

UNIVERZITET U BEOGRADU
FIZIČKI FAKULTET



diplomski rad

Uticaj asimetrije gustine stanja na osobine Motovog metal-izolator prelaza

Jakša Vučićević

Beograd, jun 2009.

Članovi komisije:

prof. dr Zoran Radović (predsednik komisije)

dr Darko Tanasković (rukovodilac rada)

dr Zoran Nikolić

Ovaj rad je nastao u Laboratoriji za primenu računara u nauci Instituta za fiziku u Beogradu.

Zahvaljujem svima koji su imali i najmanji doprinos u izradi i konačnom obliku ovog rada. Posebno se zahvaljujem dr Darku Tanaskoviću na pruženoj pomoći i ukazanoj pažnji.

Sadržaj

1	Uvod	2
2	Gustina stanja kristalne rešetke	3
2.1	Hamiltonijan jake veze	3
2.2	Neinteragujuća gustina stanja	4
2.3	Gustina stanja u primerima nekih jednostavnih rešetki	5
2.3.1	1-D rešetka bez bazisa	5
2.3.2	1-D rešetka s bazisom	7
2.3.3	2-D kvadratna rešetka s bazisom	9
2.3.4	2-D trouglasta rešetka bez bazisa	13
2.3.5	2-D trouglasta rešetka sa bazisom	16
3	Dinamička teorija srednjeg polja (DMFT)	19
3.1	Habardov model	19
3.2	DMFT metod	19
4	Motov prelaz kod rešetke sa asimetričnom gustinom stanja	24
4.1	Motov prelaz	24
4.2	Asimetrija i hemijski potencijal	25
4.3	Formiranje DMFT petlje	26
4.4	Fazni dijagram	29
5	Zaključne napomene	32
A	Poredjenje sa rešenjem u atomskom limitu	33

1 Uvod

Savremena fizika čvrstog stanja odlično opisuje osobine velikog broja materijala. Konvencionalni metali, kao i veći broj poluprovodnika i izolatora ispoljavaju osobine predviđene zonskom teorijom materijala, koja u velikoj meri zanemaruje međusobnu interakciju elektrona u kristalu. Aproksimacija realnog kristala modelom neinteragujućeg, ili slabo interagujućeg elektronskog gasa u periodičnom potencijalu čvorova rešetke u tim slučajevima je opravdana [2]. Medjusobno kulonovsko odbijanje je efektivno malo iz dva razloga. Prvi razlog je izraženo ekraniranje, što čini medjuelektronsku interakciju kratkodometnom (reda konstante rešetke). Drugi razlog je to što je, usled Paulijevog principa, deo faznog prostora dostupan elektronima za rasejanje vrlo mali, pa se sistem može opisati slabo interagujućim Landauovim kvazi-česticama.

Medjutim, osobine pojedinih klasa materijala koji su predmet intenzivnog istraživanja poslednjih decenija, nije moguće objasniti zonskom teorijom. To su uglavnom materijali sa delimično popunjenim d i f ljuskama. U eksperimentima sa ovim materijalima je primećen veliki broj neobičnih pojava od kojih su neke i vrlo perspektivne za primenu. Na primer, visokotemperaturna superprovodljivost (na $T > 77\text{K}$) primećena je kod materijala sa bakar-oksidi ravnima, dok je kod vanadijum-oksida primećen metal-izolator prelaz sa ogromnom promenom u otpornosti. Neki lantanidi i aktinidi, pri odredjenim uslovima trpe fazni prelaz praćen velikim skokom specifične zapremine. Dalje, kod nekih materijala, elektroni se ponašaju kao da im je masa hiljadama puta veća, pa su nazvani sistemi teških fermiona. Zajednička osobina svih ovih materijala je izuzetna osetljivost na male promene pritiska, temperature ili spoljašnjeg magnetnog polja. Sve ove pojave nisu objašnjive zonskom teorijom zato što je njihov uzrok nezanemarljivo jaka medjusobna interakcija elektrona [4].

Fermijeva energija je veoma velika energija, pa se elektroni kroz kristal kreću jako velikim brzinama. Takve, putujuće, delokalizovane elektrone je onda pogodnije predstaviti u bazu ravnih talasa (Blohovim talasnim funkcijama karakterisanim kristalnim impulsom k). Medjutim, kod materijala sa izraženom medjusobnom interakcijom elektrona, Kulonova energija postaje uporediva sa Fermijevom energijom, pa je ponekad energetski povoljnije da se elektroni lokalizuju po pojedinačnim atomima, pa dolazi do izražaja i čestična priroda elektrona. U pojedinim slučajevima, moraju se istovremeno razmatrati i putujući i lokalizovani elektroni, što čini problem opisa ovakvih sistema dodatno složenim.

Potpuno razumevanje fizike materijala sa izraženom korelacijom elektrona (jako korelisanih materijala) je složen više-čestični problem, od velike važnosti za buduće primene. I pored mnogih novih saznanja potpomognutim i pojavom modernih super-računara, mnoge od osobina jako korelisanih materijala nemaju za sad zadovoljavajuće teorijsko objašnjenje, a samo za pojedine sisteme smo u stanju da damo pouzdane kvantitativne predikcije.

Najvažnija posledica interakcije medju elektronima je Motov fazni prelaz pri kome materijal naglo menja otpornost i od metala postaje izolator (i obrnuto). Ispostavlja se da postoji čitav niz izolatora (Motovi izolatori) sa delimično popunjenom valentnom zonom

koji bi po zonskoj teoriji bili metali. U ovim materijalima, lokalizacija elektrona i otvaranje energijskog procepa na fermijevom nivou nastaje usled jake interakcije izmedju elektrona. Motov prelaz je predmet mnogobrojnih istraživanja. Najmoderniji metod za njegovo ispitivanje je DMFT (Dynamic Mean Field Theory) koji za razliku od prethodno korišćenih metoda u potpunosti uzima u obzir i kvantne efekte, a egzaktan je u limitu velikog koordinacionog broja [4, 3]. Najjednostavniji model koji opisuje Motov metal-izolator prelaz je Habardov (Hubbard) model. Priroda Motovog prelaza je detaljno ispitana za rešetku sa simetričnom gustinom stanja za popunjenost $1/2$.

U ovom radu ispitaćemo Motov prelaz i odrediti fazni dijagram Habardovog modela kod rešetke sa asimetričnom gustinom stanja. U prvom delu, navešćemo nekoliko realističnih rešetki i pokazati da su gustine stanja, zapravo, najčešće asimetrične. Posebno ćemo ispitati gustinu stanja sistema sa dve podrešetke. Ovakav sistem, koji opisuje talas gustine naelektrisanja (*Charge Density Wave*, CDW) je, veruje se, relevantan za opis metal-izolator prelaza u dvodimenzionalnom elektronskom gasu (“Wigner-Mott”-ov prelaz) [7]. Posle toga ćemo rešiti DMFT jednačine kvantnim Monte Karlo metodom u kontinualnom vremenu [6] i pokazati kakav uticaj asimetrija ima na osobine Motovog prelaza i fazni dijagram. U radu ćemo se ograničiti na rešenje modela u paramagnetnoj fazi.

2 Gustina stanja kristalne rešetke

U ovom poglavlju, definisaćemo gustinu stanja i prikazati postupak njenog nalaženja u modelu neinteragujućih elektrona. Postoji dva pristupa u teorijskom opisu nekorelisanih kristala: model jake veze (tight-binding model), gde se polazi od Vanijeovih (Wannier) lokalizovanih talasnih funkcija i model skoro slobodnih elektrona (nearly-free model) gde se polazi od talasnih funkcija oblika ravnih talasa. Ovde ćemo se skoncentrisati samo na Tight-binding model jer je Habardov model, koji ćemo kasnije proučavati, najjednostavnije definisati u bazu lokalizovanih talasnih funkcija.

2.1 Hamiltonijan jake veze

Zamislimo kubnu kristalnu rešetku konstante rešetke 1 m. Neka su u čvorovima atomi sa jednim valentnim elektronom. Atomi u takvoj rešetki praktično “ne osećaju” prisustvo drugih atoma i njihova fizika se svodi na fiziku izolovanih atoma. Medjutim, u realnim kristalima, razmak izmedju atoma je daleko manji. Tada, preklapanje elektronskih orbitala različitih atoma više nije u potpunosti zanemarljivo: elektroni imaju malu, ali konačnu šansu da se nadju na nekom od susednih atoma. Elektroni u kristalu čine kvantni sistem i svaki od njih može da se nadje u N različitih stanja, na N različitih čvorova rešetke. Elektronska stanja se karakterišu kristalnim impulsom k od koga zavisi i energija datog stanja. U termodinamičkom limitu imaćemo kontinuum stanja koje elektroni mogu da zauzimaju i umesto jedne energije ε_0 imaćemo energetska zonu, opseg energija koje elektron može da ima. Zbog Paulijevog principa isključenja ni jedna dva

elektrona ne mogu imati isto k i σ pa u jedno k stanje “staje” dva elektrona. Ovakav model kristala, u kome elektroni ne interaguju medjusobno i mogu da se “šetaju” od atoma do atoma u rešetki, opisan je Hamiltonijanom jake veze (tight-binding Hamiltonian, TBH). Svojstvene vrednosti hamiltonijana daju opseg energija koje elektroni mogu da imaju u datom kristalu. Širina tog opsega zavisi od oblika kristalne rešetke ali i preklapljenosti atomskih orbitala, tzv. amplitude preskoka (“hopping amplitude”), t , koja je veća što je razmak izmedju atoma manji. [2] Opšti Hamiltonijan jake veze dat je u prvoj kvantizaciji kao:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{i}} |\vec{i}\rangle \varepsilon_{\vec{i}} \langle \vec{i}| + \sum_{\vec{i}} \sum_{\vec{j} > \vec{i}} |\vec{i}\rangle t_{\vec{i},\vec{j}} \langle \vec{j}|, \quad (1)$$

gde \vec{i} i \vec{j} idu po svim čvorovima rešetke, $\varepsilon_{\vec{i}}$ je energija posmatrane atomske orbitale \vec{i} -tog atoma, a $t_{\vec{i},\vec{j}}$ je amplituda preskoka izmedju \vec{i} -tog i \vec{j} -tog čvora. O ovome će još reći biti kasnije.

2.2 Neinteragujuća gustina stanja

Rešavanjem šredingerove jednačine koja opisuje elektrone u datoj kristalnoj rešetki, možemo da nadjemo disperzionu relaciju za dati sistem: zavisnost energije elektrona od kristalnog impulsa k (u odsustvu spoljnog magnetnog polja energija elektrona ne zavisi od njegovog spina; stanja sa različitim k mogu imati i istu energiju). Disperziona relacija nam omogućava da odredimo i veličinu od primarnog značaja za analizu elektronskih osobina - “gustinu stanja” $\rho(\varepsilon)$. Ona predstavlja broj različitih stanja u jediničnom intervalu energije (dakle, broj stanja sa istom energijom podeljeno ukupnim brojem k stanja, tj. ukupnim brojem atoma, N ; gustina stanja je normalizovana na 1). Iz poznavanja gustine stanja nekog kristalnog sistema, o njemu je moguće zaključiti mnogo toga. Već na prvi pogled možemo zaključiti da li je materijal metal ili izolator. Takodje, gustina stanja na fermijevom nivou zajedno sa oblikom i dimenzionalnošću rešetke određuje i magnetne osobine sistema.

Gustinu stanja možemo neposredno da nadjemo metodom histograma, kao što je prikazano na slici 1. Drugi način je preko formalizma Grinove funkcije (o kojoj će kasnije biti više reči). Grinova funkcija je definisana kao [5]:

$$\hat{G}(z) = \frac{1}{z - \hat{H}} = \frac{1}{z - \hat{H}} \sum_n |\vec{k}_n\rangle \langle \vec{k}_n| = \sum_n \frac{1}{z - \hat{H}} |\vec{k}_n\rangle \langle \vec{k}_n| = \sum_n \frac{|\vec{k}_n\rangle \langle \vec{k}_n|}{z - E(\vec{k}_n)}, \quad (2)$$

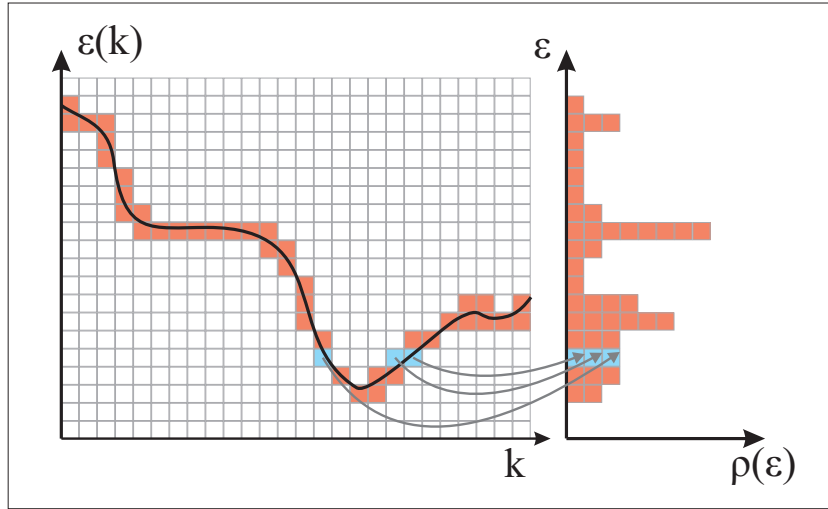
gde je \hat{H} Hamiltonijan, $|\vec{k}_n\rangle$ su svojstvena stanja Hamiltonijana, a $E(\vec{k}_n)$ su odgovarajuće svojstvene vrednosti. Kada znamo Grinovu funkciju, gustina stanja je data kao:

$$\rho(\varepsilon) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Tr} \hat{G}(\varepsilon \pm i\eta) \right] \quad (3)$$

U termodinamičkom limitu, možemo da pišemo:

$$\rho(\varepsilon) = \mp \frac{1}{\pi} \frac{\Omega_0}{(2\pi)^d} \text{Im} \left[\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{IBZ} \frac{d\vec{k}}{\varepsilon - E(\vec{k}) \pm i\eta} \right] \quad (4)$$

gde je Ω_0 zapremina elementarne ćelije rešetke, a d dimenzionalnost rešetke. Integracija se vrši po prvoj Brillouinovoj zoni. Problem sa ovom metodom je što kada se numerički računa vrednost integrala, moramo da se zadovoljimo nekom konačnom vrednošću η , što unosi numeričku grešku.



