МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

Мостовой Сергей Дмитриевич

Исследование фазовых явлений в решеточных моделях физики конденсированного состояния вещества и теории поля

Специальность 1.3.3. Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Москва — 2023

Диссертация подготовлена на кафедре квантовой статистики и теории поля физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель - Павловский Олег Владимирович
кандидат физико-математических наук

Официальные оппоненты - Брагута Виктор Валерьевич
доктор физико-математических наук, доцент, начальник сектора физики адронной материи лаборатории теоретической физики ММО «Объединённый институт ядерных исследований»

Рогалёв Роман Николаевич
кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела теоретической физики НИЦ «Курчатовский Институт» – ИФВЭ

Свешников Константин Алексеевич
доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой теории и физики высоких энергий физического факультета ФГБОУ ВО «Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова»

Защита диссертации состоится «01» июня 2023 г. в 17 часов 00 минут на заседании диссертационного совета МГУ.011.2 Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, МГУ, дом 1, стр. 2, физический факультет, физическая аудитория им. Р.В. Хохлова.

E-mail: ff.dissovet@gmail.com

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27) и на портале: https://dissovet.msu.ru/dissertation/011.2/2514

Автореферат разослан «   » апреля 2023 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук
профессор П.А. Поляков

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Исследование свойств систем большого числа частиц в разных фазах и вблизи границ фаз остается одним из основных направлений теоретической физики. Сложность, возникающая при описании особенностей поведения физических моделей с учетом коллективных свойств, обусловлена невозможностью использования ряда теории возмущений, возникновением дальнего порядка в системе, неаналитическим поведением наблюдаемых в окрестности критических состояний. Все перечисленное потребовало разработки специальных методов для расчета статистических и термодинамических свойств. В современной физике широкое применение нашли численные методы решения задач, один из которых (метод Монте-Карло) до сих пор совершенствуется по мере возникновения новых предложений по повышению эффективности расчетов.

Цели и задачи работы. В данной работе были исследованы две решеточные модели: $U(1)$-калибровочная теория поля и расширенная модель Хаббарда на гексагональной решетке. Целью первой части работы было детальное исследование фазовых состояний компактной электродинамики при различных значениях параметров модели, выявление геометрических характеристик упорядоченных пар монополь-антимонополь. Вторая часть работы рассматривает одну из методик улучшения качества вычислений наблюдаемых в методе Монте-Карло со вспомогательными полями в случае фермионной модели, фазы упорядочения спинов и положение фазового перехода полупроводник-диэлектрик, определение зависимости энергетических характеристик электронов от температуры.

Научная новизна заключается в новых, полученных в рамках диссертационной работы, результатах, а именно: обнаружены новые фазы внутри состояния конфайнмента компактной электродинамики, предложен новый формализм описания упорядоченных структур магнитных токов, связывающих монополи и антимонополи, с помощью которого возможно исследовать геометрические структуры и дальний порядок. Проанализированы эффекты от расширения конфигурационного пространства модели при помощи введения дополнительных (линковых) вспомогательных полей Хаббарда в рамках реализации метода

Квантового Монте-Карло для решеточной фермионной системы. Получены данные для теплоемкости в диапазоне температур от 0.49 до 5.6 эВ. В качестве примера исследован случай отличающихся на подрешетках значений интенсивности взаимодействия электронов на одном узле.

Теоретическая и практическая ценность заключается в возможности использовать предлагаемый метод пяти вспомогательных полей для произвольных дальнейших вычислений в расширенной модели Хаббарда, а также в других вторично-квантованных фермионных моделях. Этот метод позволяет улучшить качество получаемых результатов при моделировании методом Монте-Карло. Также становится возможным продвинуться в область более низких температур. Продемонстрирована важность применения специальных методов обработки результатов вычислений методом Монте-Карло в задаче определения теплоемкости в области температур ниже 1.5 эВ. Написаны соответствующие компьютерные программы. В **главе 1.3** автором предлагается *новый* (геометрический) подход к описанию дальнего порядка монополей в компактной электродинамике. Новизна отмечена рецензентом, о чем сказано ниже, см. "личный вклад".

Методология и методы исследования. В каждом из разделов данной работы аналитически строится решеточная аппроксимация модели (теории поля, конденсированного состояния), реализуется метод Монте-Карло с марковской цепью семплирования конфигурационного пространства модели при помощи метода вспомогательных полей (см. **главу 2.2** диссертационной работы). Указанный метод позволяет оценить средние значения наблюдаемых, построенных в терминах технических полей, возникающих в процессе решеточной аппроксимации. После работы программы получаются ряды значений ("измерения") наблюдаемых, которые требуют специальной обработки, учитывающей автокорреляционные свойства величин. Трудности, возникающие при этом, и пути их разрешения подробно обсуждаются в **главе 2.3** диссертационной работы. Изменение характера поведения определяемых средних в зависимости от параметров моделей, а также результаты фитирования точек-значений вычислений рассматриваются как физические ответы, подлежащие сравнению с экспериментом и альтернативными теоретическими вычислениями.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Получен фазовый портрет решеточной калибровочной $U(1)$-модели с введенным топологическим слагаемым магнитных токов. Обнаружена область существования дальнего порядка монополей в данной модели. Предложены параметры порядка фазового перехода от неупорядоченного состояния к данному новому состоянию, и найдены условия его разрушения.

2. Предложен новый способ описания магнитных токов, связывающих пары монополь-антимонополь. Выдвигаемый способ имеет достоинства наглядности, однозначности и возможности алгоритмизации построения. Получены гистограммы распределения, совместное рассмотрение которых позволяет детально охарактеризовать свойства топологических дефектов.

3. Предложено новое развитие метода полей Хаббарда-Стратоновича: введение дополнительных линковых полей позволяет: уменьшить термализационные длины до 5 раз; уменьшить автокорреляционное время для наблюдаемых до 4 раз, вплоть до значений 0.5-0.7 (практически независимые измерения); улучшить флуктуационные свойства наблюдаемых; подавить возникновение метастабильных состояний в ходе обхода конфигурационного пространства в цепи Маркова; явно выявить ограничения на область значений параметров, доступную для метода Монте-Карло. Модификация особенно эффективна в области низких температур до 0.8 эВ.

