Gull, Philipp Werner, Andrew Millis and Matthias Troyer. Performance analysis of continuous-time solvers for quantum impurity models. Phys. Rev. B, 2007, 76:235123.



- [46] N. Blumer. Efficiency of quantum Monte Carlo impurity solvers for the dynamical mean-field theory[J]. Phys. Rev. B, 2007, 76:205120.
- [47] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet and C. A. Marianetti. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory[J]. Rev. Mod. Phys., 2006, 78:865.
- [48] K. Held. Electronic structure calculations using dynamical mean field theory[J]. Adv. Phys., 2007, 56:829--926.
- [49] Li Huang, Yilin Wang, Liang Du and Xi Dai, User's Guide for Interacting Quantum Impurity Systems Simulating Toolkit, 2012.
- [50] P. W. Anderson. Localized Magnetic States in Metals[J]. Phys. Rev., 1961, 124:41.
- [51] T. Mizokawa and A. Fujimori. Unrestricted Hartree-Fock study of transition-metal oxides: Spin and orbital ordering in perovskite-type lattice[J]. Phys. Rev. B, 1995, 51:12880.
- [52] Landau, D. P. and K. Binder. A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics[M]. Cambridge, England: Cambridge University Press, 2000.
- [53] 盛骤, 谢世千, 潘承毅. 概率论与数理统计[M]. 北京: 高等教育出版社, 2008: 119-126.
- [54] Martin Eckstein, Marcus Kollar, Krzysztof Byczuk and Dieter Vollhardt, Hopping on the Bethe lattice: Exact results for densities of states and dynamical mean-field theory[J]. Phys. Rev. B, 2005, 71:235119.
- [55] D. Weaire and M. F. Thorpe. Electronic Properties of Amorphous Solid. I. A Simple Tight-Binding Theory[J]. Phys. Rev. B, 1971, 4:2508.
- [56] 阎守胜. 固体物理基础[M]. 北京: 北京大学出版社, 2011: 100-102.
- [57] M. Imada, A. Fujimori and Y. Tokura. Metal-insulator transitions[J]. Rev. Mod. Phys., 1998, 70:1039.
- [58] R. G. Moore et al. A Surface-Tailored, Purely Electronic, Mott Metal-to-Insulator Transition[J]. Science, 2007, 318:615.
- [59] 李正中. 固体物理[M]. 北京: 高等教育出版社, 2003.
- [60] Mark Jarrell and J. E. Gubernatis. Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data[J]. Phys. Rep., 1996, 269:133-195.
- [61] R. N. Sliver, D. S. Sivia, and J. E. Gubernatis. Maximum-entropy method for analytic continuation of quantum Monte Carlo data[J]. Phys. Rev. B., 1990, 41:2380.
- [62] R. N. Sliver, D. S. Sivia, J. E. Gubernatis and M. Jarrell. Spectral densities of the symmetric Anderson model[J]. Phys. Rev. Lett., 1990, 65:496.
- [63] J. E. Gubernatis, M. Jarrell, R. N. Siver and D. S. Sivia. Quantum Monte Carlo