Slika 1: Metoda Histograma za proizvoljnu disperzionu relaciju

2.3 Gustina stanja u primerima nekih jednostavnih rešetki

Nalaženje analitičkog izraza za gustinu stanja je moguće samo za najjednostavnije rešetke. Za ostale rešetke gustine stanja određujemo numerički.

2.3.1 1-D rešetka bez bazisa

Opšti Hamiltonijan jake veze dat je sa:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{i}} |\vec{i}\rangle \varepsilon_{\vec{i}} \langle \vec{i}| + \sum_{\vec{i}, \vec{j}} |\vec{i}\rangle t_{\vec{i}, \vec{j}} \langle \vec{j}| \quad (5)$$

Svojevstvena stanja hamiltonijana u tom slučaju su periodične, Bločove, talasne funkcije:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{i}} e^{i\vec{k}\vec{i}} \phi(\vec{r} - \vec{i}), \quad (6)$$

gde \vec{i} ide po svim sajtovim rešetke, $\phi(\vec{r} - \vec{i}) \equiv |\vec{i}\rangle$ je Vanijeova talasna funkcija, lokalizovana na \vec{i} -tom čvoru rešetke. One zadovoljavaju:

$$\psi(\vec{r} + \vec{a}) = e^{i\vec{k}\vec{a}}\psi(\vec{r}), \quad (7)$$

gde je \vec{a} zbir celobrojnih umnožaka vektora periodičnosti rešetke. U Dirakovoj notaciji pišemo:

$$|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}} e^{i\vec{k}\vec{i}} |\vec{i}\rangle \quad (8)$$

i možemo da napišemo Šredingerovu jednačinu:

$$\begin{aligned} \hat{H}|\vec{k}\rangle &= E(\vec{k})|\vec{k}\rangle \quad (9) \\ \left(\sum_{\vec{i}} |\vec{i}\rangle \varepsilon_{\vec{i}} \langle \vec{i}| + \sum_{\vec{i}, \vec{j}} |\vec{i}\rangle t_{\vec{i}, \vec{j}} \langle \vec{j}| \right) \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}} e^{i\vec{k}\vec{i}} |\vec{i}\rangle &= E(\vec{k})|\vec{k}\rangle \\ \sum_{\vec{i}} |\vec{i}\rangle \varepsilon_{\vec{i}} \langle \vec{i}| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}} e^{i\vec{k}\vec{i}} |\vec{i}\rangle + \sum_{\vec{i}, \vec{j}} |\vec{i}\rangle t_{\vec{i}, \vec{j}} \langle \vec{j}| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}} e^{i\vec{k}\vec{i}} |\vec{i}\rangle &= E(\vec{k})|\vec{k}\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}, \vec{i}'} \varepsilon_{\vec{i}} e^{i\vec{k}\vec{i}} |\vec{i}\rangle \langle \vec{i}'| + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}, \vec{i}', \vec{j}} t_{\vec{i}, \vec{j}} e^{i\vec{k}\vec{i}} |\vec{i}\rangle \langle \vec{i}'| &= E(\vec{k})|\vec{k}\rangle \end{aligned}$$

Kako je poznato da $\langle \vec{i}' | \vec{i} \rangle = \delta_{\vec{i}, \vec{i}'}$ pišemo:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}} \varepsilon_{\vec{i}} e^{i\vec{k}\vec{i}} |\vec{i}\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}, \vec{j}} t_{\vec{i}, \vec{j}} e^{i\vec{k}\vec{i}} |\vec{i}\rangle = E(\vec{k})|\vec{k}\rangle \quad (10)$$

Treba primetiti da $t_{\vec{i}, \vec{j}} = t(\vec{i} - \vec{j}) = t(\vec{s})$ pa možemo da preformulišemo:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}} \varepsilon_{\vec{i}} e^{i\vec{k}\vec{i}} |\vec{i}\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{s}} t_{\vec{s}} e^{i\vec{k}\vec{s}} \sum_{\vec{j}} e^{i\vec{k}\vec{j}} |\vec{j}\rangle = E(\vec{k})|\vec{k}\rangle \quad (11)$$

Uz pretpostavku da su svi atomi isti, tj da ε ne zavisi od \vec{i} i neka je jednako ε_0 :

$$\varepsilon_0 \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}} e^{i\vec{k}\vec{i}} |\vec{i}\rangle + \sum_{\vec{s}} t_{\vec{s}} e^{i\vec{k}\vec{s}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}} e^{i\vec{k}\vec{i}} |\vec{i}\rangle = E(\vec{k})|\vec{k}\rangle \quad (12)$$

Prepoznajemo:

$$\left(\varepsilon_0 + \sum_{\vec{s}} t_{\vec{s}} e^{i\vec{k}\vec{s}} \right) |\vec{k}\rangle = E(\vec{k})|\vec{k}\rangle \quad (13)$$

To jest, dobili smo disperzionu relaciju u opštem slučaju:

$$E(\vec{k}) = \varepsilon_0 + \sum_{\vec{s}} t_{\vec{s}} e^{i\vec{k}\vec{s}} \quad (14)$$

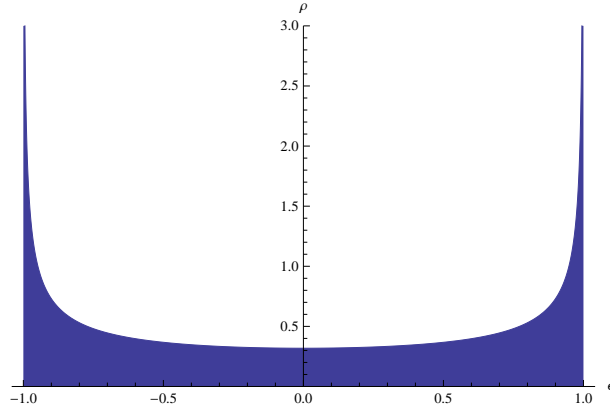
Za konkretan slučaj 1-D rešetke sa svim istim atomima na podjednakim udaljenostima, možemo načiniti dodatnu aproksimaciju da značajan doprinos ima samo "hopping" između najbližih suseda. Kako je razdaljina od atoma do svih njegovih najbližih suseda ista, tako su i hopping amplitude za odgovarajuće preskoke iste, t . Za 1-D rešetku, lako se dobija:

$$E(k) = \varepsilon_0 + 2t \cos ka. \quad (15)$$

Uz noramtivni faktor $\Omega/(2\pi)^d$, gde je Ω zapremina elementarne ćelije a d dimenzionalnost rešetke, dobijamo:

$$\rho(\varepsilon) = \mp \frac{1}{\pi} \frac{2a}{2\pi} \text{Im} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{\varepsilon - \varepsilon(k)} = \frac{a\theta(4t - |\varepsilon - \varepsilon_0|)}{\pi \sqrt{4t^2 - (\varepsilon - \varepsilon_0)^2}} \quad (16)$$

gde je θ step funkcija. [5]

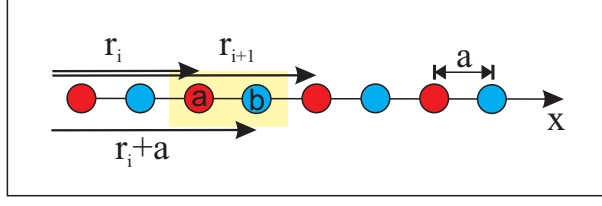


Slika 2: Gustina stanja za linearnu, 1D rešetku, izračunatu preko grinove f-je, za $a = 1$, $t = 0.5$ i $\varepsilon_0 = 0$.

2.3.2 1-D rešetka s bazisom

U slučaju kristala sa dve podrešetke, jednostavnije nam je da predjemo u drugu kvantizaciju. Takodje, odmah ćemo zadržati samo preskok između najbližih suseda (t), a pretpostavićemo i da je razmak između svih atoma podjednak (a). Tada, Tight Binding Hamiltonijan je dat kao:

$$\hat{H} = \sum_i a_i^\dagger \varepsilon_a a_i + \sum_i b_i^\dagger \varepsilon_b b_i + \sum_i t(a_i^\dagger b_{i-1} + a_i^\dagger b_i + \text{h.c.}) \quad (17)$$



Slika 3: 1-D rešetka s bazisom: elementarna ćelija sa dva sajta.

gde ε_a i ε_b predstavljaju energije valentnih atomskih nivoa različitih atoma u bazisu rešetke. a_i^\dagger (a_i) i b_i^\dagger (b_i) su operatori kreacije (anihilacije) u čvorovima sa odgovarajućim atomima. i ide po svim ćelijama rešetke sa po, dakle, dva sajta, a i b . t je hopping amplituda za dva susedna sajta. Prelazak u k -prostor Furijeovim transformom kao [10]:

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k^{IB.Z.} e^{-ikR_i} a_k^\dagger \quad (18)$$

gde je N broj elementarnih ćelija kristala, R_i je položaj sajta a i -te ćelije. Prelazimo u k -prostor zamenom (1.2) u (1.1):

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_i [\varepsilon_a \sum_k^{IB.Z.} e^{-ikR_i} a_k^\dagger \sum_{k'}^{IB.Z.} e^{ikR_i} a_{k'} + \\ & + \frac{1}{N} \varepsilon_b \sum_k^{IB.Z.} e^{-ikR_i} b_k^\dagger \sum_{k'}^{IB.Z.} e^{ikR_i} b_{k'} + \\ & + t (\frac{1}{N} \sum_k^{IB.Z.} e^{-ikR_i} a_k^\dagger \sum_{k'}^{IB.Z.} e^{ik(R_i-a)} b_{k'} + \\ & + \frac{1}{N} \sum_k^{IB.Z.} e^{-ikR_i} a_k^\dagger \sum_{k'}^{IB.Z.} e^{ik(R_i+a)} b_{k'} + \\ & + \text{h.c.}] \end{aligned} \quad (19)$$

Kako je poznato da [1]:

$$\langle \psi | a_k^\dagger a_{k'} | \psi \rangle = n_k \delta_{k,k'} \quad (20)$$

dobijamo:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{N} \sum_i \sum_k^{IB.Z.} [\varepsilon_a e^{-ikR_i} a_k^\dagger e^{ikR_i} a_k + \varepsilon_b e^{-ikR_i} b_k^\dagger e^{ikR_i} b_k + \\ & + t (e^{-ikR_i} a_k^\dagger e^{ik(R_i-a)} b_k + e^{-ikR_i} a_k^\dagger e^{ik(R_i+a)} b_k + \text{h.c.})] \end{aligned} \quad (21)$$

Kako i prebrojava N elementarnih ćelija, a u sumi ništa ne zavisi od i , pišemo:

$$\hat{H} = \sum_k^{IB.Z.} a_k^\dagger \varepsilon_a a_k + b_k^\dagger \varepsilon_b b_k + t (a_k^\dagger e^{-ika} b_k + a_k^\dagger e^{ika} b_k + \text{h.c.}) \quad (22)$$

$$\hat{H} = \sum_k^{IB.Z.} [a_k^\dagger \varepsilon_a a_k + b_k^\dagger \varepsilon_b b_k + t (a_k^\dagger (e^{-ika} + e^{ika}) b_k + b_k^\dagger (e^{-ika} + e^{ika}) a_k)] \quad (23)$$

$$\hat{H} = \sum_k^{I.B.Z.} [a_k^\dagger \varepsilon_a a_k + b_k^\dagger \varepsilon_b b_k + a_k^\dagger (2t \cos ka) b_k + b_k^\dagger (2t \cos ka) a_k] \quad (24)$$

Prepoznavamo:

$$\hat{H} = \sum_k^{I.B.Z.} (a_k^\dagger b_k^\dagger) \begin{pmatrix} \varepsilon_a & 2t \cos ka \\ 2t \cos ka & \varepsilon_b \end{pmatrix} (a_k b_k)^T \quad (25)$$

Rešavanjem svojstvenog problema dobijamo disperzionu relaciju:

$$\det \left[\begin{pmatrix} \varepsilon_a & 2t \cos ka \\ 2t \cos ka & \varepsilon_b \end{pmatrix} - \varepsilon(k) I \right] = 0 \quad (26)$$

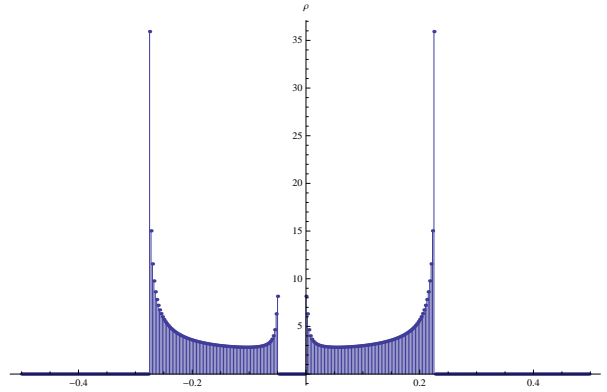
$$\Rightarrow (\varepsilon_a - \varepsilon(k))(\varepsilon_b - \varepsilon(k)) - (4t^2 \cos^2 ka) = 0 \quad (27)$$

$$\Rightarrow \varepsilon(k) = \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b \pm \sqrt{(\varepsilon_a + \varepsilon_b)^2 - 4(\varepsilon_a \varepsilon_b - 4t^2 \cos^2 ka)}}{2} \quad (28)$$

Za granični slučaj kada $\varepsilon_a = \varepsilon_b \equiv \varepsilon_0$ što odgovara slučaju kada su svi atomi u rešetki isti, gornja formula se svodi na:

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_0 + 2t \cos ka \quad (29)$$

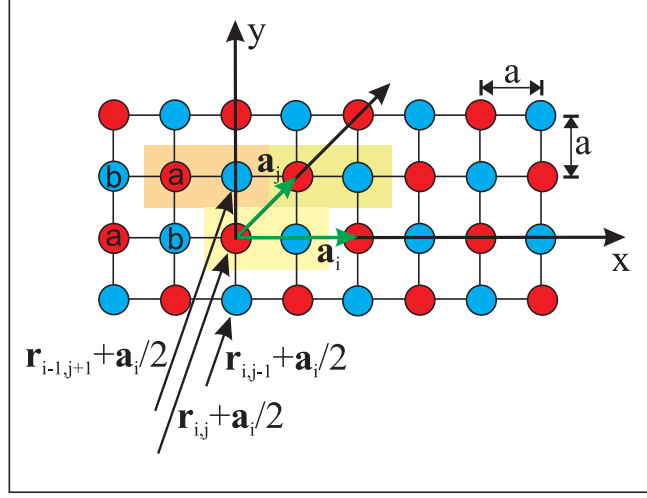
što je u stvari disperziona relacija za 1D rešetku bez bazisa.



