

Анализ природы пиковой структуры подзон Хаббарда с помощью квантового метода Монте-Карло

И. С. Кривенко^{+, *}, А. Н. Рубцов⁺⁺ Физический факультет, МГУ им. Ломоносова, 119992 Москва, Россия^{*} Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex, France

Поступила в редакцию 18 октября 2011 г.

В работе показано, что описание деталей электронных спектров, получаемых при помощи связки динамической теории среднего поля (DMFT), квантовых методов Монте-Карло (QMC) и метода максимальной энтропии (MAXENT), можно существенно улучшить, заменив последний на процедуру оптимальной регуляризации аналитического продолжения функции Грина на ось реальных частот. Использование этого метода позволило восстановить пики в структуре хаббардовских подзон, стартуя с QMC-данных, с максимальной погрешностью на уровне $10^{-2} - 10^{-3}$. Благодаря универсальности метода QMC оказалось возможным посредством варьирования гибридизации определить, какие именно особенности гибридизационной функции ответственны за формирование структуры хаббардовских подзон. Показано, что прямая связь между пиковой структурой подзон и центральным Кондо-пиком отсутствует. Полученный результат свидетельствует в пользу зарядовой природы ответственных за формирование пиковой структуры резонансов.

Существенный прогресс, достигнутый в последнее время в физике структур и материалов с сильными электронными корреляциями, связан прежде всего с использованием численных методов и комбинированных численно-аналитических подходов. Прежде всего речь идет о связке динамической теории среднего поля (DMFT) [1] с семейством квантовых методов Монте-Карло (QMC) [2], позволяющей на количественном уровне рассчитывать электронные свойства сильно коррелированных материалов, в том числе с использованием реалистических многоорбитальных моделей [3]. Стохастические алгоритмы QMC в этой схеме используются для решения примесной задачи, действие которой описывает атом, гибридизованный гауссовым окружением. Функция гибридизации вычисляется самосогласованным образом. Основными преимуществами методов QMC в этой ситуации являются универсальность (решение может быть найдено для произвольной функции гибридизации в достаточно широком диапазоне температур) и приемлемая ресурсоемкость. С другой стороны, современным алгоритмам QMC свойственен и существенный недостаток. Он связан с тем, что расчеты принципиально проводятся во мнимом времени, т.е. их результатом является электронная функция Грина на частотах Мацубары. Сама по себе схема самосогласования DMFT может быть сформулирована на мацубаровских частотах замкнутым образом. Однако определение физически значимого электронного спектра на оси реальных частот требует использова-

ния той или иной процедуры аналитического продолжения. Последняя задача является в математическом смысле плохо обусловленной. Это обстоятельство в сочетании со свойственным стохастическим алгоритмам сравнительно высоким уровнем шума полученных результатов приводит к серьезным проблемам при анализе электронных спектров.

Базовой моделью метода DMFT является однозонная модель Хаббарда с половинным заполнением, гамильтониан которой имеет вид

$$H = U \sum_j \left[n_{j\uparrow} - \frac{1}{2} \right] \left[n_{j\downarrow} - \frac{1}{2} \right] - \frac{t}{\sqrt{N}} \sum_{\langle jj' \rangle, \sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{j'\sigma}. \quad (1)$$

Первое слагаемое здесь описывает кулоновское отталкивание электронов с противоположными спинами на узле, а второе – перескоки электронов между соседними атомами (N – число соседей атома на решетке). Множитель перед вторым слагаемым выбран таким образом, чтобы при изменении размерности системы (и соответственно, числа соседей) ширина затравочной зоны проводимости оставалась бы постоянной.