- simulations and maximum entropy: Dynamics from imaginary-time data[J]. Phys. Rev. B., 1991,44:6011.
- [64]S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar and N. E. Bickers. Monte Carlo calculation of dynamical properties of the two-dimensional Hubbard model[J]. Phys. Rev. Lett., 1989, 63:1523.
- [65]R. Arita and K. Held. Orbital-selective Mott-Hubbard transition in the two-band Hubbard model[J]. Phys. Rev. B, 2005, 72:201102.
- [66]A. Liebsch. Mott Transitions in Multiorbital Systems[J]. Phys. Rev. Lett., 2003, 91:226401.
- [67]A. Liebsch. Single Mott transition in the multiorbital Hubbard model. Phys. Rev. B, 2004, 70:165103.
- [68]Philipp Werner and Andrew J. Millis. High-Spin to Low-Spin and Orbital Polarization Transitions in Multiorbital Mott Systems[J]. Phys. Rev. Lett., 2007, 99:126405.
- [69]V. I. Anisimov, I. A. Nekrasov, D. E. Kondakov, T. M. Rice and M. Sigrist. Orbital-selective mott-insulator transition in  $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ [J]. The European Physical Journal B, 2002, 25(2):191-201.
- [70]Akihisa Koga, Norio Kawakami, T. M. Rice and Manfred Sigrist. Orbital-selective mott transitions in the degenerate hubbard model[J]. Phys. Rev. Lett., 2004,92(21):216402.
- [71]Akihisa Koga, Norio Kawakami, T. M. Rice and Manfred Sigrist. Spin, charge and orbital fluctuations in a multiorbital mott insulator[J]. Phys. Rev. B, 2005, 72(4):045128.
- [72]L. de'Medici, A. Georges and S. Biermann. Orbital-selective mott transition in multiband systems: Slave-spin representation and dynamical mean-field theory[J]. Phys. Rev. B, 2005,72(20):205124.
- [73]Michel Ferrero, Federico Becca, Michele Fabrizio and Massimo Capone. Dynamical behavior across the mott transition of two bands with different bandwidths[J]. Phys. Rev. B, 2005, 72(20):205126.
- [74]R.Arita and K. Held. Orbital-selective mott-hubbard transition in the two-band hubbard model. Phys. Rev. B, 2005, 72(20):201102(R).
- [75]C. Knecht, N.Blümer,and P. G. J. van Dongen. Orbital-selective mott transitions in the anisotropic two-band hubbard model at finite temperatures. Phys. Rev. B, 2005, 72(8):081103(R).
- [76]Akihisa Koga, Norio Kawakami, T. M. Rice and Manfred Sigrist. Mott transitions in the multiorbital systems[J]. Physica B, 2005, 1366(16):359-361.



- 
- [77]Kensuke Inaba, Akihisa Koga, Sei Suga and Norio Kawakami. Phase diagram of orbitalselective mott transitions at finite temperatures[J]. J. Phys.Soc. Jpn., 2005,74(9):2393.
- [78]Luca de'Medici, S. R. Hassan, Massimo Capone and Xi Dai. Orbital-selective mott transition out of band degeneracy lifting[J]. Phys. Rev. Lett., 2009, 102(16):126401.
- [79]Tomoko Kita, Takuma Ohashi and Norio Kawakami. Mott transition in three-orbital hubbard model with orbital splitting[J]. Phys.Rev.B, 2011, 84(16):195130.
- [80]Akihisa Koga and Kensuke Inaba. Metal-insulator transition in the two-orbital hubbard model at fractional band fillings: Self-energy functional approach[J]. J. Phys. Soc. Jpn., 2007, 76(9):094712.
- [81]Eberhard Jakobi, Nils Blümer and Peter Dogen. Orbital-selective mott transitions in a doped two-band hubbard model[J]. Phys. Rev. B, 2009, 80(11):115109.



## 附录

### 附录 A 格林函数的解析延拓

格林函数 (Green's function) 法是凝聚态物理里常用的方法之一。在多体理论中, 格林函数又经常指各种形式的关联函数, 且有格林函数的极点就是准粒子的能谱。格林函数极点的实部是准粒子的能量, 极点的虚部的倒数是准粒子的寿命。

我们通常可以定义推迟格林函数为:

$$G_R(t, t') = -i\theta(t - t') \langle A(t), B(t')_{\pm 1} \rangle \quad (\text{A.1})$$

其中  $\theta(x)$  表示阶跃函数,  $\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$ 。在这里我们已经采用了约化标准, 即  $\hbar = 1$ 。

其中费米型为反对易关系, 角标取为 1; 玻色型为对易关系, 角标取为 -1。  $\langle \dots \rangle$  表示对系综的统计平均。

我们可以证明  $G_R(t, t') = G_R(t - t')$ , 因此  $G_R$  代表传播子, 表示在  $t'$  时刻  $r$  处的一个态或是粒子在  $t$  时刻传播到了  $r'$  处。

格林函数的虚部和实部之间还满足 Kramers-Kronig 关系:

$$\text{Re } G_R(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } G_R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (\text{A.2})$$