4. Предложено два независимых способа вычисления теплоемкости электронных возбуждений расширенной модели Хаббарда при температурах системы от 0.56 до 5.6 эВ. Продемонстрирована роль пост-обработки рядов измерений Монте-Карло для улучшения качества получаемых результатов.

Степень достоверности результатов и апробация работы. Основные идеи и положения работы изложены в 4 публикациях автора в рецензируемых научных изданиях, рекомендуемых для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Результаты диссертации докладывались на 4 конференциях. В написанных в соавторстве работах все результаты, представленные в диссертации, получены лично Мостовым С.Д. В работе применялись строгие постановки решаемых задач, математически обоснованные и широко применяемые методы их решения, общие принципы и положения теории физики критических явлений, использование общепризнанных научных методов. Базовые результаты проверялись на соответствие уже известным (положение фазового перехода конфайнмент-деконфайнмент, объемный эффект параметров порядка в фермионной задаче на гексагональной решетке, поведение теплоемкости в пределах низких и высоких температур), для получения новых использовались технические приемы, зарекомендовавшие себя в стохастическом моделировании на решетке. Работа компьютерной программы проверялась рядом стандартных тестов.

Личный вклад. Во всех опубликованных работах вклад автора является определяющим. Автор принимал активное участие в постановке научных задач, разработке методов их решения, осуществлении вычислений, анализе их результатов и написании статей. Аналитические выражения подготовлены к кодированию на ЭВМ соискателем лично. Все компьютерные программы моделирования и обработки данных Монте-Карло были написаны лично Мостовым С.Д. и являются продуктом его интеллектуальной деятельности. Сторонней является лишь библиотека линейной алгебры Eigen, используемая для нахождения собственных значений и собственных векторов и низкоуровневого матричного умножения. Мостовым С.Д. реализован ряд оптимизаций компьютерных программ. Мостовым С.Д. выдвигается *новый*, геометрический метод интерпретации магнитных токов, что нашло отражение в отзыве рецензента на статью[1]. Мостовым С.Д. проводились все запуски программ на выполнение, сбор и систематизация данных.

Структура и объем диссертации Диссертационная работа состоит из введения, трех частей, разбитых на 12 глав, заключения, списка литературы и приложения. Полный объем диссертации — 111 страниц, диссертация содержит 45 рисунков, 2 таблицы, список литературы включает в себя 73 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Диссертационная работа содержит три части. В **Части 1** исследуются фазовые свойства *U(1)-калибровочной модели на решетке (компактной электродинамики)* при помощи корреляционной функции магнитных токов. Целью является определение фаз модели и их свойств. **Часть 2** работы кратко описывает основные методы Монте-Карло-моделирования и особенности и принципы статистической обработки рядов измерений, полученных *методом Монте-Карло с марковской цепью в технике вспомогательных полей*. Включение этого раздела в текст диссертационной работы объясняется тем, что

1. методика проведения вычислений и эффективное развитие способа моделирования невозможно без понимания принципов, стоящих за алгоритмами Монте-Карло. Мостовым С.Д. предложено техническое улучшение существующего способа аппроксимации статистической суммы фермионной модели (см. ниже);

2. именно улучшенная (*рафинированная*) статистическая обработка данных позволила достичь новых результатов при работе с указанной моделью.

В **Части 3** рассматривается формализм и некоторые результаты работы автора с *расширенной моделью Хаббарда на гексагональной решетке*. Обсуждается выдвигаемый на защиту улучшенный метод моделирования Монте-Карло подобных систем, равно как и ряд новых результатов, полученных автором впервые.

Рассмотрим содержание диссертационной работы подробнее.

Часть 1 диссертационной работы рассматривает 4D $U(1)$- калибровочную теорию поля (компактную электродинамику). В результате широкого исследования свойств этой модели (см., например, [2]) было показано, что на решетке возникают топологические дефекты, связанные дираковскими струнами, которые ассоциированы с магнитными потоками; существует фаза без монополей, равно как и фаза с их наличием; эти фазы отличаются асимптотическим поведением потенциала взаимодействия топологических дефектов. Последнее находит выражение в различии констант связи в разных состояниях. Так, в режиме сильной связи дефекты образуют собственные структуры (конденсат), влияют на локальный порядок модели, пары монополь-антимонополь связаны трубкой потока так, что энергия их взаимодействия растет линейно с расстоянием. Последнее принято интерпретировать в терминах натяжения струны, что естественным образом приводит к понятию конфайнмента в КХД.

К настоящему моменту предложено несколько способов описания фазового перехода конфайнмент-деконфайнмент в компактной электродинамике: петли Вильсона, линии Полякова, плакет-плакетный коррелятор. В данной диссертационной работе предлагается принципиально новый подход.

В **главе 1.1** дается определение модели, вводятся понятия плакета u_p, его дефектности, магнитного тока $M_{x,\mu}$. Действие модели

$$S = -\beta \sum_p \mathrm{Re}\; u_p + \lambda \sum_{x,\mu} |M_{x,\mu}| \,,$$

состоит из двух слагаемых: определяющего (плакетного) и члена с химическим потенциалом λ магнитного тока (magnetic number chemical potential). Описывается влияние знака λ на выгодность создания монополь-антимонопольных пар или их подавления. Кратко комментируется суть метода Монте-Карло оценки среднего значения калибровочно-инвариантных наблюдаемых модели в процессе Монте-Карло-моделирования.