В рамках DMFT задача об электронных свойствах решеточной модели вида (1) сводится к одноузельной примесной задаче Андерсона с действием

$$S = S_{\text{at}} + \sum_{\omega, \sigma} \Delta_\omega c_{\omega\sigma}^\dagger c_{\omega\sigma}, \quad (2)$$

где S_{at} – действие одиночного изолированного атома с кулоновским отталкиванием U , а гибридизация Δ

должна быть определена самосогласованным образом. В пределе бесконечно большого числа соседей на решетке Бете [1] корреляции локальны в пространстве и переход от решеточной задачи (1) к примесной (2) оказывается точным. Поэтому для случая $N \rightarrow \infty$ схема DMFT не содержит приближений. Гибридизация оказывается равной

$$\Delta_\omega = t^2 g_\omega, \quad (3)$$

где g_ω – функция Грина примесной задачи (2). Технически поиск решения производится итеративным образом: на каждой итерации вычисляется функция Грина действия (2) с гибридизацией, полученной на предыдущем шаге. Такая схема обеспечивает хорошую сходимость во всей области параметров. Эффективность и точность расчета определяются программой (солвером), предназначеннной для численного нахождения функции Грина задачи (2).

Основные черты решения однозонной модели Хаббарда при $N \rightarrow \infty$ хорошо известны. С увеличением константы кулоновского взаимодействия U при достаточно низких температурах электронный спектр системы показывает две широкие хаббардовские подзоны, расположенные в окрестности энергий $\pm U/2$. При $U = (4.7-6.0)t$ система испытывает переход первого рода и в спектре возникает щель, соответствующая формированию фазы моттовского диэлектрика. Однако во всей ферми-жидкостной фазе вплоть до точки перехода величина спектральной плотности на уровне Ферми фиксирована следствием из теоремы Латтинжера и локальности собственno-энергетической функции. Это соответствует наличию имеющего кондовскую природу узкого спектрального пика вблизи уровня Ферми, ширина которого при подходе к точке перехода обращается в нуль. Типичный вид спектра вблизи перехода приведен на рис. 1. Оговоримся, что описанная “трехпиковая” структура плотности состояний характерна именно для предела бесконечной размерности. Например, для двумерных систем центральный пик полностью подавлен из-за пространственной нелокальности корреляций.

Несмотря на простоту, фундаментальность и достаточно долгую историю исследований, проблема описания однозонной модели Хаббарда при $N \rightarrow \infty$ до сих пор содержит открытые вопросы, связанные с наличием так называемой пиковой структуры хаббардовских подзон. Речь идет о наличии в хаббардовских подзонах узких пиков, расположенных на границе формирующейся запрещенной зоны. Пики присутствуют только в металлической фазе при достаточно больших величинах U и полностью исчезают при пе-

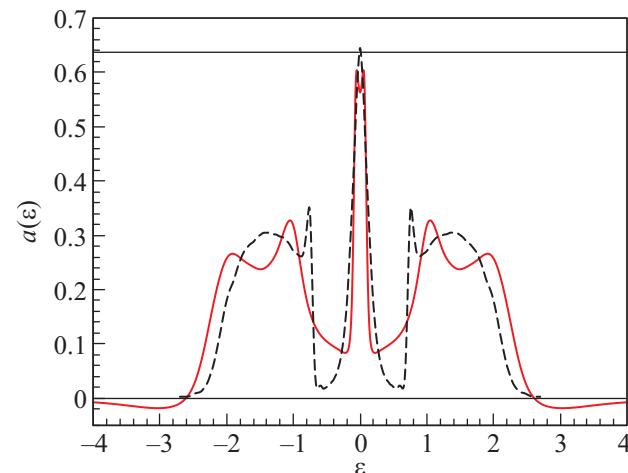


Рис. 1. Плотности состояний однозонной модели Хаббарда с половинным заполнением на бесконечномерной решетке Бете при $U = 2.4$, $t = 0.5$. Сплошная линия – результат DMFT + CTQMC + оптимальная регуляризация (температура $T = 0.01$). Пунктир – результат D-DMRG для нулевой температуры, полученный в работе [5]. Тонкая горизонтальная линия на уровне $2/\pi$ показывает значение $a(0)$, dictуемое следствием из теоремы Латтинжера

реходе в фазу моттовского изолятора. Впервые на существование данной структуры было, по-видимому, указано в работе [4], а надежно ее присутствие было установлено с использованием D-DMRG [5] – практически точного метода, позволяющего определять спектр при нулевой температуре непосредственно на оси действительных частот (полученный в этой работе спектр также приведен на рис. 1). Вопрос о физической природе указанных пиков до сих пор открыт. В работе [5] высказано предположение о том, что тонкая структура хаббардовских подзон связана со взаимодействием квазичастиц центрального “кондовского” пика с теми или иными коллективными возбуждениями. Это косвенно подтверждается тем обстоятельством, что спектральный вес центрального пика и пиков тонкой структуры при приближении к точке перехода уменьшается одинаковым образом [6]. Однако строгого обоснования природы появления пиковой структуры подзон до сих пор представлено не было. Нет даже ясности в вопросе о том, связано ли ее появление со спиновыми или зарядовыми степенями свободы многоэлектронной системы.

