

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ФИЗИЧКИ ФАКУЛТЕТ



дипломски рад

**Проводност неуређеног метала у близини
Мотовог метал-изолатор прелаза**

Милош Радоњић

Београд, септембар 2008.

Чланови комисије:

проф. др Зоран Радовић (председник комисије)

др Дарко Танасковић (руководилац рада)

проф. др Милан Кнежевић

Овај рад је настао у Лабораторији за примену рачунара у науци Института за физику у Београду.

Захваљујем свима који су имали и најмањи допринос у изради и коначном облику овог рада. Посебно се захваљујем др Дарку Танасковићу на пруженој помоћи и указаној пажњи.

Садржај

1	Увод	2
2	Мотов метал-изолатор прелаз у динамичкој теорији средњег поља	4
2.1	Динамичка теорија средњег поља	4
2.2	Мотов метал-изолатор прелаз у неуређеним системима	10
3	Проводност у близини Мотовог прелаза	13
3.1	Гринове функције за Андерсонову нечистоћу у “ <i>NCA</i> “ апроксимацији	13
3.2	Густина стања близу Мотовог прелаза	15
3.2.1	Бете решетка	15
3.2.2	<i>DMFT</i> резултати за Бете решетку	16
3.2.3	<i>DMFT</i> резултати за хиперкубну решетку	19
3.3	Оптичка проводност	20
3.3.1	Оптичка проводност слабо корелисаног метала	21
3.3.2	Оптичка проводност у близини Мотовог прелаза	21
3.4	Температурна зависност отпора у близини Мотовог прелаза	24
3.5	<i>UNCA</i>	24
4	Закључне напомене	26

1 Увод

Један од најважнијих циљева физике чврстог стања је налажење нових материјала са интересантним транспортним, оптичким и термодинамичким својствима. Неки од познатијих примера су високо-температурни суперпроводници, квантни Холови системи, системи тешких фермиона, допирани полупроводници и други. Разумевање и објашњење физичких особина ових система представља изазов и главни задатак многим теоријским физичарима. Главна потешкоћа у развијању теорије је постојање више конкурентних процеса у оквиру једне појаве. Неке интеракције могу да фаворизују метално понашање, феромагнетизам, док друге могу да фаворизују локализацију валентних електрона и/или антиферомагнетизам.

Физичке особине метала - добрих проводника - се одлично описују моделом слободних (неинтерагујућих) електрона у статичком усредњеном пољу осталих електрона и поља јона решетке [1]. Тај модел објашњава и постојање зонских изолатора код којих је проводна зона потпуно попуњена, а следећа је сувише далеко од Фермијевог нивоа. Међутим код неких материјала са делимично попуњеном проводном зоном, такав опис није добар, јер електрони "провode" више времена у близини одређеног атома, или чвора кристалне решетке и имају тенденцију да се локализују. Електрони почињу да осећају једни друге и ефекти корелација почињу битно да утичу на њихово кретање. Однос Кулонове (потенцијалне) и кинетичке енергије електрона расте. Као резултат тога, делокализација електрона постаје мање енергетски повољна [2]. У неким екстремним случајевима електрони остају локализовани око чворова решетке и материјал постаје изолатор - Мотов (*Mott*) изолатор. Мотов метал-изолатор прелаз, дакле, настаје услед јаког Кулоновог одбијања електрона у делимично попуњеној валентној зони. Чини се да су модели слободних ("путујућих") и локализованих електрона потпуно раздвојени и да описују потпуно различите појаве. Најинтересантије појаве, које је и најтеже објаснити, су оне у којима коегзистирају локализовани електрони на кратким временским скалама и делокализовани на дугим. У таквим случајевима, електрони се налазе, "лебде", између ова два стања. То представља извор многих физичких феномена за чије објашњење је неопходно размишљати на оба начина: и таласно (импулсни простор, делокализовани електрони) и честично (реални простор, локализовани). Изразит пример оваквих система су високотемпературски суперпроводници. Неке њихове особине се могу описати слободним електронима, а неке везаним. За сада не постоји јединствена теорија која добро описује сва својства суперпроводника.