在海森堡绘景中, 我们考虑一个哈密顿量为  $H$ , 场算符为  $B$  的系统, 我们写出它的推迟格林函数为:

$$iG_R(t) = \langle [B(t), B^\dagger(0)]_{\pm} \rangle \quad t > 0 \quad (\text{A.3})$$

它的傅里叶变换(Fourier transform)为:

$$G_R(\omega) = \int_0^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega t} G_R(t) \quad (\text{A.4})$$

相应的谱密度(spectral density)为:

$$A(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G_R(\omega) \quad (\text{A.5})$$

前面我们已经提到, 大部分的蒙特卡洛方法得到的有限温度格林函数都是表示成虚时的形式, 我们将  $-it \rightarrow \tau$ , 就可以得到:

$$G(\tau) = \langle T_{\tau} B(\tau) B^\dagger(0) \rangle \quad (\text{A.6})$$

其中  $T_{\tau}$  为虚时编时算符。我们知道虚时格林函数具有周期性  $G(\tau) = \pm G(\tau + \beta)$ , 所以我



们同样可以写出它的傅里叶变换为：

$$G(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{-i\omega_n \tau} G(\tau) \quad (\text{A.7})$$

其中  $\omega_n$  表示松原频率(Matsubara frequencies) (取  $(2n+1)\pi/\beta$  表示费米子,  $2n\pi/\beta$  表示玻色子)。我们将谱密度带入可得：

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{-\tau\omega}}{1 \pm e^{-\beta\omega}} A(\omega) \quad (\text{A.8})$$

其中  $K(\tau, \omega) = \frac{e^{-\tau\omega}}{1 \pm e^{-\beta\omega}}$ , 正号表示费米子, 符号表示玻色子系统。

一般而言, 谱函数与实验观测量紧密相连。如果我们可以获得谱函数, 那么我们就可以将我们的蒙特卡洛模拟结果与实验数据联系的更加紧密。统计关联函数是很容易获得的, 但是我们要从中获得动力学信息一般而言并不这么容易。解析延拓(analytic continuation)就是为了从蒙特卡洛模拟方法得到的虚时关联函数获得实频的动力学信息。我们只需要得到谱函数  $A(\omega)$  就可以从公式(A.5)获得实频格林函数的虚部, 然后通过 Kramers-Kronig 关系获得格林函数的实部, 这样我们就获得了整个定义在实频上的格林函数。



## 附录 B 最大熵法求谱函数

从积分方程  $G(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega K(\tau, \omega) A(\omega)$  中获取谱函数  $A(\omega)$  是十分困难的。因为在  $\omega$  相对较大时,  $K(\tau, \omega)$  很小。此时给定  $G(\tau)$ , 对  $A(\omega)$  的估计可以有非常大的振荡范围。

为了解决这个问题, 我们就需要用到最大熵方法 (maximum entropy method, MEM)。这时我们得用到贝叶斯推理 (Bayesian inference) 来找到  $A(\omega)$ 。我们给定两个事件  $a$  和  $b$ , 根据贝叶斯定理, 我们有:

$$\Pr[a, b] = \Pr[a | b] \Pr[b] = \Pr[b | a] \Pr[a] \quad (\text{B.1})$$

其中  $\Pr[a]$  是事件  $a$  的概率,  $\Pr[a | b]$  是给定事件  $b$  下  $a$  发生的条件概率,  $\Pr[a, b]$  为联合概率。根据概率论的相关知识, 我们有:

$$\Pr[a] = \int db \Pr[a, b], \quad \Pr[a | b] = \frac{\Pr[a, b]}{\Pr[b]} \quad (\text{B.2})$$

归一化条件为:  $\int da \Pr[a] = 1, \int da \Pr[a | b] = 1$ 。

在我们这个问题中, 我们的事件就是  $\tilde{G}(\tau)$  和  $A(\omega)$ 。其中  $\tilde{G}(\tau)$  为我们对  $G(\tau)$  的估计值。我们将概率写为:

$$\Pr[A | \tilde{G}] = \Pr[\tilde{G} | A] \Pr[A] / \Pr[\tilde{G}] \quad (\text{B.3})$$