Описание тонкой структуры хаббардовских подзон при конечной температуре с использованием QMC-солверов наталкивается на указанные в начале статьи сложности, связанные с плохой обусловленностью процедуры аналитического продолжения

с мацубаровских на реальные частоты. Типичная случайная ошибка данных QMC на мацубаровских частотах оказывается порядка $3 \cdot 10^{-3}$ или хуже. (Улучшение точности требует значительного роста вычислительных ресурсов и предъявляет повышенные требования к программной реализации QMC.) Общепринятая в настоящее время процедура, использующая метод максимальной энтропии (MAXENT) [7], в этом случае вовсе не воспроизводит обсуждаемой структуры: восстановленный спектр содержит только сглаженные подзоны. Необходимо отметить, что описанные проблемы многократно возрастают в случае выхода за пределы модели Хаббарда и рассмотрения многоорбитальных моделей коррелированных материалов, делая описание деталей электронного спектра вдали от уровня Ферми в рамках подхода DMFT+QMC+MAXENT практически невозможным.

В настоящей работе показано, что описание деталей электронного спектра можно существенно улучшить, заменив MAXENT на оптимальную с точки зрения минимизации погрешности результата процедуру регуляризации. Использование предложенного нами метода оптимальной регуляризации позволило восстановить пики в структуре хаббардовских подзон, стартуя с QMC-данных, с погрешностью на уровне 10^{-2} – 10^{-3} . Использование QMC – “универсального” метода, надежно работающего при произвольной гибридизации, – в этом случае позволило посредством варьирования гибридизации определить, какие именно особенности гибридизационной функции ответственны за формирование структуры хаббардовских подзон и, таким образом, прояснить ее физическую природу. Показано, что неожиданным образом прямая связь между пикиной структурой подзон и центральным Кондо-пиком отсутствует. Полученный результат свидетельствует в пользу зарядовой природы ответственных за формирование пикиной структуры резонансов.

Задача аналитического продолжения сводится к решению линейного интегрального уравнения

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{a(\epsilon)}{i\omega - \epsilon} d\epsilon = g(\omega) \quad (4)$$

для спектральной плотности $a(\epsilon)$, где ϵ – аргумент на оси реальных частот. Если ввести пару ортогональных базисов $\mathcal{F}_\omega, \mathcal{F}_\epsilon$ и разложить по ним функции $g(\omega), a(\epsilon)$, интегральное уравнение перейдет в линейную систему вида

$$M\mathbf{a} = \mathbf{g} \quad (5)$$

с некоторой известной матрицей M . Формально эта система включает бесконечное число уравнений. Однако, можно ожидать, что при правильном выборе базисов можно эффективно свести ее к конечной системе. Вопрос конкретного выбора базиса мы оставляем за рамками данной статьи из соображений краткости. Отметим, что в любом случае при “разумно” выбранном базисе его конкретный вид влияет только на число уравнений, которые необходимо удержать в системе (5), но не на конечный результат расчета.

Плохая обусловленность означает, что малые вариации \mathbf{g} приводят к (экспоненциально) большим изменениям решения. Отправная точка используемого метода – регуляризация некорректной задачи по Тихонову [8]. Будем искать вектор \mathbf{a} , минимизирующий функционал Тихонова:

$$\mathcal{F}[\mathbf{a}; R] = \|M\mathbf{a} - \mathbf{g}\|^2 + (\mathbf{a}, R\mathbf{a}) = \min. \quad (6)$$

Здесь R – регуляризующая эрмитова матрица. Минимум достигается при

$$\mathbf{a} = XM^\dagger \mathbf{g}, \quad \text{где } X \equiv (M^\dagger M + R)^{-1}. \quad (7)$$

В случае ненулевой R полученное таким образом решение задачи (6) содержит определенную систематическую ошибку. Однако правильно выбранная регуляризующая матрица позволяет радикально уменьшить случайную ошибку результата, избавившись от экспоненциальной неустойчивости по входным данным. Тем самым полная ошибка оказывается существенно меньше, чем при решении непосредственно системы (5).