Slika 4: Gustina stanja za linearnu, 1D rešetku s bazisom, izračunata numerički metodom histograma

2.3.3 2-D kvadratna rešetka s bazisom

Za 2-D slučaj, uzimamo da je elementarna ćelija pravougaonik sa 2 sajta, kao na slici 5: Hamiltonijan sada izgleda kao:



Slika 5: 2-D kvadratna rešetka s bazisom.

$$\hat{H} = \sum_i \sum_j [a_{i,j}^\dagger \varepsilon_a a_{i,j} + b_{i,j}^\dagger \varepsilon_b b_{i,j} + t(a_{i,j}^\dagger b_{i,j} + a_{i,j}^\dagger b_{i-1,j} + a_{i,j}^\dagger b_{i,j+1} a_{i,j}^\dagger b_{i-1,j+1} + \text{h.c.})] \quad (30)$$

Na sličan način kao u 1-D slučaju dobija se:

$$\hat{H} = \sum_k^{IB.Z.} (a_k^\dagger b_k^\dagger) \begin{pmatrix} \varepsilon_a & 2t(\cos k_y a + \cos k_x a) \\ 2t(\cos k_y a + \cos k_x a) & \varepsilon_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} \quad (31)$$

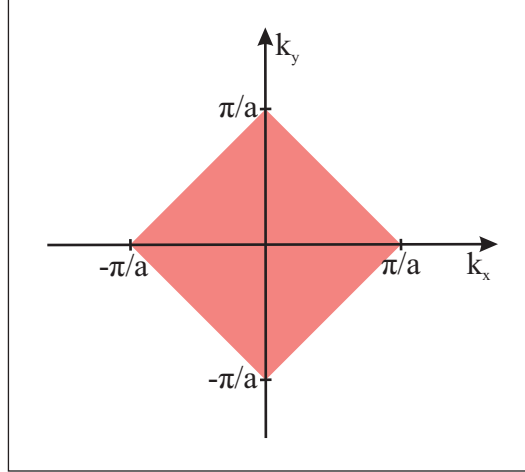
Rešavanjem svojstvenog problema dobijamo:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_a + \varepsilon_b \pm \sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 16t^2(\cos k_x a + \cos k_y a)^2} \right) \quad (32)$$

U traženju gustine stanja, uzimamo da je prva Brillouinova zona kvadrat kao na slici 6. Metod integracije Greenove funkcije i histogram daju iste rezultate.

Van Hove-ovi singulariteti Van Hoveovi singulariteti su česta pojava u gustinama stanja kristalnih rešetki. Postojanje Van Hoveovog singulariteta u blizini Fermijeve energije ima značajan uticaj na osobine sistema. Kod 1D rešetki, tipično se pojavljuju stepeni, kod 2D - logaritamski singulariteti, a za 3D rešetke tipični su kinkovi.

Za pojednostavljeni slučaj kada $\varepsilon_a = \varepsilon_b = 0$ možemo da procenimo oblik f-je $\rho(\varepsilon)$ na samim krajevima energetske zone. U tom slučaju razmak između dve energetske zone je potpuno nestao pa imamo u stvari jednu energetske zone. Donjoj granici zone, tj. minimalnom ε odgovara $\vec{k} = 0$. Formula $\varepsilon(k_x, k_y)$, za $k_x, k_y \approx 0$ može dalje da se pojednostavi (radi jednostavnosti pretpostavićemo da je konstanta rešetke $a = 1$) [11]:



Slika 6: I Brillouenova zona kvadratne rešetke s bazisom.

$$\begin{aligned}
 \varepsilon(k_x, k_y) &= 2t(\cos k_x + \cos k_y) = 2t \left(\sqrt{1 - \sin^2 k_x} + \sqrt{1 - \sin^2 k_y} \right) \quad (33) \\
 &= 2t \left(\sqrt{1 - k_x^2} + \sqrt{1 - k_y^2} \right) = 2t \left(1 - \frac{1}{2}k_x^2 + 1 - \frac{1}{2}k_y^2 \right) = \\
 &= t(4 - \vec{k}^2)
 \end{aligned}$$

Sada ε zavisi samo od intenziteta \vec{k} pa su ekvienienergetske krive u inverznoj ravni - krugovi. Dalje možemo da pišemo:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{4\pi^2} \iint k dk d\varphi \delta(\varepsilon - \varepsilon(k)) \quad (34)$$

Imamo da je $d\varepsilon_k = 2tkdk$:

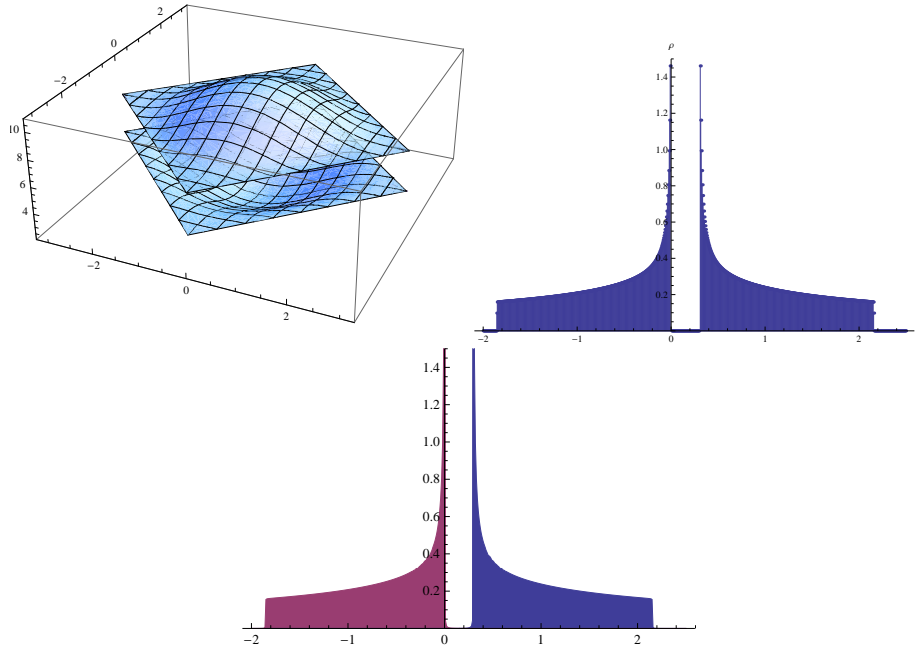
$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{4\pi^2} \iint \frac{k d\varepsilon d\varphi \delta(\varepsilon - \varepsilon(k))}{2tk} \quad (35)$$

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \frac{k d\varphi}{2tk} \quad (36)$$

Pre nego što pokratimo k , moramo da uvedemo uslov da je k realan broj, tj $4t - \varepsilon > 0$. Uvodimo step funkciju $\theta(4t - \varepsilon)$:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{4\pi^2} \frac{2\pi}{2t} \theta(4t - \varepsilon) = \frac{1}{2\pi t} \theta(4t - \varepsilon) \quad (37)$$

Dakle, na krajevima energetske zone kod kvadratne rešetke bez bazisa gustina stanja je step funkcija visine $\frac{1}{2\pi t}$.



Slika 7: 2-D kvadratna rešetka: Grafik zavisnosti $\varepsilon(k_x, k_y)$ u prvoj Brillouenovoj zoni i gustine stanja dobijene preko Grinove f-je i preko histograma.

Singularitet u gustini stanja odgovara stanjima na polovini stranice kvadrata prve Brillouenove zone (prva Brillouenova zona u slučaju kvadratne rešetke bez bazisa je kvadrat sa temenima $((\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}), (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}), (\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a}), (-\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a}))$). Razmatramo disperzionu relaciju u okolini tačke $(\pi, 0)$. Po k_x osi disperziona relacija se svodi na:

$$\begin{aligned} \varepsilon_x(k_x \approx \pi, k_y = 0) &= 2t(\cos k_x + 1) = 2t(-\cos(\pi - k_x) + 1) = & (38) \\ &= 2t(-\sqrt{1 - \sin^2(\pi - k_x)} + 1) \end{aligned}$$

Kako je $|\pi - k_x| \ll 1$, $\sin(\pi - k_x) \approx \pi - k_x$ a koren razvijamo u Tejlorov red kao $\sqrt{1 - x} \approx 1 - \frac{1}{2}x$:

$$\varepsilon_x(k_x \approx \pi, k_y = 0) = 2t(-1 + \frac{1}{2}(\pi - k_x)^2 + 1) = t(\pi - k_x)^2 \quad (39)$$

Po k_y osi imamo:

$$\varepsilon_y(k_x = \pi, k_y \approx 0) = 2t(-1 + \cos k_y) = 2t(-1 + \sqrt{1 - \sin^2 k_y}) = -tk_y^2 \quad (40)$$

Energiju u nekoj maloj okolini tačke $(\pi, 0)$ možemo predstaviti preko Tejlorovog razvoja:

$$\varepsilon(\pi + \Delta k_x, 0 + \Delta k_y) = \varepsilon(\pi, 0) + \frac{\partial \varepsilon_x}{\partial k_x} \Delta k_x + \frac{\partial \varepsilon_y}{\partial k_y} \Delta k_y = 2t[(\pi - k_x)^2 - k_y^2] \quad (41)$$

Uvedimo smenu $\pi - k_x = k'_x$. Radi preglednosti uvedimo i $\varepsilon' = \frac{\varepsilon}{2t}$. Konačno, u okolini $(\pi, 0)$ ekvienigetska kriva u ravni je hiperbola:

$$\varepsilon' = k_x'^2 - k_y^2 \Rightarrow k_x'^2 = \varepsilon' + k_y^2 \quad (42)$$

Zapazimo još:

$$k_x' = \sqrt{\varepsilon' + k_y^2} \Rightarrow dk_x' = -\frac{k_y dk_y}{\sqrt{\varepsilon' + k_y^2}} \quad (43)$$

U ovom slučaju, od koristi će nam biti alternativni zapis gustine stanja:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{4\pi^2} \oint \frac{d\vec{l}}{|\nabla_{\vec{k}} \varepsilon|} \quad (44)$$

Kako integral ide po ekvienigetske krivoj, koja je u našem slučaju hiperbola, možemo da pišemo:

$$dl = \sqrt{dk_x^2 + dk_y^2} = dk_x \sqrt{1 + \left(\frac{dk_y}{dk_x}\right)^2} = dk_x \sqrt{1 + \frac{k_y^2}{\varepsilon' + k_y^2}} = dk_x \sqrt{\frac{\varepsilon' + 2k_y^2}{\varepsilon' + k_y^2}} \quad (45)$$

Možemo da nadujemo i $|\nabla_{\vec{k}} \varepsilon|$:

$$|\nabla_{\vec{k}} \varepsilon'| = \sqrt{\left(\frac{\partial \varepsilon'_x}{\partial k_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon'_y}{\partial k_y}\right)^2} = \sqrt{\varepsilon' + 2k_y^2} \quad (46)$$

Ako ubacimo ove rezultate u integral uz napomenu da $dk_x = -dk_x'$:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{4\pi^2} \int \frac{dk_x}{\sqrt{\varepsilon' + k_y^2}} \quad (47)$$

Gornja granica integracije je reda veličine 1, pa možemo da pišemo:

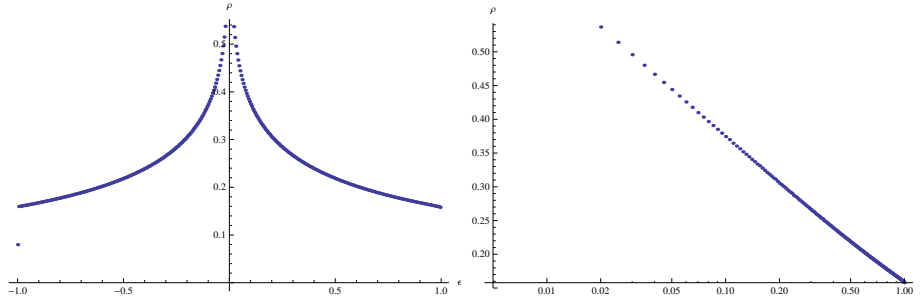
$$\rho(\varepsilon) \sim \ln(k_y + \sqrt{\varepsilon' + k_y^2}) \Big|_0^{O(1)} \sim \ln \frac{2t}{\varepsilon} \quad (48)$$

Zaključujemo da Van Hoveov singularitet u centru energetske zone kvadratne rešetke bez bazisa - logaritamskog tipa. To je ilustrovano na slici 8, gde je gustina stanja, prikazana na logaritamskoj skali, prava linija u blizini singulariteta.