其中  $\Pr[A | \tilde{G}]$  叫做后验概率,  $\Pr[\tilde{G} | A]$  为 likelihood 函数,  $\Pr[A]$  为先验概率。我们的出发点就是找到一个  $A(\omega)$ , 使得  $\Pr[A | \tilde{G}]$  达到最大。

我们将(B.3)式对  $A$  进行积分, 于是得到:

$$\Pr[\tilde{G}] = \int DA \Pr[\tilde{G} | A] \Pr[A] \quad (\text{B.4})$$

这样我们就得到  $\Pr[\tilde{G}]$  只依赖与 likelihood 函数与先验概率的形式。从(B.3)式我们就可以清楚的看出它将后验概率的问题转化为了 likelihood 函数与先验概率的问题, 对于后面这两个概率我们是较熟悉和方便讨论的。

首先我们讨论 likelihood 函数的部分, 也就是要找到特定的  $A$  使得  $\Pr[A | \tilde{G}] \propto e^{-L}$  最大化。根据中心极限定理, 我们有:



$$e^{-L} = e^{-\chi^2/2} \quad (\text{B.5})$$

其中

$$\chi^2 = \sum_{i,j}^L (\tilde{G}_i - G_i) [C^{-1}]_{ij} (\tilde{G}_j - G_j), \quad \bar{G}_i = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \bar{G}_i^{(j)} \quad (\text{B.6})$$

C 为协方差矩阵，表示蒙特卡洛抽样过程中的误差信息，表示如下：

$$C_{ik} = \frac{1}{M(M-1)} \sum_{j=1}^M (\bar{G}_i - \bar{G}_i^{(j)}) (\bar{G}_k - \bar{G}_k^{(j)}) \quad (\text{B.7})$$

接着我们来看熵的先验概率部分， $\Pr[A|\tilde{G}] \propto e^{\alpha S}$ 。我们的出发点就是要找到熵 S 的最大值，其中  $\alpha$  为一个可调的参数。熵 S 的形式通常写为下面的形式：

$$S \equiv \int d\omega (A(\omega) - m(\omega) - A(\omega) \ln[A(\omega)/m(\omega)]) \quad (\text{B.8})$$

由 (B.3) 式我们可以知道，最终的  $\Pr[A|\tilde{G}]$  是上面两部分的乘积，也就是说  $\Pr[A|\tilde{G}] \propto e^Q$ ，其中：

$$Q = \alpha S - \frac{1}{2} \chi^2 \quad (\text{B.9})$$

对于给定的一个 A，我们要找到一个使  $\Pr[A|\tilde{G}]$  最大的 A( $\omega$ ) 就是去求 Q 的极大值：

$$\left. \frac{\delta Q}{\delta A} \right|_{A=\hat{A}} = 0 \quad (\text{B.10})$$

通过以上步骤，对于一个给定的参数  $\alpha$ ，我们找到最大的 Q，就可以确定谱函数 A( $\omega$ )。但是  $\alpha$  的选取要求合理，既不能过大也不能过小。当  $\alpha$  参数的取值太大，我们给出的谱函数就会过于平滑，失去一些物理细节，但是当  $\alpha$  参数选取过小时，那么蒙特卡洛抽样数据中的噪声就会影响到 A( $\omega$ )，使得 A( $\omega$ ) 出现非物理的振荡。如图 B.1 所示，我们分别选取了  $\alpha$  为 0.001, 0.005, 0.008 三组值。这三组值的选取也是我们在大量的计算中总结出来的，从图中我们可以看出当  $\alpha$  取为 0.005 和 0.008 时，我们用最大熵方法得出的谱函数并没有太大的区别。但是当  $\alpha$  取为 0.001 时，曲线的振荡非常明显，与实际情况相差的非常明显。那么我们该如何正确选取这个  $\alpha$  的值呢？