Обычно R выбирается на основе определенных априорных предположений о свойствах решения. Например, предположение о гладкости решения соответствовало бы популярному регуляризирующему функционалу $(\mathbf{a}, R\mathbf{a}) \propto \int \left| \frac{d^2 a}{d\epsilon^2} \right|^2 d\epsilon$. В противоположность этому подходу мы вычисляем регуляризующий функционал, требуя его оптимальности (т.е. минимальности полной ошибки) на определенном классе решений и для заданного вида погрешности.

Сформулируем предлагаемое условие оптимальности. Вектор \mathbf{g} известен приблизительно: $\mathbf{g} = \bar{\mathbf{g}} + \delta\mathbf{g}$, где $\bar{\mathbf{g}}$ – математическое ожидание вектора \mathbf{g} , а отклонение $\delta\mathbf{g}$ – случайная величина, распределенная с нулевым средним и характеризуемая матрицей ковариаций, $\hat{K}_{\mathbf{g}} = \overline{\delta\mathbf{g}\delta\mathbf{g}^\dagger}$ (здесь и далее горизонтальная черта над выражением означает его математическое ожидание, к которому сходится QMC-счет). Пусть вектор $\bar{\mathbf{a}}$ – точное решение системы (5) с точно известной правой частью: $M\bar{\mathbf{a}} = \bar{\mathbf{g}}$. Усредняя средне-

квадратичное отклонение \mathbf{a} от $\bar{\mathbf{a}}$ по всем возможным значениям случайного вектора $\delta\mathbf{g}$, получаем

$$\overline{\|\mathbf{a} - \bar{\mathbf{a}}\|^2} = \text{Tr}\{XAX - 2XB\} + \text{Tr}\{\bar{x}\bar{x}^\dagger\}, \quad (8)$$

$$A \equiv M^\dagger M \bar{a} \bar{a}^\dagger M^\dagger M + M^\dagger K_g M, \quad (9)$$

$$B \equiv M^\dagger M \bar{a} \bar{a}^\dagger. \quad (10)$$

Оптимальная матрица R должна доставлять минимум $\overline{\|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}\|^2}$. Само по себе такое условие неконструктивно, поскольку точное решение $\bar{\mathbf{a}}$ в каждом конкретном случае неизвестно. Можно, однако, задаться вопросом об определении R , являющегося оптимальным для заданного множества (класса) возможных решений. Обозначая усреднение по этому множеству треугольными скобками, в качестве условия на R получаем

$$\langle \|\mathbf{a} - \bar{\mathbf{a}}\|^2 \rangle = \text{Tr}(X\langle A \rangle X - 2X\langle B \rangle) + \text{Tr}\langle \bar{a}\bar{a}^\dagger \rangle = \min_R. \quad (11)$$

Решая эту вариационную задачу и учитывая дополнительное условие $\delta R = \delta R^\dagger$, можно получить уравнение на матрицу X :

$$\langle A \rangle X + X\langle A \rangle = \langle B \rangle + \langle B^\dagger \rangle. \quad (12)$$

Класс возможных решений, по которому проводится усреднение, следует выбрать из физических соображений. Использование такого рода априорной информации, дополнительной к исходной задаче (5), обязательно для любых регуляризационных схем. Заметим, впрочем, что детальной информации о классе решений на самом деле не требуется. Все, что необходимо знать о возможных решениях, это первый и второй моменты априорного распределения \mathbf{a} , т.к. только эти величины входят в (11) (учитывая выражения (9) и (10) для A и B). Эти моменты можно вычислить для некоторого модельного класса, воспроизводящего основные черты возможных решений.