Глава 1.2 посвящена описанию известного современного состояния и дальнейшему исследованию фазовой диаграммы модели на плоскости β-λ. Дается указание на общепринятые параметры порядка [3] и их поведение в различных фазах. Приводятся результаты вычислений, доказывающих работоспособность компьютерной программы и согласование простейших предсказаний с известными значениями: петли Вильсона нескольких площадей и натяжение струны в зависимости от β, плакет-плакетный коррелятор $\langle u_p u_{p'} \rangle(\beta)$ при разных фиксированных λ и расстояниях d между ними. Показывается возможность использования зависимости $\langle |M_{x,\mu}| \rangle$ от β для аккуратного определения границы фазового перехода конфайнмент-деконфайнмент при различных λ. Затем вводится основной объект исследования — коррелятор магнитных токов

$$C(d) = \left\langle \frac{1}{4} \sum_{\nu} M_{x,\mu} M_{x+\nu d,\mu} \right\rangle_{x,\mu} \equiv \frac{1}{16} \left\langle \sum_{\nu,\mu} M_{x,\mu} M_{x+\nu d,\mu} \right\rangle_{x} ,$$

величина которого может быть использована различными способами. Во-первых, построение графика $C(d)$ при фиксированных параметрах β, λ позволяет провести аналогию с физикой конденсированного состояния в контексте наличия и характера дальнего порядка монополей в системе. Так, при $(\lambda, \beta) = (-1.5, 2.0)$ характер изменения $C(d)$ напоминает поведение радиальной (парной) корреляционной функции (pair correlation function) в жидких средах, тогда как аналогичное рассмотрение для $(-0.8, 0.2)$ имеет аналогию с кристаллической фазой высокой степени симметрии. Это позволяет классифицировать коллективные состояния монополей *внутри фазы конфайнмента*, уточнив существующий взгляд на фазовую диаграмму модели. Так, различие между фазами с дальним и ближним порядком может быть охарактеризовано введенной автором величиной

$$\gamma = (C(3) - C(1))/C(1),$$

которая близка к 0 в фазе кристалла и существенно отрицательна в менее упорядоченных фазах. Например, для монопольного газа $\gamma \approx -110.0$. Эта величина показывает уменьшение амплитуды второго максимума коррелятора магнитных токов по сравнению с амплитудой первого максимума, и она тем меньше, чем сильнее падает скоррелированность с увеличением расстояния.

Объединение всех полученных результатов для двумерной плоскости λ-β позволяет построить *фазовую диаграмму* модели, которую предлагается интерпретировать следующим образом. Помимо уже известного фазового перехода конфайнмент-деконфаймент по появлению пар монополь-антимонополь, внутри первой фазы можно выделить несколько “подфаз”, а именно:

- монопольный газ: монополи существуют, но не формируют упорядоченного состояния, коррелятор $C(d)$ близок к нулю уже с $d = 2$,

- монопольный конденсат с дальним порядком: отделен от первой фазы четко различимой *кривой конденсации*, осцилляции $C(d)$ сохраняют свою амплитуду для многих значений d, имеет место самое сильное упорядочение,

- монопольный конденсат с ближним порядком: при дальнейшем уменьшении λ появляются т.н. двойные магнитные токи (величины ± 4 вместо ± 2), что приводит к постепенному увеличению модуля $|C(d)|$ при сохранении наличия противоположных знаков соседних $M_{x,\mu}$, но с небольшим нарушением регулярности кристаллической структуры.

Граница между “жидкой” (при $\lambda \lesssim -1.0$) и “кристаллической” фазами хорошо идентифицируется по γ и видна в т.ч. при рассмотрении микросостояний конкретных конфигураций модели, которые могут быть получены в результате моделирования. В тексте диссертационной работы приведены конкретные фазовые диаграммы в терминах $C(d)$, γ и $C'(d)$. Последний коррелятор магнитных токов построен по их знакам (sgn $M_{x,\mu}$), а не самим значениям. Последнее полезно для проверки степени соблюдения знакопеременности $M_{x,\mu}$ в соседних узлах решетки.

Глава 1.3 описывает предлагаемый автором [1] новый подход к описанию структур, формируемых магнитными токами в толще модели. Вводятся *токовые объекты* — четырехмерные наборы линков, соответствующих токам $M_{x,\mu} = \pm 4$, которые объединяются компьютерным алгоритмом согласно одному из двух правил:

1. нить: однонаправленная не ветвящаяся последовательность линков, распространяющаяся в положительных направлениях осей координат;

2. дерево: совокупность последовательных линков, выходящих из одного корня в любых направлениях.

Основным требованием (для обоих случаев) является чередование знаков $M_{x,\mu}$ последовательных линков, рассматриваемых при конструировании объекта. Такие объекты создаются для конкретных конфигураций модели, полученных в результате моделирования Монте-Карло, и являются геометрическими построениями, для которых возможно определить геометрические свойства, например, длину, размерность, число изгибов, плотность последних, объем, окруженность (число линков дерева, соседних с каждым рассматриваемым узлом). В диссертационной работе приводятся гистограммы распределения деревьев по перечисленным величинам при различных парах значений λ, β, комментируются характер их закономерного изменения в зависимости от параметров модели. *Утверждение работы* заключается в том, что изучение геометрических характеристик представляемых объектов позволяет описать особенности взаимного расположения магнитных токов, упорядочения магнитных монополей и их корреляционные свойства. Совместное рассмотрение нескольких таких геометрических свойств позволяет составить представление о внутренней структуре фазы модели и предсказать физические тенденции при том или ином изменении параметров модели.

В тексте работы приведены примеры анализа полученных гистограмм и возможные интерпретации результатов. Важно подчеркнуть, что изменение геометрических свойств прекрасно согласовано с положением различных фаз монополей в модели (что определялось альтернативными способами), позволяет локализовать границы фазовых переходов по значениям λ и β, дает возможность наглядно представить себе взаимное расположение и характер коллективных связей топологических дефектов. Ради краткости автореферата примеры здесь не приводятся.

Применение описанного подхода с точки зрения автора позволяет составить наглядную картину расположения топологических дефектов в толще модели благодаря связи дираковских струн, соединяющих пары монополь-антимонополь, с магнитными токами $M_{x,\mu}$.

Часть 2 содержит обзор методов Монте-Карло, которые нашли широкое применение в областях естественных и точных наук, в экономике и финансовой сфере. Необходимость включения данного обзора в текст диссертационной работы связана с тем, что построение эффективных схем вычислений невозможна без понимания принципа работы стохастического оценивания в целом, а результаты, выдаваемые программой, требуют последующей обработки с точки зрения статистики. Автором *предлагается* способ улучшения стохастических и статистических свойств алгоритма Монте-Карло с марковской цепью со вспомогательными полями для фермионных систем в терминах вторичного квантования. Причины, по которым улучшение имеет место, требуют обсуждения общей концепции методов Монте-Карло и подходов к вычислению средних значений наблюдаемых в марковском процессе.