2.3.4 2-D trouglasta rešetka bez bazisa

Za 2-D slučaj sa trouglastom rešetkom sa svim istim atomima imamo hamiltonijan:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \left[a_{i,j}^\dagger \varepsilon_0 a_{i,j} + t \left(a_{i,j}^\dagger a_{i+1,j} + a_{i,j}^\dagger a_{i,j+1} + a_{i,j}^\dagger a_{i-1,j+1} + \text{h.c.} \right) \right] \quad (49)$$



Slika 8: Gustina stanja za kvadratnu rešetku bez bazisa, izračunata numerički preko histograma. Singularitet u sredini energetske zone je logaritamskog tipa što se vidi sa grafika gustine stanja na log-linearnoj skali (slika desno)

Prelazimo u k -prostor:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} \left[\varepsilon_0 + t \left(e^{i\vec{k}\vec{a}_i} + e^{i\vec{k}\vec{a}_j} + e^{i\vec{k}(\vec{a}_j - \vec{a}_i)} + \text{h.c.} \right) \right] a_{\vec{k}} \quad (50)$$

Prelazimo na x i y koordinate kao:

$$\begin{aligned} \vec{a}_i &= \vec{a}_x \\ \vec{a}_j &= \frac{1}{2}\vec{a}_x + \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{a}_y \end{aligned} \quad (51)$$

Dobijamo:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} \left[\varepsilon_0 + t \left(e^{i\vec{k}\vec{a}_x} + e^{i\vec{k}(\frac{1}{2}\vec{a}_x + \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{a}_y)} + e^{i\vec{k}(-\frac{1}{2}\vec{a}_x + \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{a}_y)} + \text{h.c.} \right) \right] a_{\vec{k}} \quad (52)$$

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} \left[\varepsilon_0 + t \left(e^{i\vec{k}\vec{a}_x} + e^{i\vec{k}\frac{\sqrt{3}}{2}\vec{a}_y} \left(e^{i\vec{k}\frac{1}{2}\vec{a}_x} + e^{-i\vec{k}\frac{1}{2}\vec{a}_x} \right) + \text{h.c.} \right) \right] a_{\vec{k}} \quad (53)$$

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} \left[\varepsilon_0 + t \left(e^{ik_x a} + 2e^{ik_y \frac{\sqrt{3}}{2} a} \cos \frac{1}{2} k_x a + \text{h.c.} \right) \right] a_{\vec{k}} \quad (54)$$

Konačno:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon_0 + 2t \left(\cos k_x a + 2 \cos \frac{\sqrt{3}}{2} k_y a \cos \frac{1}{2} k_x a \right) \quad (55)$$

Za računanje gustine stanja neophodno nam je da nadjemo prvu Brillouinovu zonu. Iz vektora direktne rešetke prelazimo na vektore inverzne rešetke kao:

$$\begin{pmatrix} b_{1x} & b_{1y} \\ b_{2x} & b_{2y} \end{pmatrix} = 2\pi \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} \\ b_{1y} & a_{2y} \end{pmatrix}^{-1} \quad (56)$$

U našem konkretnom slučaju imamo:

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} a \\ \vec{a}_2 &= \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \frac{a}{2}\end{aligned}\tag{57}$$

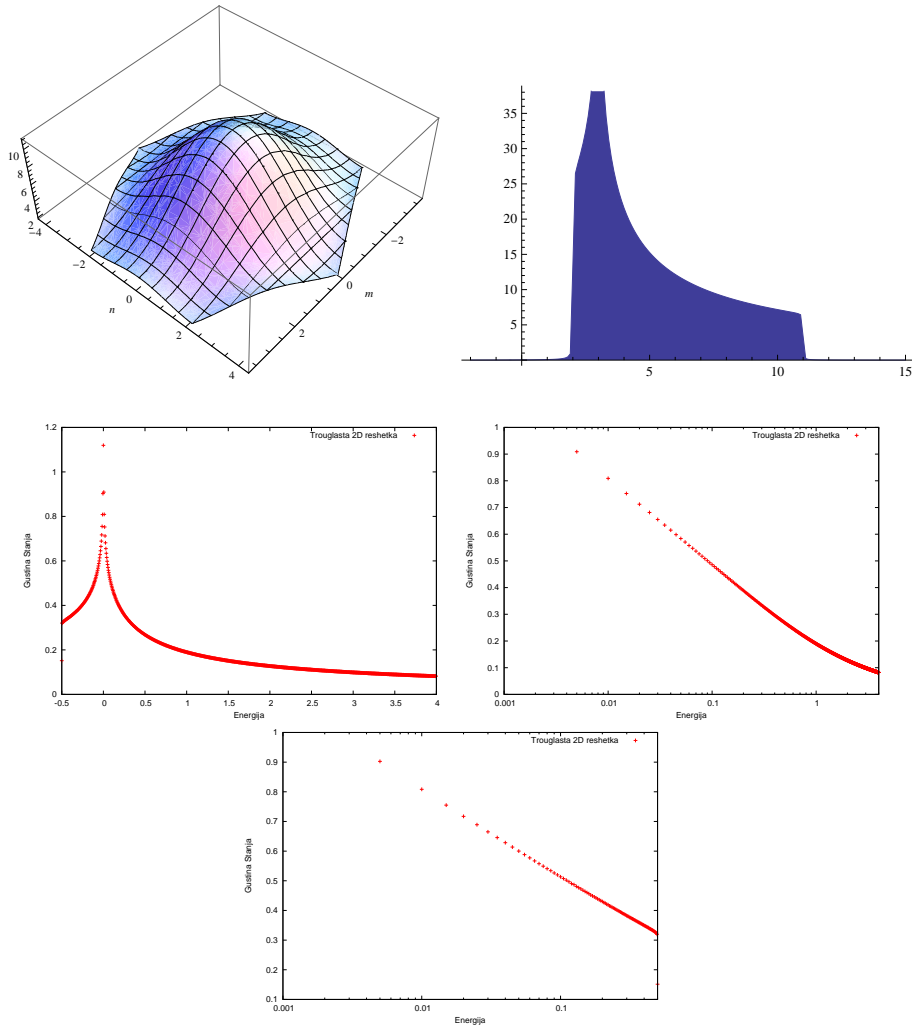
Upotrebom gornje jednačine dobijamo:

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \\ -\frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \end{pmatrix} \\ \vec{b}_2 &= \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{58}$$

Kada nacrtamo prvu Brillouinovu zonu lako dobijamo uslove za integraciju grinovne funkcije. Gustina stanja sada je:

$$\rho(\varepsilon) \sim -\lim_{s \rightarrow 0} \text{Im} \int_{-4\pi/3+|y|/\sqrt{3}}^{4\pi/3-|y|/\sqrt{3}} \int_{-2\pi/\sqrt{3}}^{2\pi/\sqrt{3}} \frac{dk_y dk_x}{\varepsilon + si - \varepsilon(k_x, k_y)}\tag{59}$$

Gustina stanja ima singularitet logaritamskog tipa na tačno 1/9 širine energetske zone što se vidi i sa grafika (slika 9).

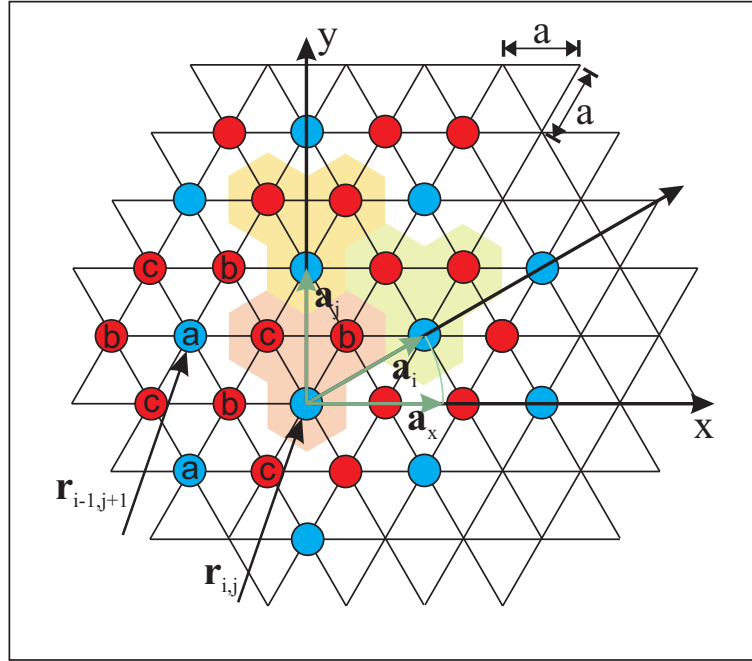


Slika 9: 2-D trouglasta rešetka bez bazisa: 1 - Grafik zavisnosti $\varepsilon(k_x, k_y)$ u prvoj Brillouin-ovoj zoni; 2 - Gustina stanja izračunata pomoću Grinove funkcije; 3 - Gustina stanja metodom histograma; 4,5 - Singularitet na logaritamskoj skali, s desne i leve strane.

2.3.5 2-D trouglasta rešetka sa bazisom

Za 2-D slučaj sa trouglastom rešetkom sa slike 10 za elementarnu ćeliju uzimamo trougao sa 3 sajta i odgovarajuće operatore kreacije i anihilacije a, b, c . Neka su vektori rešetke \vec{a}_i i \vec{a}_j dužine $a\sqrt{3}$ i neka važi:

$$\begin{aligned}
 R_{a,i,j}^{\vec{a}} &= R_{a,i-1,j-1}^{\vec{a}} + \vec{a}_i + \vec{a}_j \\
 R_{b,i,j}^{\vec{a}} &= R_{a,i,j}^{\vec{a}} + \frac{1}{3}(\vec{a}_i + \vec{a}_j) \\
 R_{c,i,j}^{\vec{a}} &= R_{a,i,j}^{\vec{a}} + \frac{1}{3}(2\vec{a}_j - \vec{a}_i)
 \end{aligned} \tag{60}$$



Slika 10: 2-D trouglasta rešetka s bazisom.

Neka se u sajtovima a nalaze atomi sa energijom valentne orbitale ε_a a u druga dva sa ε_b . TBH uzet za najbliže susede dat je sa:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & \sum_i \sum_j [a_{i,j}^\dagger \varepsilon_a a_{i,j} + b_{i,j}^\dagger \varepsilon_b b_{i,j} + c_{i,j}^\dagger \varepsilon_b c_{i,j} + \\
 & + t(a_{i,j}^\dagger b_{i,j} + a_{i,j}^\dagger c_{i,j} + a_{i,j}^\dagger b_{i,j-1} + \\
 & + a_{i,j}^\dagger c_{i,j-1} + a_{i,j}^\dagger b_{i-1,j} + a_{i,j}^\dagger c_{i+1,j-1} + \\
 & + b_{i,j}^\dagger c_{i,j} + b_{i,j}^\dagger c_{i+1,j-1} + c_{i,j}^\dagger b_{i-1,j} + \text{h.c.})]
 \end{aligned} \tag{61}$$

Posle prelaska u k -prostor i prelaska na \vec{a}_x i \vec{a}_y kao:

$$\begin{aligned}
 \vec{a}_i &= \frac{\sqrt{3}}{2} \vec{a}_x + \frac{1}{2} \vec{a}_y \\
 \vec{a}_j &= \vec{a}_y,
 \end{aligned} \tag{62}$$

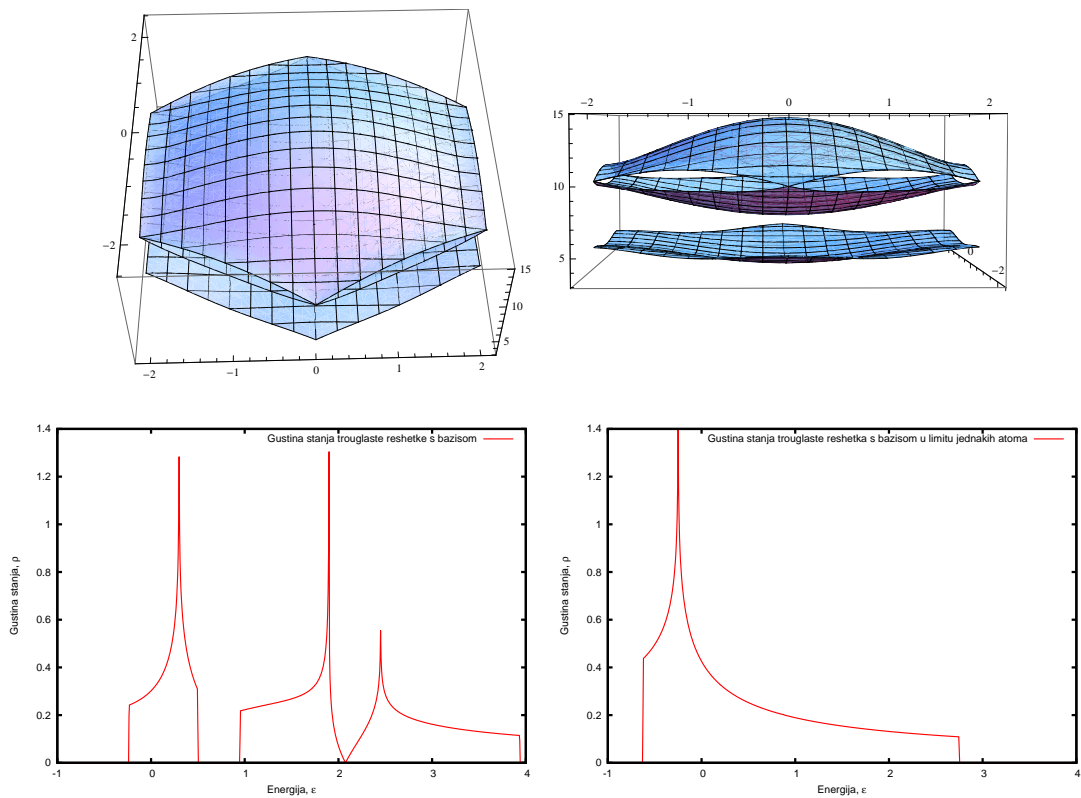
dobijamo:

$$\hat{H} = \sum_k (a_k^\dagger b_k^\dagger c_k^\dagger) \begin{pmatrix} \varepsilon_a & A & B \\ A^* & \varepsilon_b & C \\ B^* & C^* & \varepsilon_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \\ c_k \end{pmatrix}, \tag{63}$$

gde su:

$$\begin{aligned}
A = B^* &= e^{ia(\frac{1}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y)}(1 + e^{-ia\sqrt{3}k_y} + e^{-ia(\frac{3}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y)}) \\
C &= e^{-iak_x}(1 + e^{ia(\frac{3}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y)} + e^{ia(\frac{3}{2}k_x - \frac{\sqrt{3}}{2}k_y)})
\end{aligned}
\tag{64}$$

Rešenje ovog svojstvenog problema dobili smo u Mathematica softveru, ali je previše složeno da bih ga ovde naveo. Svejedno, može se iskoristiti za nalaženje gustine stanja $\rho(\varepsilon)$.