В качестве такого класса мы выбираем суперпозицию нескольких лоренцевых пиков, имеющих одинаковую ширину γ :

$$a(\epsilon) = \sum_{j=1}^J \frac{Z_j}{\epsilon - \Omega_j + i\gamma}, \quad (13)$$

где положения пиков Ω_j и их вычеты Z_j являются случайными величинами с известными статистическими распределениями. Мы предполагаем, что все вычеты Z_j распределены одинаково и независимо друг от друга, а следовательно, нужно всего два

модельных параметра, $\langle Z^2 \rangle$ и $\langle Z \rangle$, чтобы полностью описать участие величин Z_j в корреляционной функции $\langle a(\epsilon_1)a^*(\epsilon_2) \rangle$. При этом из правила сумм для спектральной плотности, $\sum_{j=1}^J Z_j = 1$, сразу следует $\langle Z \rangle = 1/J$. Наконец, мы предполагаем, что положения полюсов Ω_j распределены независимо и согласно некоторому модельному распределению. Одна из простейших возможностей – распределение Лоренца с нулевым матожиданием:

$$P(\Omega_j) = \frac{1}{\pi\Omega_M} \frac{1}{1 + (\Omega_j/\Omega_M)^2}, \quad (14)$$

где Ω_M – оценочная полуширина спектра.

Подчеркнем еще раз, что мы не предполагаем, что искомая спектральная плотность в действительности является суперпозицией лоренцевых пиков заданной полуширины. Модельный спектр (13) используется только для вычисления первого и второго моментов априорного распределения \mathbf{a} . В выбранном нами базисе \mathcal{F}_ϵ эти величины представляют собой, соответственно, вектор-столбец и квадратную матрицу, компоненты которых вычислялись численным интегрированием. Затем из уравнений (12) определялась матрица X . Для определения этой матрицы проще всего произвести унитарное преобразование в собственный базис матрицы $\langle A \rangle$, в котором решение уравнения (12) можно выразить явно (штрихами помечены матричные элементы в собственном базисе $\langle A \rangle$; λ_i – собственные значения $\langle A \rangle$):

$$X'_{ij} = \frac{B'_{ij} + (B^*_{ji})'}{\lambda_i + \lambda_j}, \quad 1 \leq i, j \leq N. \quad (15)$$

Преимущество такого подхода по сравнению с прямым решением (12) состоит в том, что вместо решения системы $N(N+1)/2$ уравнений ($\propto N^6$ операций) достаточно диагонализовать матрицу размером $N \times N$ ($\propto N^3$ операций), после чего воспользоваться формулой (15) ($\propto N^2$ операций).

Можно доказать, что полученная формула (15) однозначно дает конечные выражения для всех матричных элементов X'_{ij} , поскольку знаменатель в ней всегда положителен. Тем не менее программная реализация метода встретилась с трудностями, так как численное решение сильно подвержено ошибкам округления, возникающим в процессе диагонализации. Чтобы подавить ошибки округления, была использована программная библиотека MPFR, реализующая арифметику с числами произвольной точности. Типичный расчет включал операции с матрицами размерности $N \approx 40$, элементы которых вычислялись со 100 десятичными знаками. При этом дальнейшее увеличение точности или числа уравнений не влияло на результат.

Используя полученную матрицу X , уже нетрудно по формуле (7) восстановить спектральную плотность по имеющейся функции Грина. При этом в случае обработки массива однотипных входных данных в силу линейности задачи матрицу X достаточно вычислить однократно. Здесь необходимо сделать важную оговорку. Существующие алгоритмы восстановления спектральной плотности являются существенно нелинейными, так как включают требование положительности спектральной плотности и выполнения правила сумм $\int_{-\infty}^{+\infty} a(\epsilon)d\epsilon = 1$. В принципе выполнения этих условий (как и любых других точных соотношений) в нашей схеме можно добиться, если вместо вычислений по формуле (7) найти из известного X собственно регуляризующий функционал R и искать условный минимум (6) на множестве допустимых решений. В наших расчетах, результаты которых приведены ниже, таких дополнительных ограничений не вводилось. Это привело, в частности, к тому, что в некоторых областях спектральная функция принимает небольшие по модулю нефизические отрицательные значения. Ясно, впрочем, что поиск условного минимума на множестве положительных решений приведет к тому, что спектральный вес в указанных областях обратится в нуль, а остальная часть графика изменится несущественно. С другой стороны, малая величина отклонения в области отрицательных значений позволяет сделать заключение об общей работоспособности схемы.