Глава 2.2 содержит описание метода Монте-Карло с марковской цепью — способа, который был применен автором для выполнения диссертационной работы. Рассматривается семплирование по значимости, вводится понятие конфигурационного пространства, определяется аппроксимация среднего значения наблюдаемой через сумму, перечисляются требования на итерационный *марковский* процесс, реализующий “обход” конфигурационного пространства (неприводимость, апериодичность, стационарность). Формулируются два основных подхода к определению вероятности перехода из одной конфигурации в другую (Метрополиса-Гастингса и гиббсовское семплирование), которые обеспечивают сходимость к предельному равновесному распределению. Приводятся два коротких примера реализации выбора Метрополиса для спиновых моделей. Указывается на возможность применения динамики Ланжевена и молекулярной динамики для генерации новой конфигурации, с целью повышения доли принятия (acceptance) в методе Метрополиса.

Описываются широко распространенные методы Монте-Карло, которые нашли применение в областях квантовой физики, химии и биологии. Для каждого метода описывается его основная идея, приводятся некоторые аналитические формулы, реализующие метод, обсуждаются алгоритмические шаги, комментируются особенности практической реализации.

- Вариационный метод Монте-Карло.
- Диффузионный метод Монте-Карло.
- Детерминантный метод Монте-Карло. К этому семейству методов относятся, например, метод мировых линий (world-line approach), **метод со вспомогательными полями** (auxiliary) и собственно **детерминантный**.
- Континуально-интегральный метод Монте-Карло.
- Квантовые спиновые модели.

Метод со вспомогательными полями был использован автором при получении всех результатов данной работы. Автором лично проведены необходимые аналитические выкладки, выражения были преобразованы в форму, пригодную для кодирования на ЭВМ, Мостовой С.Д. лично реализовал программы моделирования, контроля вычислений и обработки получаемых выходных данных. Программный код основной программы (на языке C++) содержит 4058 строк. В силу требования умеренного объема текста автореферата изложение метода, его техническое описание и обсуждение особенностей его реализации оставлены в основном тексте диссертационной работы.

Глава 2.3 посвящена рассмотрению особенностей обработки наборов чисел, генерируемых программой, работающей по методу Монте-Карло с марковской цепью. Можно считать, что алгоритм “путешествует” в конфигурационном пространстве, посещая те или иные его точки в рамках случайного марковского процесса в воображаемом времени. В каждом состоянии вычисляется значение наблюдаемой, которое воспринимается как одно “измерение”. По совокупности таких измерений следует оценить среднее значение и его погрешность. Если первое не представляет проблем, то оценка погрешности заключает в себе целый ряд специфических особенностей работы, связанных с тем, что последовательные конфигурации скоррелированны друг с другом, а следовательно, стандартная методика обработки результатов измерений неприменима, а также с тем, что распределение наблюдаемых может иметь негауссов вид, следовательно высшие моменты эмпирического распределения могут не существовать, и требуется аккуратная обработка т.н. тяжелых хвостов (heavy-tailed) распределения.

Необходимость включения в текст диссертационной работы данного Раздела связана с тем, что

1. хотя методы обработки рядов скоррелированных значений достаточно глубоко разработаны [5, 6], их применение требует учета алгоритма работы программы и теоретического распределения значений конкретной наблюдаемой;

2. игнорирование наличия корреляций способно искажать результат моделирования и приводить к некорректным физическим предсказаниям;

3. данный вопрос упускается из общих учебных курсов; обычно студенты не знакомы с принципами работы с рядами скоррелированных случайных величин.

В тексте диссертационной работы подробно рассматриваются положения автокорреляционного анализа, приводятся формулы для оценки автокорреляционной функции и времени автокорреляции, описывается физическое содержание наличия автокорреляций, объясняются различные сценарии обхода конфигурационного пространства методом Монте-Карло с привлечением “ландшафтной” интерпретации, выясняются причины возможного падения доли принятия (acceptance) и три пути решения проблемы. Рассматривается отличие двух подходов, примененных автором при моделировании систем: **псевдофермионных полей** и **точных фермионных сил**. Так, последнее позволяет делать существенно меньше шагов при обходе конфигурационного пространства, менее часто попадать в окрестности локальных минимумов. С другой стороны, их использование вносит дополнительные погрешности, связанные с вычислением изменения гамильтониана перед принятием решения Метрополиса. С другой стороны, открываются возможности для внесения ряда оптимизаций по времени выполнения программы.

В тексте указывается, что применение автокорреляционного анализа с практической точки зрения важно потому, что значения, получаемые по ряду сильно скоррелированных значений, имеют смещение (bias) от истинного, оцениваемого значения, что может приводить к ошибочным заключениям относительно процессов в модели, использованию неверных (неточных) исходных данных для фитирования, появлению "фантомных" эффектов, наподобие печально известных эффектов конечного объема. Вместе с тем, погрешности за счет автокорреляций могут быть устранены.

Далее выводится оценка дисперсии временного ряда с учетом автокорреляции. Полученное значение показывает, что набор скоррелированных значений можно рассматривать как уменьшенный в 2τ раз набор *истинно независимых* чисел, где τ — время автокорреляции, оцененное одним из нескольких способов. Можно использовать либо величину интегрального времени, либо эмпирического. Также существует подход, основанный на быстром преобразовании Фурье, который позволяет оценить τ. С другой стороны, разработаны алгоритмы, которые позволяют напрямую оценить дисперсию величины по ряду ее временны́х значений. В тексте подробно рассматриваются биннинг и jackknife, а также пример их применения. Эти два способа и были задействованы при выполнении исследований диссертационной работы. В **главе 3.4** показано, что применение рафинированной обработки статистики существенно улучшает результат получаемой теплоемкости.

Часть 3 диссертационной работы посвящена исследованию *расширенной модели Хаббарда на гексагональной решетке с взаимодействиями в узле и с ближайшими соседями*, которая представляет одно из возможных описаний электронов на поверхности графена в режиме сильной связи. Модель формулируется в терминах операторов рождения-уничтожения электронов в узлах решетки с заданной проекцией спина. **Глава 3.1** вводит понятие гамильтониана перескока и объясняет, почему дисперсионное соотношение для электронов на π-орбиталях имеет вид конуса Дирака. Там же приводятся значения для интенсивностей эффективного взаимодействия спинов на одном узле и на соседних.