Slika 11: 2-D trouglasta rešetka sa bazisom: 1,2 - Grafik zavisnosti $\varepsilon(k_x, k_y)$ u prvoj Brillouinovoj zoni; 3 - gustina stanja izračunata preko grinove f-je za $\varepsilon_a = 2\varepsilon_b$ i 4 - za $\varepsilon_a = \varepsilon_b$. Vidimo da se poklapa sa gustinom stanja za trouglastu rešetku bez bazisa.

3 Dinamička teorija srednjeg polja (DMFT)

U ovom odeljku definisaćemo Habardov model i opisati njegovo rešavanje u DMFT aproksimaciji.

3.1 Habardov model

Habardov model je najjednostavniji model kristala u kome se uračunava i medjusobna interakcija elektrona. U obzir se uzima samo interakcija dva elektrona koji se nalaze na istom atomu i energija te interakcije je zadata parametrom U . U Habardovom modelu dozvoljeno je da orbitalu atoma okupira jedan, dva ili ni jedan elektron. U izolovanim atomima, to bi bila stanja sa energijama: $0, \varepsilon_0, 2\varepsilon_0 + U$, respektivno. Naravno, disperzija energije po kristalnom impulsu k postoji i ovde. Hamiltonijan habardovog modela glasi [10]:

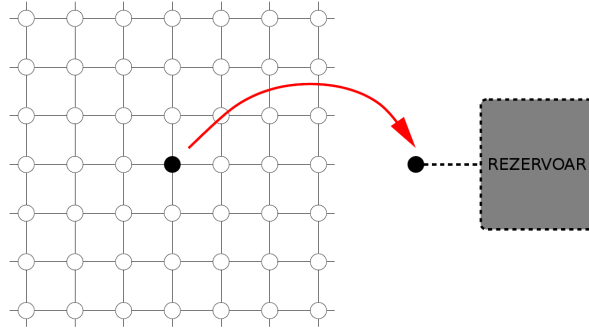
$$\hat{H} = \varepsilon_0 \sum_i a_i^\dagger a_i + t \sum_{i,j} a_i^\dagger a_j + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (65)$$

gde su a_i^\dagger i a_i operatori kreacije i anihilacije, a $n_{i\uparrow}$ i $n_{i\downarrow}$ su operatori brojeva elektrona sa odgovarajućim spinovima na i -tom čvoru rešetke. Vidimo da se Habardov Hamiltonijan razlikuje od "tight-binding" Hamiltonijana samo za treći član, u kome se uvodi interakcija izmedju elektrona, energije U ako su na istom čvoru i 0 ako nisu. Habardov model, iako deluje jednostavno, rešiv je egzaktno samo u 1D slučaju, a u višim dimenzijama neophodno je uvodjenje izvesnih aproksimacija. Ipak, istraživanje habardovog modela u dve dimenzije je dovelo do mnogih neočekivanih i netrivialnih otkrića. Ovako minimalno uvedena interakcija ima izuzetno izražen i suštinski uticaj na oblik gustine stanja, a samim time i na osobine sistema. Habardov model ima centralnu ulogu u teoriji magnetizma i opisu kretanja elektrona u visokotemperaturnim superprovodnicima. Iako i dalje postoje mnoga otvorena pitanja, smatra se da je Habardov model dobro polazište za teorijski opis realnih kristala i da ćemo jednog dana u okviru ovog modela i njegovih uopštenja uspeti i potpuno da razumemo visokotemperaturnu superprovodljivost, ali i druge osobine jako korelisanih materijala.

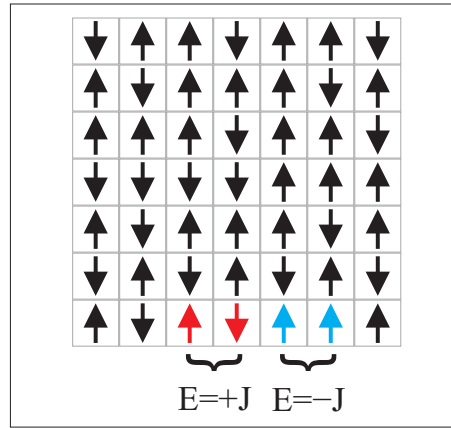
3.2 DMFT metod

Osnovna ideja DMFT metoda je da rešetku sa mnogo stepeni slobode zameni jednim čvorom malog broja stepeni slobode i okolnim medijumom (Slika 12). DMFT metod je najlakše zasnovati polazeći od analogije sa klasičnom teorijom srednjeg polja. Klasičnu teoriju srednjeg polja možemo ilustrovati na jednostavnom primeru Isingovog modela (slika 13) [3].

Klasična teorija srednjeg polja za Isingov model. Razmotrimo rešetku u spolnjem polju h i medjusobnom magnetnom interakcijom atoma intenziteta J_{ij} . Hamiltonijan je



Slika 12: Kristalna rešetka sa mnogo stepeni slobode zamenjena jednim čvorom sa malim brojem stepeni slobode i efektivnim rezervoarom.



Slika 13: Isingov model rešetke: paralelno usmerenje spinova elektrona na susednim čvorovima rešetke je energetski povoljnije.

dat kao:

$$\hat{H} = -h \sum_i S_i - \sum_{i,j} S_i S_j J_{ij} \quad (66)$$

Efektivno magnetno polje u kome se nalazi jedan atom (ali bilo koji, jer su svi isti) je h_{eff} , a hamiltonijan sistema jednog atoma, spina S_0 okruženog ostatkom rešetke dat je kao:

$$\hat{H}_{eff} = -h_{eff} S_0 \quad (67)$$

Jasno je da je efektivno polje u kome se nalazi atom zbir spoljnjeg polja i polja svih ostalih atoma oko njega:

$$h_{eff} = h + \sum_i J_{i0} m_i \quad (68)$$

Pri sumiranju možemo uzeti da je magnetizacija svakog pojedinačnog atoma jednaka srednjoj vrednosti magnetizacije:

$$m \equiv m_i = \langle S_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_i S_i = \frac{\sum_{\sigma=\downarrow,\uparrow} S_\sigma e^{S_\sigma h_{eff}\beta}}{\sum_{\sigma=\downarrow,\uparrow} S_\sigma} \quad (69)$$

Takodje, možemo uračunati i interakciju samo medju najbližim susedima, pa sumiramo samo po tim članovima. Kako su svi najbliži susedi jednako odaljeni, intenzitet interakcije medju svima je isti: $J_{ij} = J$.

$$h_{eff} = h + Jm \sum_{n.n} 1 = h + Jmz, \quad (70)$$

gde je z koordinacioni broj. Vidimo da magnetizacija pojedinačnog atoma zavisi od okolnog polja, a ono zavisi od magnetizacija svakog pojedinačnog atoma koji se ni počemu ne razlikuje od ovoga koga mi posmatramo. Iz jednačine možemo da izbacimo h_{eff} koje nam je u stvari nepoznata, i sa obe strane jednačine se pojavljuje m . Rešavanje datog izraza prestavlja samousaglašeno rešenje problema:

$$\frac{\sum_{\sigma=\downarrow,\uparrow} S_\sigma e^{S_\sigma(h+Jmz)\beta}}{\sum_i S_\sigma} = m \quad (71)$$

$$\frac{e^{(h+Jmz)\beta} - e^{-(h+Jmz)\beta}}{e^{(h+Jmz)\beta} + e^{-(h+Jmz)\beta}} = \tanh(h\beta + Jmz\beta) = m \quad (72)$$

Na ovaj način nalazimo magnetizaciju sistema samo aproksimativno, ali u limitu velikih koordinacionih brojeva, npr. za $d = \infty$, ovako dobijeno rešenje Isingovog modela je egzaktno.

DMFT za Habardov model. Za razliku od klasične teorije srednjeg polja, DMFT teorija u potpunosti uzima u obzir kvantne fluktuacije i time postaje egzaktna u limitu velikog koordinacionog broja. Centralna veličina ove teorije je lokalna grinoва funkcija (analogon magnetizaciji u Isingovom modelu) iz koje možemo da izračunamo sve ostale fizičke veličine.

Grinoва funkcija rešetke na konačnoj temperaturi je data kao [10]:

$$G_{kk'}(\tau, \tau') = -\langle T a_k(\tau) a_{k'}^\dagger(\tau') \rangle = -\text{Tr}[e^{-\beta(H-F)} T a_k(\tau) a_{k'}^\dagger(\tau')] \quad (73)$$

gde je H Hamiltonijan, F Helmholtcova slobodna energija $F = -T \ln Z$, a T operator vremenskog uredjenja i za fermione važi:

$$T a_k(\tau) a_{k'}^\dagger(\tau') = \begin{cases} a_k(\tau) a_{k'}^\dagger(\tau'), & \tau > \tau' \\ -a_{k'}^\dagger(\tau') a_k(\tau), & \tau < \tau' \end{cases} \quad (74)$$

Ako je H nezavisan od vremena, translaciona invarijantnost u vremenu čini da je od značaja samo razlika: $\tau - \tau'$. U slučaju da je kvantni broj k očuvan možemo da pišemo (i to ćemo nadalje činiti):

$$G_{kk'}(\tau) = \delta_{kk'} G_k(\tau) \quad (75)$$

U matsubara reprezentaciju prelazimo Furijeovim transformom:

$$G_k(i\omega_n) = \int_0^\beta G_k(\tau) e^{-i\omega_n \tau} d\tau \quad (76)$$

Lokalna grinova funkcija se dobija kao suma Grinove funkcije rešetke po svim kristalnim impulsima i analogno magnetizaciji u klasičnoj teoriji srednjeg polja, predstavlja Grinovu funkciju jednog atoma okruženog efektivnim rezervoarom.

$$G_{loc}(i\omega_n) = \sum_k G_k(i\omega_n) \quad (77)$$

Hamiltonijan koji opisuje dinamiku elektrona kuplovanog sa rezervoarom je ekvivalentan dobro poznatom Andersonovom Hamiltonijanu koji opisuje magnetnu nečistoću u metalu i dat je sa:

$$\hat{H}_{AIM} = \hat{H}_{atom} + \hat{H}_{bath} + \hat{H}_{coupling}, \quad (78)$$

gde su:

$$\hat{H}_{atom} = U n_\uparrow^d n_\downarrow^d + (\varepsilon_0 - \mu)(n_\uparrow^d + n_\downarrow^d) \quad (79)$$

$$\hat{H}_{bath} = \sum_{\vec{i}, \sigma} \tilde{\varepsilon}_{\vec{i}} a_{\vec{i}, \sigma}^\dagger a_{\vec{i}, \sigma} \quad (80)$$

$$\hat{H}_{coupling} = \sum_{\vec{i}, \sigma} t_{\vec{i}} (a_{\vec{i}, \sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger a_{\vec{i}, \sigma}) \quad (81)$$

Prvi član opisuje izolovani atom nečistoće, drugi član atome rešetke, a treći njihovu spregu.

Za razliku od Andersonovog modela koji opisuje nečistoću u zadanom rezervoaru, u DMFT rešenju Habardovog modela elektronski rezervoar moramo da odredimo samousaglašeno, tj. Grinova funkcija Andersonove nečistoće mora biti jednaka lokalnoj Grinovoj funkciji rešetke. To postizemo povoljnim izborom parametara $t_{\vec{i}}$ i $\tilde{\varepsilon}_{\vec{i}}$. Medjutim, oni u račun ulaze samo preko hibridizacione funkcije, date sa:

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_{\vec{i}} \frac{|t_{\vec{i}}|^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_{\vec{i}}} \quad (82)$$

To se najlakše vidi u formalizmu funkcionalnih integrala efektivnog dejstva, ali su ta razmatranja van okvira ovog rada.