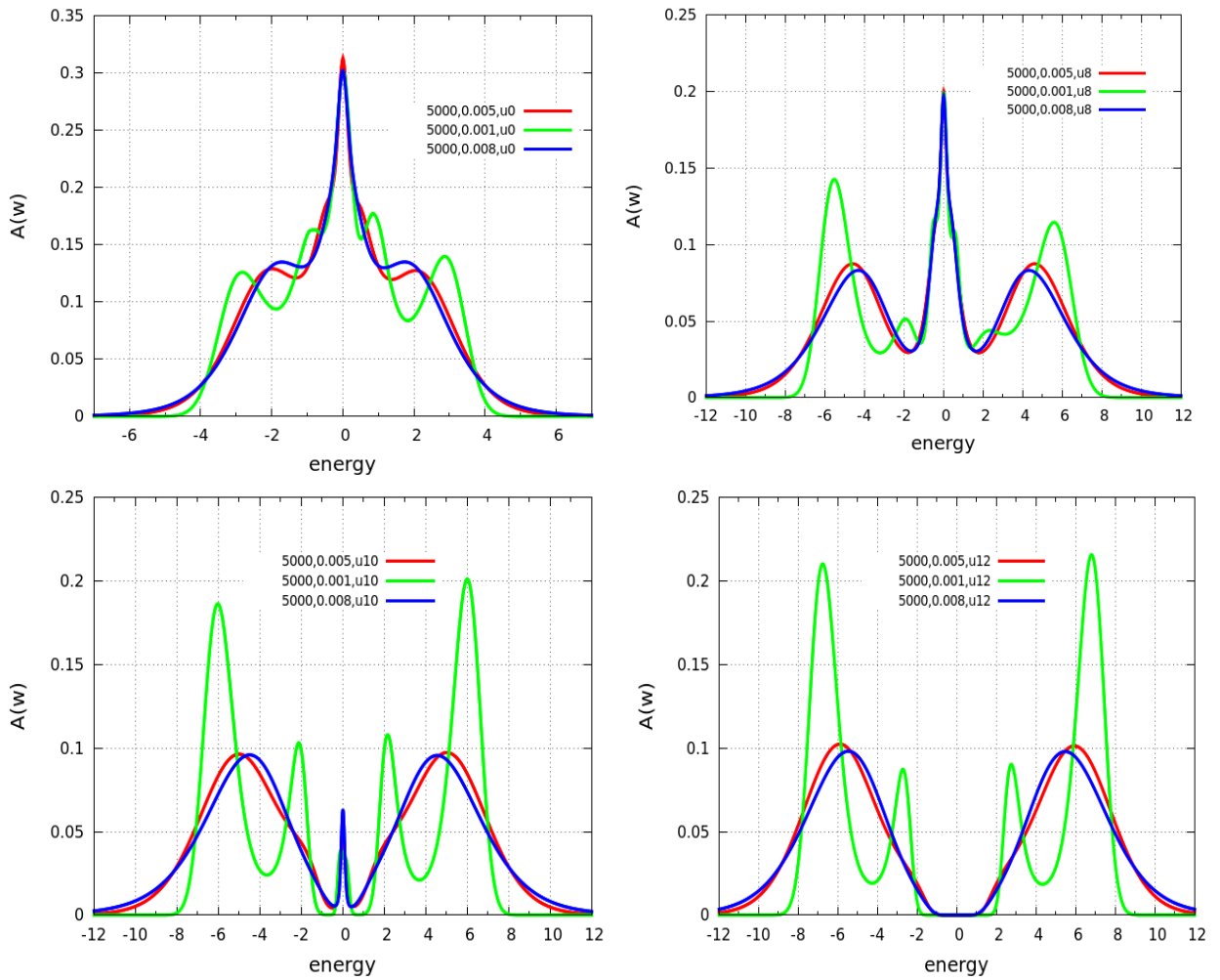


图 B.1 不同  $\alpha$  对应  $A(\omega)$  示意图

有一种被称为 historic 最大熵的方法。在这种方法下,我们选取的  $\alpha$  必须使得  $\chi^2=N$ 。其中  $N$  为实轴频率点的数目。在一般计算下,采用 historic 最大熵的方法还是可以获得比较准确的谱函数  $A(\omega)$ 。