Глава 3.2 содержит подробный вывод решеточной аппроксимации статистической суммы модели, описываемой гамильтонианом [7]

$$\hat{H} = -\kappa \sum_{x \neq y, \sigma} \hat{c}^{\dagger}_{x,\sigma} \hat{c}_{y,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{x,y} \hat{q}_x V_{xy} \hat{q}_y,$$

где $\kappa = 2.8$ эВ, V_{xy} — матрица электростатического взаимодействия электронов в узлах x и y, $\sigma = \pm 1$ есть проекция спина электрона на ось квантования, $\hat{q} = \hat{c}^{\dagger}_{x,+1} \hat{c}_{x,+1} + \hat{c}^{\dagger}_{x,-1} \hat{c}_{x,-1} - 1$ оператор заряда в узле. Суммы не затрагивают пары узлов дальше соседних. В целях интерпретации микроскопических состояний модели можно использовать два базиса:

электроны со спинами вверх-вниз и электроны-дырки, которые связаны друг с другом следующим образом:

	q	S_z	
$\|-\rangle$	-1	0	$\|h\rangle$
$\|\uparrow\rangle$	0	1/2	$\|eh\rangle$
$\|\downarrow\rangle$	0	-1/2	$\|-\rangle$
$\|\uparrow\downarrow\rangle$	1	0	$\|e\rangle$

Решеточная аппроксимация статистической суммы ищется в базисе грассмановых когерентных состояний и приводит к появлению двух вкладов в решеточное действие: от вспомогательных полей Хаббарда и собственно фермионной части. Последнее традиционно записывается в матричном виде, что приводит к понятию *фермионной матрицы*. В диссертационной работе рассматриваются два случая — использование двух и пяти вспомогательных полей. Выбор в пользу одного из двух способов делается практически в самом начале выкладок, что приводит к различным аналитическим выражениям, подлежащим кодированию.

В тексте диссертационной работы вывод проделан во всех подробностях, с промежуточными выкладками, которые позволяют проконтролировать правильность получаемых выражений. Такая предосторожность не является чрезмерной: лишь некоторые ошибки приводят к нестандартному поведению компьютерной программы, другие же могут скрываться в коде. К счастью, существует несколько тестов, позволяющих проверить корректность работы программы (см. ниже). Они были пройдены успешно.

Окончательный результат выкладок представляется в виде следующих выражений. Решеточная аппроксимация статистической суммы:

$$Z = \int \mathcal{D}[\vec{\varphi}] e^{-S_{\text{HS}}^{(2,5)}} |\det M|^2 \tag{1}$$

содержит три основных элемента: элемент меры бозонных вспомогательных полей Хаббарда ($\vec{\varphi} = \{\varphi, \chi\}$ для двух полей и $\vec{\varphi} = \{\varphi, \chi, \xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}\}$ — для пяти), бозонную часть действия: для двух полей

$$S_{\text{HS}}^{(2)} = \frac{\varphi \widetilde{V}^{-1} \varphi}{2} \delta^n + \frac{1}{2} \frac{\sum\limits_{x,t} \left(\chi_{xt} - (1-\alpha) V_{00} \delta^{1-m}\right)^2}{(1-\alpha) V_{00}} \delta^n,$$

$$\widetilde{V}_{xy} = \alpha V_{00} \delta_{xy} + V_{01}(1 - \delta_{xy}), \qquad 2m - n = 1$$

и для пяти полей ($V'_{00} = V_{00} - 3V_{01}$)

$$S_{\text{HS}}^{(5)} = \frac{1}{2}\frac{\sum\limits_{x,t}\varphi_{xt}^2}{\alpha V'_{00}}\delta^n + \frac{1}{2}\frac{\sum\limits_{x,t}\left(\chi_{xt} - (1-\alpha)V'_{00}\delta^{1-m}\right)^2}{(1-\alpha)V'_{00}}\delta^n + \frac{\sum\limits_{x,t,\mu}(\xi_{xt}^{\mu})^2}{V_{01}}\delta^n.$$

и фермионную матрицу, которая имеет блочный вид

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & M_{0,2T-1} \\ M_{10} & 1 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & M_{21} & 1 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & M_{32} & 1 & & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix},$$

с блоками

$$M_{2t+1,2t} = -e^{\delta\kappa\left\|\sum\limits_{\mu}\delta_{y,x+\mu}\right\|_{N_s\times N_s}},$$

$$(M_{2t+2,2t+1})_{xy} = s\delta_{xy}e^{-B_{xt}}, \qquad s = \begin{cases} -1, & t = \overline{0, T-2} \\ +1, & t = T-1. \end{cases},$$

где координатно-временной набор значений полей Хаббарда имеет вид

$$B_{xt} = \delta^m\left(i\left(\varphi_{xt} + \sum_{\mu}(\xi_{xt}^{(\mu)} + \xi_{x-\mu,t}^{(\mu)})\right) + \chi_{xt}\right).$$

Блоки $M_{2t+1,2t}$ представляют собой плотные матрицы, блоки $M_{2t+2,2t+1}$ — диагональные матрицы.

В выражении (1) определитель фермионной матрицы стоит под квадратом модуля в силу явной симметрии электронов и дырок. В процессе выкладок становится очевидно, что операторы a_x, $a_x^\dagger$ порождают матрицу M, тогда как b_x, $b_x^\dagger$ — $M^\dagger$. Это также продемонстрировано в тексте диссертационной работы.