Важным преимуществом линейности алгоритма является также возможность восстанавливать ненормированные и знакопеременные величины, такие, как недиагональные компоненты спектральной плотности состояний в многоорбитальных задачах и собственно-энергетическая функция.

Перейдем к конкретным результатам расчетов плотности состояний модели Хаббарда на бесконечно-мерной решетке. Для решения уравнений DMFT был использован программный комплекс TRIQS (Toolkit for Research in Interacting Quantum Systems) [9], использующий библиотеку ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulations) [10, 11]. Примесная задача решалась методом разложения по функции гибридизации [12] с накоплением статистики в представлении ортогональных полиномов [13].

Для восстановления спектральной функции использовалось модельное распределение с параметрами $\gamma = 0.1$, $\Omega_M = 1.7$. Матрица ковариаций для простоты предполагалась диагональной с величиной матричных элементов на уровне 10^{-5} . Чтобы проверить правильность определения этой величины (включавшей стохастические шумы QMC и, возможно, дру-

гие свойственные конкретной численной реализации ошибки), мы сравнивали входные данные и “сглаженную” функцию Грина, найденную подстановкой в формулу (4) вычисленной спектральной функции. Наибольшее отклонение “сглаженной” функции Грина от исходной оказалось на уровне 10^{-2} , а типичное – на уровне 10^{-3} . Это подтверждает правильность выбора матрицы ковариаций. (Напомним, что диагональные матричные элементы последней квадратичны по величине ошибки входных данных.) Было проверено и то, что выбор величин параметров модельного распределения, как и матрицы ковариаций, влияет на результат не сильно.

Было показано, что описанный метод оптимальной регуляризации действительно позволяет восстанавливать пиковую структуру хаббардовских подзон. Типичная восстановленная спектральная функция, содержащая такую структуру, приведена на рис. 1. При повышении U до величины, превышающей критическую, в спектре появляется щель, а пикиовая структура исчезает. Отметим, что полученная нами спектральная функция отличается от результатов D-DMRG-расчета: спектральные пики размыты, а спектральный вес в области псевдоцентра в полученном нами спектре значительно больше, чем для D-DMRG. Эти отличия связаны не только с характерным для регуляризации сглаживанием зависимостей, но и с физически значимыми эффектами конечной температуры.

Возможность исследовать пикировую структуру хаббардовских подзон, исходя из результатов QMC-расчетов, позволила простым образом изучить вопрос о связи центрального “кондовского” пика и пики в хаббардовских подзонах. Для $U = 4.8t$ (т.е. для системы с выраженной пикировой структурой, представленной на рис. 1) был проведен дополнительный QMC-расчет для искусственно сгенерированной гибридизационной функции, соответствовавшей спектральной функции без центрального пика. Технически при этом после достижения самосогласования была построена спектральная функция, приведенная на рис. 1 и 2 (тонкий пунктир). Центральный пик на последней был замещен сглаженным участком (рис. 2, жирная пунктирная линия). Из этой модифицированной спектральной функции по формулам (4) и (3) была вычислена новая гибридизационная функция $\tilde{\Delta}$. Для примесной задачи (2) с $\tilde{\Delta}$ при помощи QMC была рассчитана функция Грина \tilde{g} , а из нее восстановлена модифицированная плотность состояний \tilde{a} , показанная на рис. 2 сплошной линией. Заметим, что процедура удаления центрального пика, вообще говоря, сопровождается