U jednačinu samousaglašenosti ulaze 3 veličine. Lokalna grinova funkcija na imaginarnoj osi $G(i\omega)$, lokalna self-energija $\Sigma(i\omega)$ i hibridizaciona-funkcija $\Delta(i\omega)$. Ove tri veličine povezane su kao:

$$\Sigma(i\omega) = i\omega + \mu - \varepsilon_0 - \Delta(i\omega) - G^{-1}(i\omega) \quad (83)$$

S druge strane, self-energija rešetke je u direktnoj vezi sa grinovom funkcijom rešetke:

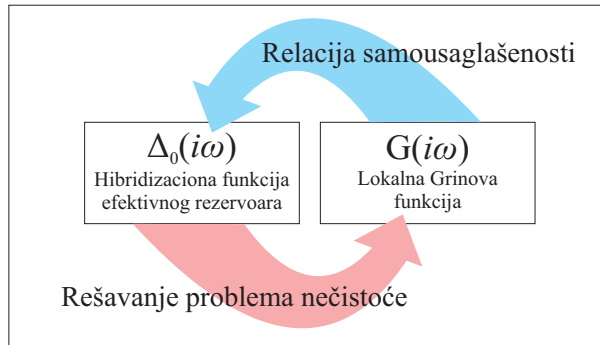
$$G(\vec{k}, i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon_0 - \varepsilon_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, i\omega)} \quad (84)$$

Osnovna pretpostavka DMFT-a je da Σ ne zavisi od \vec{k} , što je u mnogim slučajevima opravdana aproksimacija. Upravo to omogućava da sa Grinove funkcije rešetke sumiranjem po k predjemo na lokalnu Grinovu funkciju, a self-energija rešetke je identična lokalnoj self-energiji. Tako dolazimo do relacije samousaglašenosti:

$$G(i\omega_n) = \sum_k G_k(i\omega_n) = \sum_k \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon_0 - \varepsilon_{\vec{k}} - \Sigma(i\omega)} = \int \frac{\rho_0 d\varepsilon}{\Delta(i\omega) - G^{-1}(i\omega) - \varepsilon}, \quad (85)$$

gde je ρ_0 neinteragujuća, početna gustina stanja.

Najkomplikovaniji korak u rešavanju DMFT jednačina je nalaženje grinove funkcije Andersonove nečistoće. Ovaj zadatak je jedan od najviše proučavanih problema u fizici i postoji više metoda za nalaženje približnog ili numerički egzaktnog rešenja. U ovom radu ćemo problem Andersonove nečistoće rešavati pomoću nedavno razvijenog kvantnog Monte Karlo metoda u kontinualnom vremenu (Continuous Time Quantum Monte Carlo, CTQMC) [6]. Programski kod smo dobili od Kristjana Haulea sa Rutgers univerziteta u Nju Džersiju. Osnova ovog metoda je izračunavanje Fajnmanovih dijagrama u perturbativnom razvoju. Uzorkovanje (sampliranje) Fajnmanovih dijagrama se vrši pomoću metropolis algoritma.

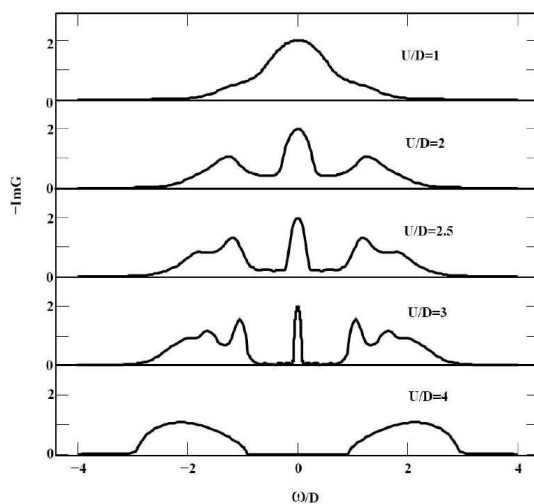


Slika 14: Principijelna šema DMFT petlje.

Samousaglašeno rešenje nalazimo na sledeći način (Slika 14): kvantom monte karlu kao ulazne parametre unosimo hibridizacionu funkciju i hemijski potencijal. Kao izlaz iz programa dobijaju se Σ i G na imaginarnoj osi. Iz relacije samousaglašenosti potrebno je da dobijemo novo Δ i proces se ponavlja dok G ne iskonvergira u samousaglašeno rešenje. Sam oblik relacije samousaglašenosti zavisi od rešetke koju posmatramo: njene geometrijske osobine se u potpunosti uračunavaju kroz neinteragujuću gustinu stanja.

4 Motov prelaz kod rešetke sa asimetričnom gustinom stanja

U ovom odeljku, detaljnije ćemo obraditi pojam Motovog prelaza i ispitati uticaj asimetrije gustine stanja na njegove osobine.



Slika 15: Promena oblika gustine stanja pri motovom prelazu: gustina stanja polupopunjene hiperkubne rešetke, data za različite vrednosti energije interakcije U .

4.1 Motov prelaz

Jedna od najvažnijih posledica jake interakcije je Motov metal-izolator prelaz, fazni prelaz praćen naglom promenom električne otpornosti materijala. Motov prelaz je pokazan i eksperimentalno, pa od tad, u klasifikaciju materijala, pored uobičajenih zonskih izolatora, ulaze i Motovi izolatori. I jedni i drugi ispoljavaju izolatorske osobine zbog postojanja procepa u energetskom spektru na fermijevom nivou. Međutim, Motovi izolatori bi po zonskoj teoriji trebalo da ispoljavaju metalne osobine, a Fermijev nivo da se nalazi unutar energetske zone. Uzrok postojanja procepa na Fermijevom nivou u energetskom spektru Motovih izolatora je jaka interakcija između elektrona. Experimentalne postavke za ispitivanje Motovog prelaza su različite, a najjednostavnija koristi promenu spoljnog pritiska kao način da se kontroliše razmak između atoma, a samim tim i amplituda preskoka. Samu interakciju između elektrona je, naravno, nemoguće kontrolisati jer je to fundamentalna osobina čestica, ali kako je u ovom slučaju bitan samo odnos U/t , dovoljno je kontrolisati samo t .

Na slici je prikazana simetrična gustina stanja za nekoliko različitih vrednosti U . Sa slike se jasno vidi da se sa povećanjem U jedna energetska zona deli na dve, uz medju-fazu

postojanja dodatnog, kvazi-čestičnog pika, tačno oko hemijskog potencijala. To je poznata struktura sa tri pika u gustini stanja, tipična za materijale sa jako korelisanim elektronima, a koja je objašnjena DMFT teorijom. Dakle, vidimo da sa dovoljnom energijom interakcije između elektrona, umesto jedne energetske zone imamo dve (Habardove zone), a hemijski potencijal se umesto unutar zone nalazi unutar procepa, pa umesto dobrog provodnika imamo izolator.

4.2 Asimetrija i hemijski potencijal

U rešavanju DMFT jednačina za rešetku sa asimetričnom gustinom stanja kao prvi problem se pojavljuje vrednost hemijskog potencijala za half-filling. U slučaju simetrične gustine stanja, μ half-fillinga je i uvek na sredini energetske zone. Uvodjenje interakcije menja oblik gustine stanja ali, ako je neinteragujuća gustina stanja bila simetrična, na half-fillingu biće i interagujuća. Tada je hemijski potencijal uvek dat sa $\mu = \varepsilon_0 + U/2$. U asimetričnom slučaju, položaj μ zavisi od oblika gustine stanja i možemo ga naći računski ako je gustina stanja data. Problem je u tome što kvantni monte karlo vraća lokalnu Grinovu funkciju na imaginarnoj osi, što nam nije dovoljno da rekonstruišemo interagujuću gustinu stanja. Da bi smo iz Grinove funkcije (ili self-energije) na imaginarnoj osi koje nam izbacuje CTQMC dobili μ half-fillinga zahtevamo da nam je srednji okupacioni broj jednak 1:

$$\langle n \rangle = 1 = \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} N_{\vec{k}} = \quad (86)$$

$$= \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} N_{\vec{k}}(\varepsilon) \rho_{\sigma}(\varepsilon) d\varepsilon \quad (87)$$

Poznato je da je broj čestica u stanju \vec{k} u ravnotežnom stanju sistema na temperaturi T dat preko Grinove funkcije rešetke za dato stanje kao [10], [8]:

$$N_{\vec{k}} = \langle a_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} \rangle = T \sum_n \mathcal{G}_{\vec{k}}(i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^-} = 2T \sum_{n=0}^{\infty} \text{Re} \mathcal{G}_{\vec{k}}(i\omega_n) + \frac{1}{2} \quad (88)$$

gde je ω_n matsubara frekvencija, za fermione data kao $\omega_n = (2n+1)\pi k_B T$. Lokalna grinova funkcija koju mi dobijamo je u stvari suma Grinove funkcije rešetke po svim stanjima. Uz pretpostavku da self-energija ne zavisi od stanja \vec{k} uopšte, možemo da pišemo:

$$\mathcal{G}_{\vec{k}}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \varepsilon_{\vec{k}}} \quad (89)$$

Vidimo da \vec{k} ulazi u jednačinu za Grinovu funkciju rešetke (a tako i u jednačinu za broj čestica u datom stanju) samo preko svoje energije $\varepsilon_{\vec{k}}$.

Spinovi su ravnopravni u izostanku spoljnog magnetnog polja pa možemo dalje da pišemo:

$$\langle n \rangle = 1 = \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \left(2T \sum_{n=0}^{\infty} \operatorname{Re} \mathcal{G}_{\vec{k}}(i\omega_n) + \frac{1}{2} \right) \rho_{\sigma}(\varepsilon) d\varepsilon = \quad (90)$$

$$= \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} 2T \sum_{n=0}^{\infty} \operatorname{Re} \mathcal{G}_{\vec{k}}(i\omega_n) \rho_{\sigma}(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\sigma}(\varepsilon) d\varepsilon = \quad (91)$$

$$= 4T \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \operatorname{Re} \frac{\rho(\varepsilon) d\varepsilon}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \varepsilon} + 1 \quad (92)$$

Iz formule se jasno vidi da treba da zahtevamo da važi:

$$\operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\rho(\varepsilon) d\varepsilon}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \varepsilon} = 0 \quad (93)$$

Gustina stanja van energetske zone je 0. Kada je n veliko, $i\omega_n$ u potpunosti dominira imeniocem i Grinova funkcija rešetke $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ teži nuli.

$$\operatorname{Re} \int_{-a-2t}^{-a+2t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\rho(\varepsilon) d\varepsilon}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \varepsilon} = 0 \quad (94)$$

Treba napomenuti da u izolatorskoj fazi na nultoj temperaturi hemijski potencijal nije jednoznačno definisan. U ovom slučaju hemijski potencijal može da uzme bilo koju vrednost unutar energetskog procepa.

4.3 Formiranje DMFT petlje

U našem radu pošli smo od jednostavne, modelne gustine stanja, koja predstavlja poznatu “semi-circle” gustinu stanja sa asimetrijom unetom na sledeći način:

$$G_0(z) = \begin{cases} (z - \operatorname{sign}(z^2 - 4t^2) \sqrt{z^2 - 4t^2}) / 2t^2, & z \in \mathcal{R} \\ (z - \sqrt{z^2 - 4t^2}) / 2t^2, & z \in \mathcal{C} \end{cases} \quad (95)$$

$$G(z) = \frac{1}{t^2 - G_0(z+a)} \quad (96)$$

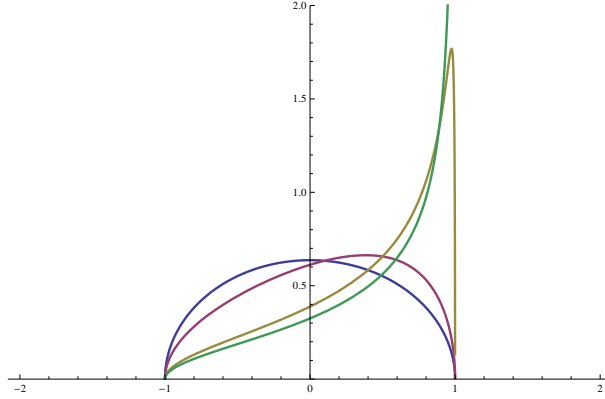
gde je a parametar asimetrije. Imaginarni deo grinove funkcije na realnoj osi daje gustinu stanja. U našem slučaju, ona je data kao:

$$\rho(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G(\varepsilon) = \frac{\sqrt{4t^2 - (\varepsilon + a)^2}}{2\pi(t^2 - a\varepsilon)} \quad (97)$$

Lako se vidi da je širina energetske zone $4t$ i da se prostire od $-a - 2t$ do $-a + 2t$. Oblik gustine stanja prikazan je na slici 16.

Od upotrebne vrednosti će nam biti i grinova funkcija na imaginarnoj osi. Kada se pojednostavi, gornji izraz na imaginarnoj osi se svodi na:

$$G(i\omega) = \begin{cases} \frac{2}{i\omega - a + \sqrt{(i\omega + a)^2 - 4t^2}}, & a > 0 \\ \left(\frac{-2}{i\omega - a - \sqrt{(i\omega + a)^2 - 4t^2}} \right)^*, & a < 0 \end{cases} \quad (98)$$



Slika 16: Gustine stanja korišćene u našem radu: za parametre asimetrije 0, 0.1, 0.4 i 0.49.