Глава 3.3 посвящена выводу уравнений молекулярной динамики. Эта часть алгоритма гибридного Монте-Карло позволяет генерировать предложение Метрополиса, т.е. новую конфигурацию, которая будет сравниваться с предыдущей на предмет выгодности движения марковского процесса по конфигурационному пространству. Как рассказывалось в **Главе 2.2**, применение метода молекулярной динамики позволяет сохранить величину принятия (acceptance) в районе 85-98%, но добиться существенной изменчивости (и, следовательно, малой скоррелированности) конфигурации по мере продвижения к области наиболее выгодных при данных параметрах модели значений действия S. С целью воспользоваться гамильтоновыми уравнениями, описывающими эволюцию системы в воображаемом (техническом) времени τ, все множители под интегралом статистической суммы рассматривают как *эффективное* действие модели

$$S_{\text{eff}} = S_{\text{HS}}(\vec{\varphi}) - \ln|\det M(\vec{\varphi})|^2$$

и решают уравнения движения вспомогательной механической системы с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}P^2 + S_{\text{eff}}.$$

Для этой цели получают явные аналитические значения производной $-\partial S/\partial\varphi_k$, что может быть сделано одним из двух способов: при помощи псевдофермионных полей и точных фермионных сил. В тексте диссертационной работы обсуждаются оба способа, приводятся конкретные выражения для значений производных для каждого из полей, рассматриваются шаги обработки фермионной матрицы M и ее производных $\partial M/\partial\varphi_k$ в случае точных фермионных сил. Указывается на особенности шагов алгоритма, которые необходимо реализовать для сохранения устойчивости численных вычислений.

Так, второй метод имеет существенный недостаток, связанный с накоплением ошибок округления при перемножении матриц. Этот эффект известен с 1981 года [8] и требует исправления: через каждые K шагов необходимо заново решать СЛАУ, получая точную (в рамках машинной точности) матрицу в середине алгоритма. Автором использовано получение "аккуратной" матрицы на каждом 18-ом шаге.

С другой стороны, вычисления, выполненные при помощи *точных фермионных сил*, проявляют хорошую численную устойчивость с точки зрения обратимости эволюции. Это принципиально важно для соблюдения эргодичности, что является одним из основных требований для получения качественного марковского процесса. Кроме того, в процессе практического применения оказывается, что величина шага молекулярной динамики может быть выбрана в 100-350 раз больше, чем в методе псевдофермионных полей. Это обеспечивает более дальние "шаги" в конфигурационном пространстве, что способствует лучшей изменчивости конфигураций и снижению автокорреляций наблюдаемых. Наконец, данный подход существенно сокращает количество шагов, необходимых для достижения “типичных” конфигураций при заданных параметрах моделирования и для получения приемлемой статистики временны́х рядов Монте-Карло.

Глава 3.4 содержит ряд результатов, подтверждающих работоспособность программы, и новые результаты, полученные автором. Часть из них получена путем использования метода двух полей, потому что этого оказывается достаточно для получения достоверных результатов. В начале главы приведены формулы, использованные для кодирования метода двух полей: потенциальная часть гамильтониана и производная от действия Хаббарда-Стратоновича, содержащая обратную матрицу взаимодействия электронов.

Перед началом работы выполнена проверка программы с целью убедиться в отсутствии скрытых дефектов и нарушения заложенных в метод Монте-Карло физических оснований. Полное описание можно найти в тексте диссертационной работы, здесь приводится сокращение:

1. Проверка на обратимость интегрирования молекулярной динамики. Удостоверяются, что результат интегрирования уравнений движения вперед-назад представляет разность порядка машинного нуля. Это позволяет проверить правильность алгоритма в отношении обратимости (свойство, закладываемое в интегратор аналитически). Необходимое требование эргодичности.

2. Проверка на консервативность молекулярной динамики. Проверяется сохранение энергии в схеме интегрирования в пределе бесконечно малого шага, и определяется минимальное количество шагов алгоритма, требуемое для работы с конкретным видом действия модели. Необходимое условие эргодичности.

3. Кривые термализации. Под *термализацией* понимают достижение вспомогательными полями значений, характерных для данного набора значений параметров модели. Все поля Хаббарда должны синхронно достичь “типичной” окрестности конфигурационного пространства, после чего действие модели престает значительно меняться, а характер эволюции теряет направленность. Необходимое (но не достаточное) условие нескоррелированности последовательности измерений наблюдаемых. Более того, позволяет выявить промах мимо допустимых с точки зрения метода Монте-Карло значений параметров модели.

4. Для метода псевдофермионных полей актуальна проверка “насыщения значений” энергетических наблюдаемых. Программа работает правильно, если последовательные вычисления значений кинетической энергии не выявляют трендов.

5. Проверка вычисления фермионных сил. Сравнивают значения, которые дают явные формулы, закодированные в методе молекулярной динамики для скорости изменения импульсов, и конечно-разностные производные, вычисленные по действию при помощи отклонения значения поля “вручную”. Удается достичь совпадения с точностью до 10^{-5}. Малейшая ошибка в коде сразу проявляется скачком различия на 4-5 порядков. Позволяет выявить расходимость схемы в области низких температур $T < 0.07\kappa$.

6. Проверка подпрограмм решения СЛАУ для фермионной матрицы и матрицы $\widetilde{V}$.

Далее показывается результат вычисления параметров порядка состояний SDW и CDW модели. Дается определение оператора проекции спина на ортогональное плоскости решетки направление:

$$\hat{S}_{zx} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\hat{c}^{\dagger}_{x,+1} & \hat{c}^{\dagger}_{x,-1}\end{pmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{x,+1}\\ \hat{c}_{x,-1}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\hat{a}^{\dagger}_{x}\hat{a}_{x} + \hat{b}^{\dagger}_{x}\hat{b}_{x} - 1).$$

Показано согласование полученных результатов со значениями, опубликованными в рецензируемых научных изданиях. Дается определение экситонного конденсата в модели Хаббарда, и рассматривается его формирование с микроскопической точки зрения. Описывается сущность эффекта конечного объема, и показывается, как можно получить предсказания в пределе бесконечного объема решетки.

Описывается метод и содержание вычисления теплоемкости электронных возбуждений в расширенной модели Хаббарда. Вычисления проводились при $V_{00} = 3.2\kappa, V_{01} = 0.8\kappa$, что является оценкой параметров для состояния физического графена [9]. В процессе работы использовались (и сравнивались между собой) два определения: по производной $C = \partial\langle\hat{H}\rangle/\partial T$ и дисперсионное $C = (\langle\hat{H}^2\rangle - \langle\hat{H}\rangle^2)/T^2$. Принципиально важным обстоятельством является необходимость определения явного вида оператора $\langle\hat{H}^2\rangle$ через матричные элементы обратной фермионной матрицы. Вычисления были проделаны автором: аналитически, затем путем написания двух независимых кодов программ. Результаты сравнивались поэлементно. Выражение приводится в Приложении к диссертационной работе и представляет собой сумму 66 слагаемых, которые включают в себя спаривания четырех, шести и восьми операторов рождения-уничтожения.