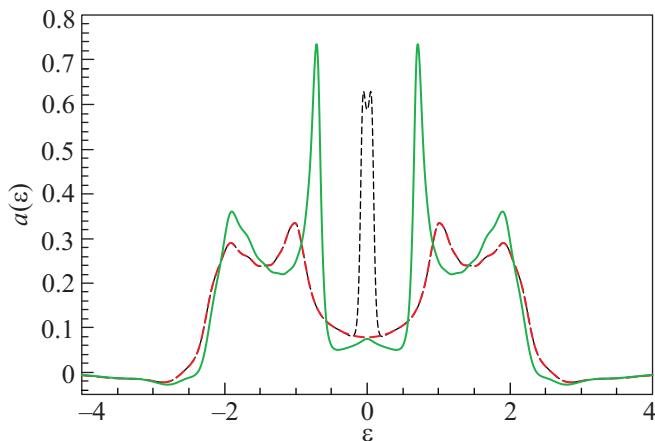


Рис. 2. Плотности состояний однозонной модели Хаббарда с половинным заполнением на бесконечномерной решетке Бете при $U = 2.4$, $t = 0.5$. Тонкий пунктир – результат DMFT + CTQMC + оптимальная регуляризация (температура $T = 0.01$). Жирный пунктир – плотность состояний $a(\epsilon)$ после удаления центрального пика. Сплошная линия – плотность состояний $\tilde{a}(\epsilon)$.

потерей небольшой части спектрального веса. Восстановить спектральный вес можно домножением $\tilde{\Delta}$ на соответствующий нормировочный фактор. Однако, как было проверено, такая перенормировка практически не меняет результата для \tilde{a} .

Видно, что центральный пик практически отсутствует не только в спектральной функции, соответствующей гибридизации $\tilde{\Delta}$, но и в итоговом спектре \tilde{a} . Таким образом, связанные с переворотом спина эффекты (Кондо-процессы), ответственные за формирование центрального квазичастичного пика, из системы полностью удалены. Тем не менее пиковая структура подзон сохраняется, только частоты пиков несколько уменьшены, из-за чего сами пики оказываются более выраженными. Мы приходим к выводу о том, что, вопреки высказанным ранее предположениям, пиковая структура подзон не связана напрямую с квазичастичным пиком на уровне Ферми.

Тем не менее ненулевая плотность состояний вблизи уровня Ферми для формирования пиковой структуры подзон важна, поскольку при формировании щели эта структура пропадает. По-видимому, важным является не собственно квазичастичный пик, а общее число состояний в достаточно широкой области вблизи уровня Ферми (т.е. в области порядка ширины псевдощели). Для исследованного нами слу-

чая конечной температуры спектральный вес в области псевдощели существенно отличен от нуля. Поэтому удаление центрального пика приводит только к сравнительно небольшому уменьшению количества этих состояний и, соответственно, уменьшению частот пиковой структуры. В реальных материалах такая ситуация характерна для плазмонных возбуждений, на частоты которых Кондо-процессы заметного влияния не оказывают. Таким образом, наш результат свидетельствует в пользу того, что за формирование пиковой структуры хаббардовских подзон ответственны зарядовые, а не спиновые возбуждения.

Авторы благодарны А.И. Лихтенштейну, М.И. Кацельсону, З. Бирман и Й. Мравле за продуктивные обсуждения. Работа была поддержана Программой поддержки научных школ (#НШ-4895.2010.2), Фондом некоммерческих программ “Династия” и РФФИ (грант # 11-02-01443-а), а также французскими фондами ANR (проект CorrelMat) и IDRIS/GENCI (проект # 20111393).

1. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
2. E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein et al., Rev. Mod. Phys. **83**, 349 (2011).
3. G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule et al., Rev. Mod. Phys. **78**, 865 (2006).
4. X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **70**, 1666 (1993).
5. M. Karski, C. Raas, and G. S. Uhrig, Phys. Rev. B **72**, 113110 (2005).
6. M. Karski, C. Raas, and G. S. Uhrig, Phys. Rev. B **77**, 075116 (2008).
7. M. Jarrell and J. E. Gubernatis, Phys. Rep. **269**, 133 (1996).
8. А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин, *Методы решения некорректных задач*, М.: Наука, 1979.
9. M. Ferrero and O. Parcollet (*готовится к публикации*).
10. A. F. Albuquerque, F. Alet, P. Corboz et al., J. Magn. Mag. Mater. **310**, 1187 (2007).
11. B. Bauer, L. D. Carr, H. G. Evertz et al., J. Stat. Mech. **2011**, P05001 (2011).
12. P. Werner, A. Comanac, L. de'Medici et al., Phys. Rev. Lett. **97**, 076405 (2006).
13. L. Bohnke, H. Hafermann, M. Ferrero et al., Phys. Rev. B **84**, 075145 (2011).