Početni, neinteragujući hemijski potencijal polupopunjenosti nalazimo prethodno, u Mathematica softveru, po formuli:

$$\int_{-a-2t}^{\mu} \rho(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{2} \quad (99)$$

Kao “impurity solver” u našoj DMFT petlji, koristili smo već pomenuti CTQMC program. Prvu iteraciju DMFT petlje započinjemo kada CTQMC-u kao ulaz damo početnu hibridizacionu funkciju:

$$\Delta_0(i\omega) = i\omega + \mu_0 - \frac{1}{G(i\omega)} \quad (100)$$

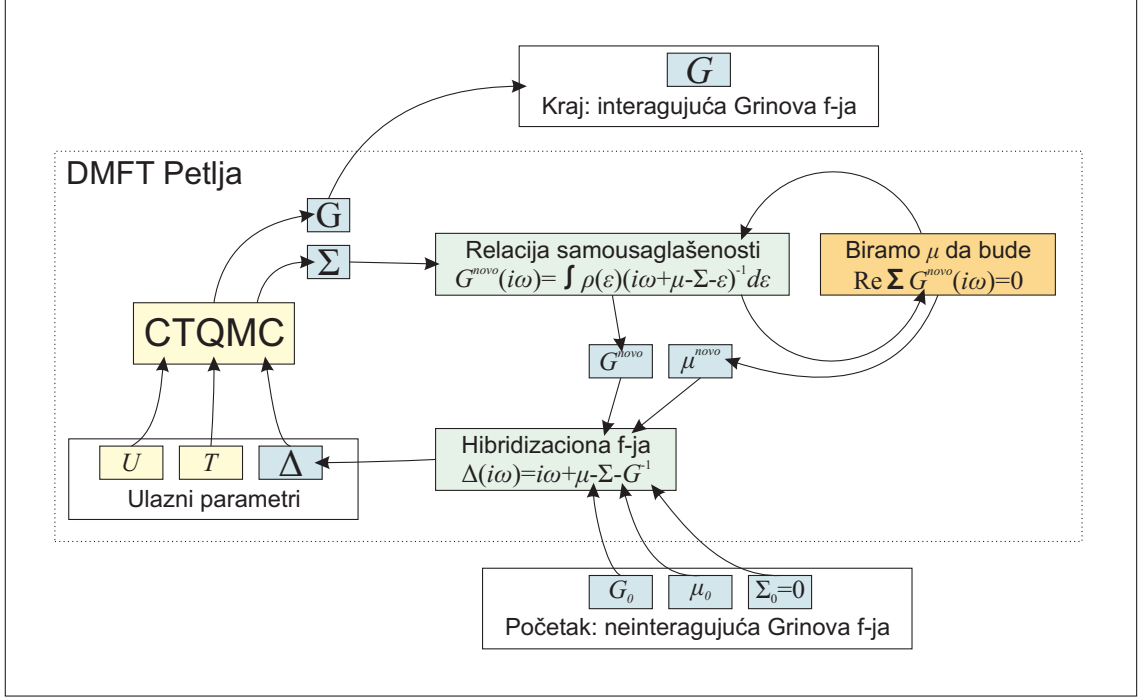
Program nam izbacuje novu, sada intereagujuću, lokalnu grinovu funkciju $G_{loc}(i\omega)$ i self-energiju $\Sigma(i\omega)$. Budući da je početna gustina stanja asimetrična, u svakoj iteraciji moramo opet da nadjemo μ half-fillinga. To činimo na u prethodnom odeljku opisan način. Kada nadjemo novo μ , ubacujemo ga u relaciju samousaglašenosti i dobijamo novu lokalnu Grinovu funkciju:

$$G_{loc}^{new}(i\omega) = \int_{-a-2t}^{-a+2t} \frac{\rho(\varepsilon) d\varepsilon}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \varepsilon} \quad (101)$$

Dobijenu grinovu funkciju koristimo da dobijemo novu hibridizacionu funkciju rezervoara Δ kao input za CTQMC:

$$\Delta(i\omega) = i\omega + \mu - \Sigma - \frac{1}{G_{loc}^{new}(i\omega)} \quad (102)$$

Proces se ponavlja u krug dok se ne poklope lokalna grinoва f-ja G_{loc} dobijena iz CTQMC programa i G_{loc}^{new} dobijena na gorepomenuti način. Za to je u praksi dovoljno 15-30 iteracija.



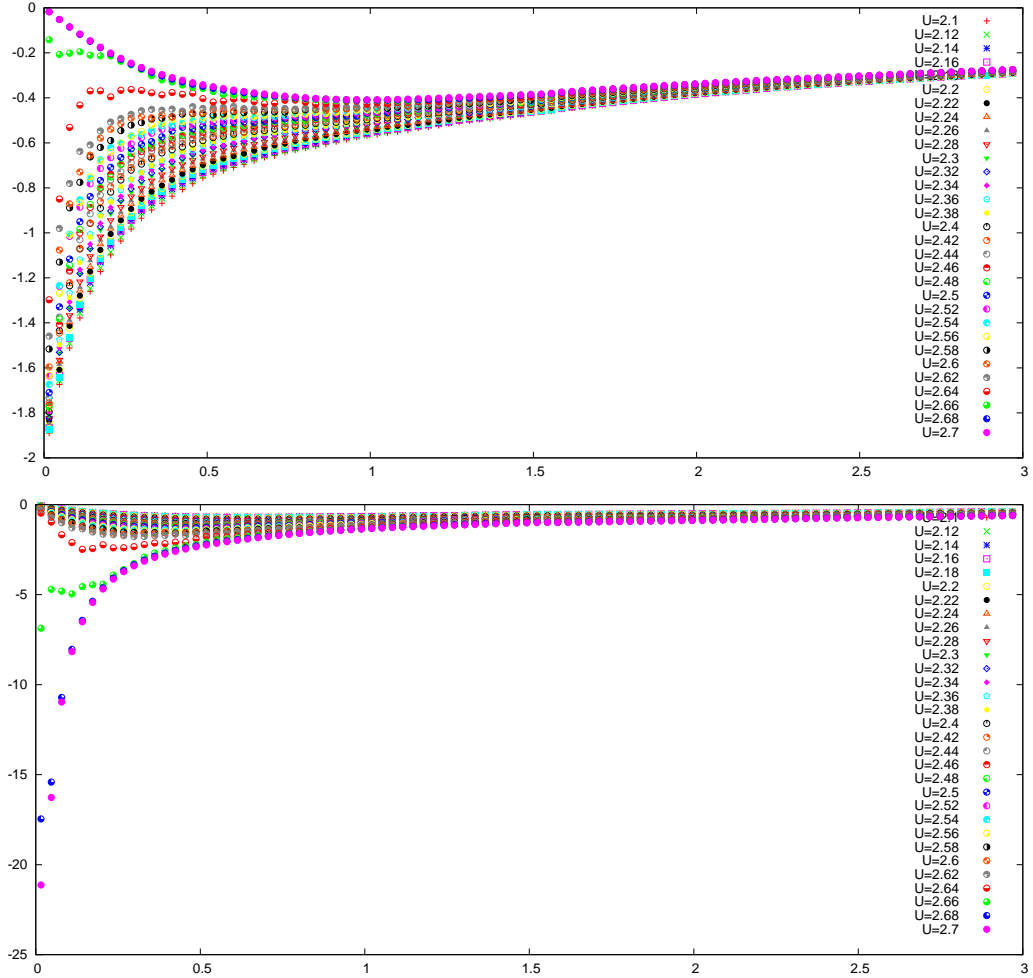
Slika 17: Šema rada DMFT petlje u našem radu

Program puštamo za različite vrednosti temperature, različite vrednosti interakcije medju elektronima U i različite vrednosti parametra asimetrije a . Za datu temperaturu T , U menjamo u dva smera, i za svako novo U počinjemo od prethodno dobijenog G . Od neinteragujućeg G počinjemo samo za prvo U u nizu. Medjutim, u izolatorskoj fazi ne možemo da pouzdano nadjemo hemijski potencijal, a mala greška, pogotovu u blizini prelaza, dovoljna je da se μ nadje unutar benda i da sistem odvede ponovo (ili prerano) u metalnu fazu. Iz tog razloga rezultati koje smo dobili u izolatorskoj fazi nisu pouzdani i u daljem radu koncentrisaćemo se samo na prelaz iz metalne u izolatorsku fazu.

Dobijeni rezultati su u formi grafika Grinove funkcije na imaginarnoj osi, za različite vrednosti U/t . Iz oblika krive možemo da zaključimo da li je materijal u metalnoj ili izolatorskoj fazi i za koju vrednost U/t se odigrao prelaz (slika 18). Kriterijum kojim odredjujemo da li je sistem u izolatorskoj fazi je taj da zahtevamo da važi:

$$\rho(\varepsilon_F) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(i\omega \rightarrow 0) \rightarrow 0 \quad (103)$$

što znači da se na fermijevom nivou otvorio energetski procep.

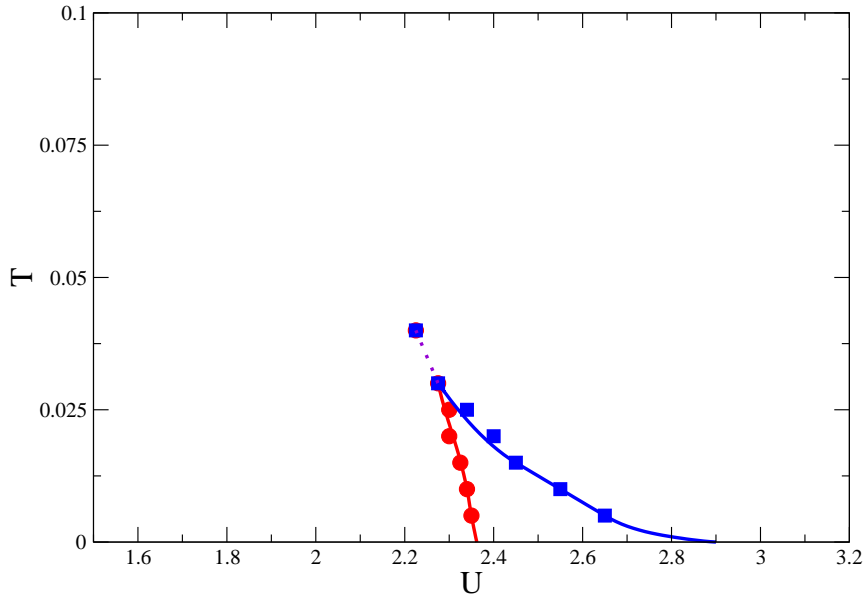


Slika 18: Primer rezultata dobijenih CTQMC metodom: Imaginarni deo Grinove funkcije (gornja slika) i Self-energije (donja slika) na imaginarnoj osi, za različite parametre U , menjane od manjih ka većim. Nagla promena se očigledno odigrava za $U = 2.64$.

4.4 Fazni dijagram

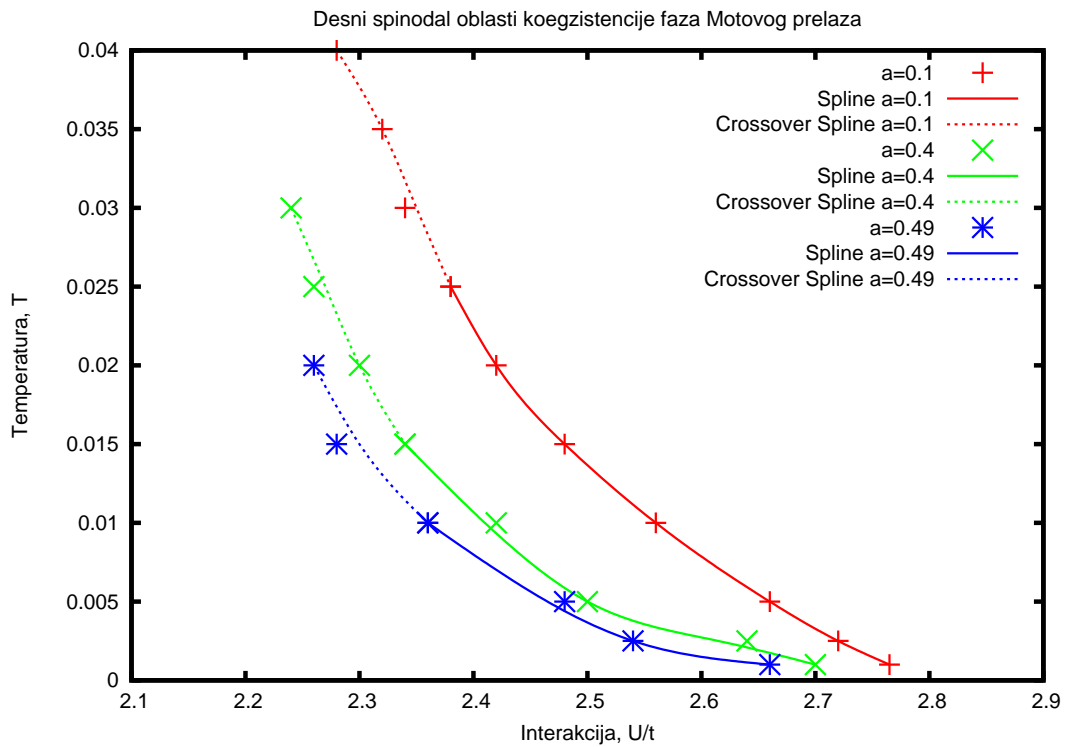
U eksperimentima je primećeno da je u izvesnom opsegu vrednosti U/t moguće imati i metalnu i izolatorsku fazu. Taj opseg se naziva opseg koegzistencije faza kod Motovog metal-izolator prelaza. Slučaj je da kada menjamo U/t sa većih vrednosti na manje, prelaz iz izolatora u metal se odigrava na značajno manjoj vrednosti U/t nego što odigra prelaz iz metala u izolator kada menjamo U/t sa manjih na veće vrednosti. Ta osobina je objasnjena teorijski i kvantitativne predikcije su u skladu sa experimentalnim rezultatima.

Fazni dijagram rešetke sa simetričnom gustinom stanja. Na slici 19 je prikazan fazni dijagram za habardov model popunjenosti $1/2$ za simetričnu gustinu stanja. Vidimo da se oblast koengzistencije faza sužava sa povećanjem temperature i da na kritičnoj temperaturi nestaje potpuno. Iznad kritične temperature imamo kontinualni prelaz (crossover) iz metalnog u izolatorsko ponašanje (deo krive prikazan isprekidanom linijom).

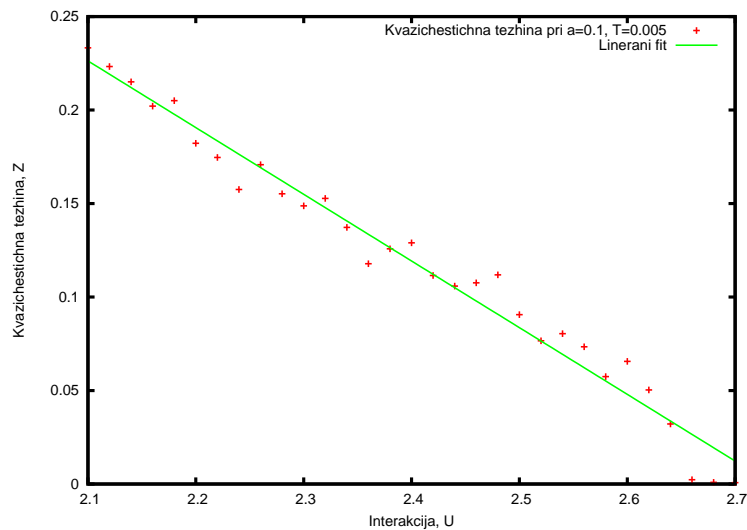


Slika 19: Fazni dijagram rešetke sa simetričnom gustinom stanja.