В ходе работы показано, что использование дисперсионного подхода к теплоемкости требует применение *рафинированных* методов обработки статистики (чему посвящена **Глава 2.3**), дополнительный контроль к избежанию метастабильных состояний в ходе марковского процесса. Энергия $\mathcal{E} = \langle \hat{H} \rangle$ была рассчитана как функция температуры для широкого диапазона от 0.3 эВ до 11 эВ с целью построения графика с плотным содержанием точек, что давало бы возможность вычисления теплоемкости по температурной производной. Полученная зависимость $\mathcal{E}(T)$ проявляет физически корректное поведение с учетом факторов решеточных вычислений. В области выше 5 эВ наблюдается эффект насыщения кинетической энергии. Моделирование дает стабильный результат 0.8 (относительных единиц) в области 2 эВ. Получается совпадение результатов вычислений по двум подходам. Оказалось, что при использовании биннинга и устранении взаимных корреляций, бо́льших в случае использования двух полей (см. ниже), результат определения теплоемкости "исправляется" до 1, что подтверждает необходимость аккуратной обработки статистики. Интересен вопрос вычислений при средних температурах (0.2-1.0 эВ): наблюдается снижение величины C до 0.5 в районе 0.5 эВ. Технические трудности преодолеваются путем использования метода 5 полей, о чем будет сказано ниже.

По полученным в работе данным оказывается возможным провести линейную аппроксимацию значений теплоемкости в этом диапазоне, откуда можно оценить значение энергии Ферми для материала. Это так, потому что теоретически для случая идеального ультрарелятивистского идеального двумерного газа получено

$$c_v = \frac{2}{3}\pi^2 \frac{T}{\varepsilon_F},$$

откуда, если найден экспериментальный коэффициент прямой пропорциональности $\mathcal{E}(T)$, *оценивают* значение энергии Ферми ε_F. Наши вычисления дают ответ порядка 8.7 эВ, что по порядку величины *согласуется* с работой выхода электрона из графена с никелевым напылением (5 эВ). Учитывая погрешности метода и грубость оценки, автор расценивает данное согласование как хорошее свидетельство в пользу правильности рассуждений и проводимых вычислений.

Глава 3.5 рассказывает о достоинствах использования 5 полей при использовании линковых вспомогательных полей Хаббарда. Это представляет научную новизну работы и предлагается автором *впервые*. В тексте диссертации перечисляются пункты мотивации и ожиданий от введения линковых полей. Затем на конкретных примерах доказывается, что улучшения в самом деле достигаются. Кратко приведем результаты:

1. В 4-5 раз сокращается количество шагов алгоритма, необходимых для достижения термализованных конфигураций при моделировании. Это существенно ускоряет процесс проведения расчетов. Подтверждено визуальным анализом временны́х рядов, подвижных средних и автокорреляционных времен.

2. Время работы программы увеличивается не более, чем на 4.4%, а использование метода точных фермионных сил открывает возможности оптимизации кода, что позволило уменьшить автору время работы в 30 раз.

3. Наблюдается заметное уменьшение автокорреляционных длин рядов наблюдаемых при всех температурах вычислений, но, особенно, в области низких температур ($T < 0.3\kappa$). Это наиболее физически интересная область. Можно уменьшить общую статистику, а значит, и время работы программы.

4. Распределения значений наблюдаемых характеризуются менее "тяжелым" полиномиальным хвостом (heavy-tailed) в случае пяти полей, чем для двух. Это существенно для анализа дисперсий наблюдаемых и флуктуаций.

5. Получено указание на меньшую встречаемость метастабильных состояний в ходе запусков программы Монте-Карло, что способствует надежности счета. Если же метастабильное состояние все-таки имеет место, это легко выбраковывается резким повышением времени автокорреляции, что представляет особое удобство для контроля полученных данных.

В указанной главе приводятся гистограммы распределений наблюдаемых, показывается бо́льшая устойчивость результатов при вычислении с пятью полями, демонстрируются соответствующие графики для кинетической и потенциальной энергий, $\langle \hat{S}_z^2 \rangle$, квадрата потенциальной энергии, ее кулоновской части, квадрата гамильтониана. Приводится таблица, доказывающая существенное уменьшение времени автокорреляции для вычислений по двум и пяти полям.

T/κ	2 поля	5 полей
0.1	5.6	0.8
0.15	5.2	1.2
0.2	4.6	1.0
0.25	4.0	0.9
0.3	3.6	0.8
0.4	2.1	1.0
0.5	1.8	1.1
0.6	1.5	1.2
0.8	1.6	1.1

Затем рассказывается о результатах исследования теплоемкости при температурах от 0.49 до 1.68 эВ.

В **главе 3.6** рассмотрен интересный результат, связанный с фазовым переходом в расширенной модели Хаббарда. Показывается, что путем модификации интенсивности взаимодействия электронов на одном узле решетки

$$V_{00} = \frac{U-\Delta}{2}\sum_{x\in A}\hat{q}_x^2 + \frac{U+\Delta}{2}\sum_{x\in B}\hat{q}_x^2$$

так, чтобы существовало энергетическое различие нахождения электронов на разных подрешетках, можно добиться смещения фазового перехода полуметалл-диэлектрик в сторону меньших значений U, а именно: от 3.7κ к 3.2κ и далее. Приводятся графики соответствующих расчетов, объясняется причина возникновения состояния SDW, подробно обсуждается, что происходит при открытии "энергетической щели" между двумя подрешетками (объясняется миграция спинов с одной подрешетки на другую), делается экстраполяция к пределу бесконечного объема.

Получен следующий результат: путем задания соответствующего $V_{00} = U \pm \Delta$ можно добиться возникновения диэлектрического состояния (открытия щели в зонной структуре) в электронных возбуждениях графена при физических параметрах ($V_{00} \approx 3.27\kappa, V_{01} \approx 0.8\kappa$), что может дать возможность использования этого материала в схемах с полупроводниками в интересах электроники. Создание различия on-site-энергий на 2Δ возможно благодаря подбору соответствующих подложек (например, карбида кремния и нитрида бора) [10].

