1.16. Расчет функций линейного отклика и плотности состояний

Отклик системы на внешнее поле.
Плотность состояний

Отклик системы на внешнее поле

- При численном анализе квантовых систем конечной целью расчета часто являются такие физические величины, как плотность состояний, проводимость, восприимчивость и т.д. Это достаточно сложные корреляторы, для расчета которых, как правило, требуется комбинировать результаты расчетов с различным числом частиц в системе
- Оператор тока в представлении чисел заполнения для системы реш

$$j_x = -\frac{\partial H}{\partial A_x} = \frac{ite}{\hbar c}\sum_i \left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} e^{\frac{2\pi i\Phi}{\Phi_0 L}} - a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i e^{-\frac{2\pi i\Phi}{\Phi_0 L}}\right) = (\Phi \to 0) \cong$$

$$\cong \frac{ite}{\hbar c}\left(\sum_i \left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} - a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i\right) + \frac{2\pi i\Phi}{\Phi_0 L}\sum_i \left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} + a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i\right)\right)$$

- Парамагнитная часть плотности тока и плотность кинетической энергии движения то

$$j_x^P(i) = \frac{it}{\hbar c}\left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} - a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i\right);$$

$$k_x(i) = -t\left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} + a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i\right)$$

Отклик системы на внешнее поле

- Векторный потенциал:

$$\vec{A}_x(i) = \frac{\Phi \vec{e}_x}{L}; \quad j_x(i) = -\frac{\partial H}{\partial A_x(i)} = e j_x^P(i) + e^2 k_x(i) A_x(i)$$

- Соотношение Кубо: если на систему действует внешнее возмущение

$$V(t) = -x f(t)$$

то имеет место линейное соотношение между фурье-компонентами среднего значения и силы:

$$\bar{x}(\omega) = \alpha(\omega) f(\omega)$$

- Обобщенная восприимчивость:

$$\alpha(\omega) = \frac{i}{\hbar}\int_0^\infty e^{i\omega t}\langle x_0(t)x_0(0) - x_0(0)x_0(t)\rangle\, dt;$$

$$x_0(t) = e^{itH_0/\hbar} x e^{-itH_0/\hbar}$$

- Потенциал возмущения за счет внешнего поля:

$$V = -\sum_i \left(e j_x^P(i) A_x(i) + \frac{e^2 k_x(i) A_x^2(i)}{2} \right)$$

Отклик системы на внешнее поле

- Фурье-компоненты векторного потенциала и тока:

$$A_x(l,t) = \mathrm{Re}\left(A_x(q,\omega)e^{i\vec{q}\vec{l}-i\omega t}\right);$$
$$j_x(l,t) = \mathrm{Re}\left(j_x(q,\omega)e^{i\vec{q}\vec{l}-i\omega t}\right)$$

- С учетом соотношения Кубо:

$$\langle j_x(q,\omega)\rangle = -e^2(\langle -k_x\rangle - \Lambda_{xx}(q,\omega))A_x(q,\omega);$$
$$\Lambda_{xx}(q,\omega) = \frac{i}{\hbar N_a}\int_0^\infty dt\, e^{(i\omega-\delta)t}\,\langle j_x^P(q,t)j_x^P(-q,0)\rangle_{|\delta\to 0};$$
$$\langle j_x^P(q,t)j_x^P(-q,0)\rangle = j_x^P(q,t)j_x^P(-q,0) - j_x^P(-q,0)j_x^P(q,t);$$
$$j_x^P(q) = \sum_l e^{-i\vec{q}\vec{l}}\, j_x^P(l);\quad \langle k_x\rangle = \frac{1}{N_a}\langle\sum_l k_x(l)\rangle$$

Отклик системы на внешнее поле

- Учитывая связь векторного потенциала и напряженности электрического поля в длинноволновом пределе получаем выражение для проводимости:

$$A_x(q=0,\omega)=\frac{E_x(q=0,\omega)}{i(\omega+i\delta)}\bigg|_{\delta\to 0};\quad (\omega)=-e^2\frac{\langle -k_x\rangle-\Lambda_{xx}(q=0,\omega)}{i(\omega+i\delta)}\bigg|_{\delta\to 0}$$

- При низких температурах главный вклад будет давать основное состояние, а также матричные элементы между основным состоянием и ближайшими возбужденными. Величина Λ_{xx} преобразуется в сумму дельта-функций, и наиболее сложная задача состоит в корре его спектрального коррелятора:

$$\sum_m |\langle m|j(q,0)|0\rangle|^2\,\delta(E_m-E_0-\omega)$$

- Это выражение можно вычислять непосредственно в процессе применения алгоритма Ланцоша, который с высокой точностью определяет несколько возбужденных состояний над основным.