Fazni dijagram rešetke sa asimetričnom gustinom stanja. Sa grafika (slika 20) se vidi da se sa povećanjem asimetrije, prelaz odigrava za manje vrednosti U i da se kritična temperatura “cross-over”-a snižava. Jedno moguće objašnjenje ovog fenomena je to što je stvaranje kvazičestičnog pika koji “odlaže” prelaz iz metala u izolator uslovljeno prelaskom elektrona iz jednog i drugi bend. Kod asimetrične gusitne stanja, broj stanja sa leve i desne strane procepa nije podjednak pa su preskoci elektrona u izvesnoj meri onemogućeni. Zato kvazičestični pik brže nestaje sa povećanjem U/t i na njegovom mestu ostaje “gap”. Tako nastao procep je uži što je asimetrija veća, pa je i očekivano da “crossover” počne na nižoj temperaturi. Zbog numeričke nestabilnosti izolatorskog rešenja nedostaje levi spinodal, ali ćemo u daljem radu upotpuniti ovaj fazni dijagram.



Slika 20: Fazni dijagram rešetki sa asimetričnom gustinom stanja. Na slici je samo desni spinodal oblasti koegzistencije faza, na kome se odigrava Motov prelaz, iz metala u izolator, kada se interakcija povećava



Slika 21: Kvazičestični pik linearno teži nuli pre Motovog prelaza iz metala u izolator

Renormalizacija mase. Elektron-elektron interakcija renormalizuje masu kvazičestica. Renormalizovana masa je suprotno proporcionalna kvazičestičnoj težini, Z (Quasi Particle Weight, QPW):

$$\frac{m}{m^*} = Z = \left(1 + \left| \frac{d(\text{Im}\Sigma(i\omega))}{d(i\omega)} \right| \right)^{-1}, \quad (104)$$

i linerano se smanjuje sa povećanjem interakcije, kroz metalnu fazu (slika 21) . U izolatorskoj fazi, QPW više nije dobro definisana veličina.

5 Zaključne napomene

U ovom radu smo izračunali gustine stanja za nekoliko realističnih rešetki i ispitali uticaj njene asimetrije na osobine Motovog metal-izolator prelaza. Na nekoliko primera smo ilustrovali da tipične 2D kristalne rešetke imaju asimetričnu gustinu stanja i da se na krajevima energetske zone javlja logaritamski Van Hoveov singularitet. Posebno smo obratili pažnju na primere sa dve podrešetke atoma sa različitim energijama orbitala, što dovodi do pojave talasa gustine naelektrisanja (charge density wave). Ovakva pojava je primećena u velikom broju kvazi-dvodimenzionalnih korelisanih sistema, poput organskih kristala. Takođe, različite teorije predviđaju postojanje CDW faze kod Vigner-Mot prelaza u dvodimenzionalnom elektronskom gasu i u tom smislu se ovaj rad može smatrati prvim korakom u istraživanju ovih pojava.

U drugom delu rada smo, u okviru dinamičke teorije srednjeg polja, izračunali kritičnu temperaturu za paramagnetni metal-izolator prelaz u Habardovom modelu popunjenosti $1/2$. Pronašli smo da velika asimetrija gustine stanja nekoliko puta snižava kritičnu temperaturu i pomera granicu faznog prelaza na niže vrednosti interakcije. Nakon završetka ovog rada smo, međjutim, saznali da je sasvim nedavno objavljen rad na sličnu temu (R. Peters, T. Pruschke, PRB 2009 [12]) u kome su dobijeni slični zaključci. U daljem radu ćemo upotpuniti fazni dijagram Motovog metal-izolator prelaza za rešetku sa asimetričnom gustinom stanja i proširiti rad na ispitivanje magnetnih faza u realističnim rešetkama.

A Poredjenje sa rešenjem u atomskom limitu

Ispravnost našeg numeričkog koda za nalaženje samousaglašenog rešenja smo proverili u režimu jake interakcije U (atomski limit) gde postoji jednostavno, približno analitičko rešenje.

Za simetričnu gustinu stanja uvek važi da self-energija $\text{Im}\Sigma(i\omega)$ divergira u $-\infty$ kad $\omega \rightarrow 0$. U asimetričnom slučaju, to nije slučaj, već $\text{Im}\Sigma(i0^+) = 0$. Da tako mora biti, vidi se iz aproksimacije atomskog limita. Ako pretpostavimo da smo duboko u izolatoru, te da je $U \gg t$, imamo hamiltonijan u atomskom limitu. U odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja imamo [3]:

$$\hat{H} = - \sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} \mu c_{\sigma} + U c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow} c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\downarrow} \quad (105)$$

U svojstvenom bazu možemo da pišemo:

$$\hat{H} = -\mu | \uparrow \rangle \langle \uparrow | - \mu | \downarrow \rangle \langle \downarrow | - (2\mu - U) | \downarrow \uparrow \rangle \langle \downarrow \uparrow | \quad (106)$$

Grinova funkcija po definiciji:

$$G_{\sigma}(\tau) = -\langle T_{\tau} c_{\sigma}(\tau) c_{\sigma}^{\dagger}(0) \rangle = -\frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-\beta H} T_{\tau} c_{\sigma}(\tau) c_{\sigma}^{\dagger}(0)) = \quad (107)$$

$$= -\frac{1}{Z} [e^{\tau\mu} + e^{\beta\mu + \tau(\mu - U)}] \quad (108)$$

Furijeovim transformom prelazimo u Matsubara reprezentaciju:

$$\mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n) = \int_0^{\beta} G_{\sigma}(\tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau = \quad (109)$$

$$= \frac{1 - \langle n_{\sigma} \rangle}{i\omega_n + \mu} + \frac{\langle n_{\sigma} \rangle}{i\omega_n + \mu - U}, \quad (110)$$

gde je $\langle n_{\sigma} \rangle$ srednji okupacioni broj stanja sa spinom σ . U odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja $\langle n_{\uparrow} \rangle = \langle n_{\downarrow} \rangle$. Pri half-filling-u, $\langle n \rangle = 2\langle n_{\sigma} \rangle = 1 \Rightarrow \langle n_{\sigma} \rangle = 1/2$. Više ništa ne zavisi od usmerenja spina pa index σ ubuduće izostavljamo:

$$\mathcal{G}(i\omega_n) = \frac{1 - \frac{1}{2}}{i\omega_n + \mu} + \frac{\frac{1}{2}}{i\omega_n + \mu - U}, \quad (111)$$

S druge strane, poznato je da je Grinova funkcija rešetke u odsustvu spoljnog magnetnog polja:

$$\mathcal{G}_{\vec{k}}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \varepsilon_{\vec{k}}} \quad (112)$$

Medjutim, u atomskom limitu nema disperzije energije po \vec{k} , a lokalna Grinova funkcija je identična Grinovoju funkciji rešetke, pa možemo da pišemo:

$$\mathcal{G}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n)} \quad (113)$$

Kada izjednačimo gornja dva izraza možemo dobiti izraz za $\Sigma(i\omega_n)$:

$$\frac{1 - \frac{1}{2}}{i\omega_n + \mu} + \frac{\frac{1}{2}}{i\omega_n + \mu - U} = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n)} \quad (114)$$

$$\implies \Sigma(i\omega_n) = -\frac{U(\mu + i\omega_n)}{U - 2(\mu + i\omega_n)} \quad (115)$$

Imaginarni deo self-energije se svodi na:

$$\text{Im}\Sigma(i\omega_n) = -\frac{\omega_n U^2}{(U - 2\mu)^2 + 4\omega_n^2} \quad (116)$$

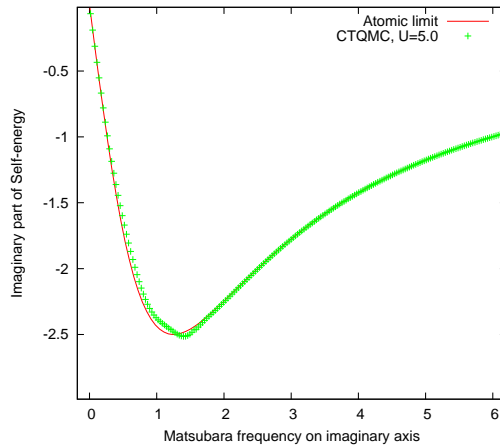
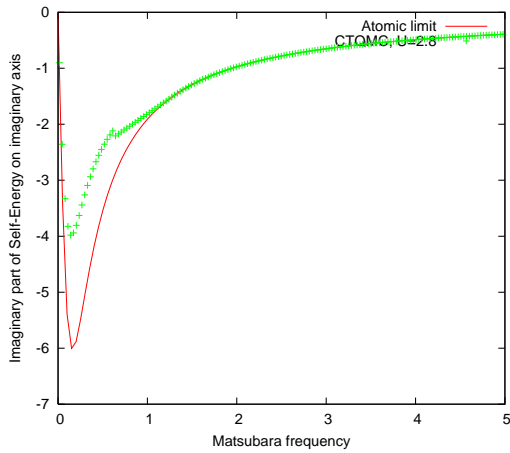
Sada je jasno da samo kada $\mu = U/2$ važi $\text{Im}\Sigma(i\omega_n) \sim -\frac{1}{\omega_n} \rightarrow -\infty$, kada $\omega_n \rightarrow 0$. To je zadovoljeno kada je gustina stanja simetrična. U svim ostalim slučajevima $\mu \neq U/2$ i važi $\text{Im}\Sigma(i\omega_n) \rightarrow 0$, kada $\omega_n \rightarrow 0$.

Realni deo self-energije u atomskom limitu dat je kao:

$$\text{Re}\Sigma(i\omega_n) = -\frac{U^2\mu - 2U\mu^2 + 2U\omega^2}{(U - 2\mu)^2 + 4\omega^2} \quad (117)$$

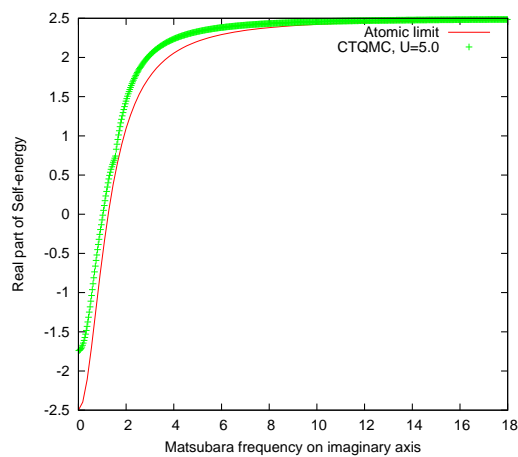
Jasno je da je za visoke frekvencije imamo: $\text{Re}\Sigma(i\omega \rightarrow \infty) \rightarrow U/2$. Takodje važi $\text{Re}\Sigma(0) = -\frac{U^2\mu - 2U\mu^2}{(U - 2\mu)^2}$. Dakle, samo kada $\mu = U/2$, $\text{Re}\Sigma(0)$ divergira. Za $\omega = \mu(\mu - U)$, $\text{Re}\Sigma(i\omega)$ menja znak. U neinteragujućem slučaju, $\text{Re}\Sigma(i\omega) \equiv 0$.

Uporedili smo rezultate za Self-energiju dobijenu računski u atomskom limitu i dobijenu DMFT metodom za veliku vrednost interakcije U i zaključili da su praktično nerazlučivi već za vrednost $U \approx 2U_0$, gde je U_0 okvirno vrednost U za koje se odigrava Motov prelaz (slike 22 i 23).



932 (2008)

Slika 22: Imaginarni deo self-energije koju daje CTQMC za $U = 2.8$ (levo) i $U = 5.0$ (desno). Vidimo da je za veliko U atomski limit opravdana aproksimacija



Slika 23: Realni deo self-energije koju daje CTQMC za $U = 5.0$ teži $U/2 = 2.5$ za visoke frekvencije. Atomski limit se ne poklapa u potpunosti sa dobijenom krivom na niskim frekvencijama.

Literatura

- [1] A. Altland and Ben Simons, *Functional Methods in Condensed Matter Theory*, Springer (1983).
- [2] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College Publishing (1976).
- [3] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. Rozenberg, *Dynamical Mean Field Theory of Strongly Correlated Fermion Systems and the Limit of Infinite Dimensions*, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [4] Gabriel Kotliar and Dieter Vollhardt, *Electronic Structure of Strongly Correlated Materials: Insights from Dynamical Mean Field Theory*, Physics Today **57**, 53 (2004).
- [5] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer (1983).
- [6] Kristjan Haule *Quantum Monte Carlo impurity solver for cluster dynamical mean-field theory and electronic structure calculations with adjustable cluster base*, Phys. Rev. B **75**, 155113 (2007).
- [7] A. Camjayi, K. Haule, V. Dobrosavljevic, G. Kotliar, *Coulomb Correlations and the Wigner-Mott Transition*, Nature Phys. **4**, 932 (2008).
- [8] A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov and I. Ye. Dzyaloshinskii *Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics*, Pergamon Press (1965).
- [9] Antoine Georges, *Strongly Correlated Electron Materials: Dynamical Mean-Field Theory and Electronic Structure*, arXiv:cond-mat/0403123.
- [10] P. Coleman *Many Body Physics*, Rutgers University, on-line.
- [11] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*, World Scientific (1999)
- [12] R. Peters, T. Pruschke, *Half-filled Hubbard model on a Bethe lattice with next-nearest-neighbor hopping*, Phys.Rev B **79**, 045108, (2009)