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем:

1. Исследована фазовая диаграмма компактной электродинамики в широком диапазоне параметров λ, β; выделены области различного упорядочения топологических дефектов. Определены их корреляционные характеристики в каждой из областей.

2. Предложен принципиально новый способ описания магнитных токов и коллективных свойств топологических дефектов при помощи построения геометрических объектов. Найдены и проанализированы гистограммы распределения этих объектов в разных фазах. Показано наличие устойчивой связи характерных свойств и фаз модели.

3. Проанализирована имеющаяся научная литература на предмет способов обработки статистики рядов измерений Монте-Карло, в результате написаны программные комплексы (pipeline), позволяющие определить средние и оценку погрешностей результатов с учетом автокорреляций и смещений (bias) в марковском процессе.

4. Выведены выражения решеточной аппроксимации в расширенной модели Хаббарда с использованием формализмов двух и пяти полей при помощи двух методов: псевдофермионных полей и точных фермионных сил. Реализованы соответствующие программы, проведено моделирование в широком диапазоне параметров $V_{00}, V_{01}, \beta = 1/T$ модели.

5. Доказаны преимущества использования пяти полей при расчетах методом Монте-Карло.

6. Предложен способ нарушения подрешеточной симметрии на гексагональной решетке, который дает возможность направленного сдвига фазового перехода полуметалл-диэлектрик в сторону значений параметров модели, близких к физическим.

7. Найдены аналитические выражения для наблюдаемых — средней энергии и среднего квадрата энергии электронных возбуждений — и показана возможность вычисления теплоемкости при помощи моделирования Монте-Карло в диапазоне температур от 0.056 эВ до 5.6 эВ.

Список работ, опубликованных автором по теме диссертации

Статьи, опубликованные в журналах Scopus, WoS, RSCI

1. Мостовой С.Д., Павловский О.В. Кристаллы топологических вихрей в компактной электродинамике // Ядерная физика и инжиниринг, Т. 11, № 4, С. 219-224, 2020. (импакт-фактор WOS: 0.132); Mostovoy S.D., Pavlovsky O.V. Crystals of Topological Vortices in Compact Electrodynamics // Physics of Atomic Nuclei, Т. 83, № 12, С. 1662-1666, 2020. (импакт-фактор WOS: 0.410) DOI:10.1134/S1063778820100166

2. Mostovoy S.D., Pavlovsky O.V. Space clusters of magnetic currents in modified U(1) gauge model: Geometrical approach // International Journal of Modern Physics A, Т. 37, № 24, С. 2250140-307, 2022. (импакт-фактор WOS: 1.475) DOI:10.1142/S0217751X22501408

3. Mostovoy S., Pavlovsky O. Link auxiliary field method in the extended Hubbard model // Physical Review E, Т. 107, № 2, С. 025307, 2023. (импакт-фактор WOS: 2.707) DOI:10.1103/PhysRevE.107.025307

4. Mostovoy S.D., Pavlovsky O.V. Development of a Method for Determining the Heat Capacity of Graphene by the Hybrid Monte Carlo Method // Physics of Atomic Nuclei, Т. 85, № Suppl 2, С. S73–S79, 2022. (импакт-фактор WOS: 0.410) DOI:10.1134/S1063778822140101

Тезисы докладов

5. Мостовой С.Д. Анализ фазовых свойств упорядоченных магнитных потоков в четырехмерной калибровочной XY-модели. Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов 2019 Москва, Россия, 8-12 апреля 2019.

6. Мостовой С.Д., Павловский О.В. Кристаллы топологических вихрей в компактной электродинамике. Молодежная конференция по теоретической и экспериментальной физике (МКТЭФ-2019), Москва, НИЦ “Курчатовский институт” – ИТЭФ, Россия, 25-28 ноября 2019.

7. Мостовой С.Д., Павловский О.В. Развитие способа определения теплоемкости графена методом гибридного Монте-Карло . Молодежная конференция по теоретической и экспериментальной физике (МКТЭФ-2021), Москва, НИЦ “Курчатовский институт” – ИТЭФ, Россия, Россия, 15-18 ноября 2021.

8. Мостовой С.Д. Влияние нарушения подрешеточной симметрии на фазовую диаграмму расширенной модели Хаббарда. XXIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов 2022», Москва, Россия, 11-22 апреля 2022.

Список цитированной литературы

[1] S.D. Mostovoy, O.V. Pavlovsky. Space clusters of magnetic currents in modified U(1) gauge model: Geometrical approach. International Journal of Modern Physics A, 37(24):2250140, 2022.

[2] K. G. Wilson. Confinement of quarks. Phys. Rev. D, 10:2445, 1974.

[3] W. Kerler, C. Rebbi, A. Weber. Phase structure and monopoles in u(1) gauge theory. Phys. Rev. D, 50:6984-6993, 1994.

[4] S. Wessel. Monte Carlo Simulations of Quantum Spin Models, 2013. Режим доступа: https://www.cond-mat.de/events/correl13/manuscripts/wessel.pdf

[5] H.G. Evertz. Computer Simulations, 2020. Режим доступа: https://itp.tugraz.at/ evertz/Computersimulations/cs2020.pdf

[6] W. Janke. Monte Carlo Simulations in Statistical Physics – From Basic Principles to Advanced Applications. Order, Disorder and Criticality. World Scientific, pp. 93-166, 2012.

[7] P. Buividovich, D. Smith, M. Ulybyshev L. von Smekal. Hybrid Monte Carlo study of competing order in the extended fermionic Hubbard model on the hexagonal lattice. Phys. Rev. B 98:235129, 2018.

[8] J.E. Hirsch, D.J. Scalapino, R.L. Sugar, R. Blankenbecler. Efficient Monte Carlo Procedure for Systems with Fermions. Phys. Rev. Lett. 47:1628, 1981.

[9] T.O. Wehling, E. Şaşıoğlu, C. Friedrich, A.I. Lichtenstein, M.I. Katsnelson, S. Blügel. Strength of Effective Coulomb Interactions in Graphene and Graphite. Phys. Rev. Lett. 106:236805, 2011.

[10] J. Mao, Y. Jiang, D. Moldovan et al. Realization of a tunable artificial atom at a supercritically charged vacancy in graphene. Nature Phys, 12:545–549, 2016.