Плотность состояний

- Плотность состояний – важная физическая величина, необходимая при расчете различных квантово-механических средних, ей удобно пользоваться, когда подынтегральное выражение зависит только от энергии частиц, например:

$$\sum_k f(\varepsilon_k)$$

- для модели сильной связи

$$\varepsilon_k = \cos ka$$

- для свободного газа

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

- Плотность состояний для системы фермионов со спинами:

$$\sum_k f(\varepsilon_k) = \int d\varepsilon\, N(\varepsilon) f(\varepsilon); \quad N(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$$

- Одночастичная плотность состояний может быть представлена в виде:

$$N(\omega) = \sum_k A(k, \omega)$$

Плотность состояний

- Спектральная плотность системы при нулевой температуре:

$$A(k,\omega) = \sum_{n\sigma} |\langle \Psi_n(N+1)|a_{k\sigma}^{+}|\Psi_0(N)\rangle|^2 \delta(\omega - E_n(N+1) + E_0(N)) +$$
$$+ \sum_{n\sigma} |\langle \Psi_n(N-1)|a_{k\sigma}|\Psi_0(N)\rangle|^2 \delta(\omega + E_n(N-1) - E_0(N))$$

- В узельном представлении:

$$N(\omega) = \sum_{i\sigma} (g_{i\sigma}^{+}(\omega) + g_{i\sigma}^{-\omega});$$

$$g_{i\sigma}^{+}(\omega) = \sum_{n\sigma} |\langle \Psi_n(N+1)|a_{i\sigma}^{+}|\Psi_0(N)\rangle|^2 \delta(\omega - E_n(N+1) + E_0(N));$$

$$g_{i\sigma}^{-}(\omega) = \sum_{n\sigma} |\langle \Psi_n(N-1)|a_{i\sigma}|\Psi_0(N)\rangle|^2 \delta(\omega - E_n(N-1) + E_0(N))$$

Плотность состояний

- Щель в спектре возбуждений:

$$\Delta = \mu^+ - \mu^-;$$
$$\mu^+ = E_0(N+1) - E_0(N); \quad \mu^- = E_0(N) - E_0(N-1)$$

- Если $\Delta<0$, то щели в спектре нет, и плотность состояний непрерывна как функция энергии
- Для расчета необходимо вычислить сложный коррелятор

$$\sum_{n\sigma} |\langle \Psi_n(N\pm 1)|a_{i\sigma}^{+}|\Psi_0(N)\rangle|^2 \delta(\omega - E_n(N\pm 1) + E_0(N))$$

- Матричные элементы в корреляторе рассчитываются между состояниями с различным числом частиц. Тем не менее, для его расчета может быть применен алгоритм Ланцоша
- В процессе работы алгоритма Ланцоша при увеличении числа итераций возникают паразитические псевдособственные векторы, которые либо дублируют уже существующие собственные векторы, либо имеют очень плохую невязку. Однако для расчета подобных корреляторов можно игнорировать проблему возникновения паразитических векторов

Плотность состояний

- Если для известного вектора u требуется вычислить вектор $v{=}F(A)u$, где явный вид оператора F известен только в базисе собственных векторов матрицы A, то решить эту задачу можно с помощью простого алгоритма Ланцоша
- В нашем случае u – многочастичная волновая функция основного состояния системы; A – гамильтониан системы
- Плотность состояний:

$$\rho(\omega) = C\sum_k f[(u,x_k)]\,\delta(\lambda_k-\omega);$$

$$\delta(E) \approx \frac{1}{\pi}\left(\frac{\sigma}{E^2+\sigma^2}\right)_{|\sigma\to 0}$$

- В качестве первого вектора, по которому образуется подпространство Крылова, берется вектор u, по завершении итерационной процедуры алгоритм Ланцоша дает все необходимые скалярные произведения (u,x_k)

Плотность состояний

- Проводимость и плотность состояний в двумерной модели Хаббарда в зависимости от концентрации дырочных носителей