Предмет истраживања овог рада су транспортне особине неуређеног метала у близини Мотовог прелаза. Применили смо динамичку теорију средњег поља [3, 4] на Хаббардов (*Hubbard*) модел попуњености $1/2$ у чистом случају и у присуству неуређености. Израчунали смо и анализирали проводност система

за различите нивое интеракције, неуређености и на различитим температурама. За налажење локалне Гринове функције коришћен је ”*NCA*“ [5] алгоритам за решавање проблема Андерсонове нечистоће. Добијени резултати у највећој мери квалитативно коректно описују физику у близини Мотовог прелаза, али и јасно указују на недостатке *NCA* апроксимације, због чега ће бити неопходан бољи алгоритам за добијање детаљних и квантитативно поузданих резултата.

Рад је организован на следећи начин. У поглављу 2 су уведене основне идеје динамичке теорије средњег поља и указано је кроз примере на значај ефеката неуређености у многим јако корелисаним материјалима. Главни резултати рада су изложени у поглављу 3. Закључни коментари указују на непосредне правце за наставак рада.

2 Мотов метал-изолатор прелаз у динамичкој теорији средњег поља

Мотов метал-изолатор прелаз се не може успешно објаснити помоћу теорије средњег поља Хартри-Фок (*Hartree-Fock*) типа, која је ефективно једно - електронска теорија. У многим металима који садрже делимично попуњене d , или f орбитале, као што су манган, ванадијум, церијум, валентни електрони осећају јако међусобно Кулоново одбијање. Такви јако корелисани електрони се не могу описати као слободни у статичком усредњеном пољу осталих електрона, што је заправо Хартри-Фок приступ. У овом раду ћемо користити динамичку теорију средњег поља (*dynamical mean-field theory*), или скраћено *DMFT*, која са успехом описује ефекте јаких електронских корелација. За разлику од статичке теорије средњег поља, *DMFT* у потпуности узима у обзир квантне флукуације, дозвољавајући размену честица између одређеног чвора и његовог окружења. *DMFT* је математички добро дефинисана теорија која постаје егзактна у лимесу великог координационог броја. Овај метод и његова уопштења су дала значајан допринос разумевању физике јако корелисаних система и успешно описали многе материјале у којима се јављају јаке корелације. Динамичка теорија средњег поља се показала нарочито корисном у проучавању физике у близини Мотовог метал-изолатор прелаза.

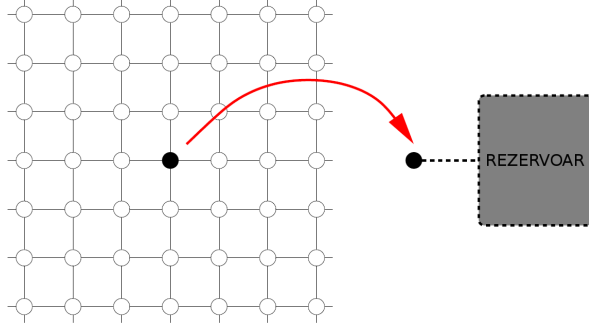
2.1 Динамичка теорија средњег поља

Динамичка теорија средњег поља представља уопштење класичне, Вајсове (*Weiss*), теорије средњег поља која апроксимира решетку са много степени слободе једним ефективним чвором са свега неколико степени слободе, спрегнутим са резервоаром који описује остатак система, слика 1. Резервоар је представљен ефективним (Вајсовим) пољем које се добија самоусаглашеним решавањем проблема.

Главне идеје ће бити представљене на примеру Хабардовог модела, за кога се може рећи да је најједноставнији, а испоставља се и најбољи модел за опис јако корелисаних система. Хамилтонијан овог модела има следећи облик:

$$H = - \sum_{ij,\sigma} t_{i,j} d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \varepsilon_0 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}, \quad (1)$$

где је $n_{i\sigma} = d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}$ окупационо број чвора i , а параметар U одређује јачину (екраниране) Кулонове интеракције. Из облика хамилтонијана можемо видети да описује скуп "атома" са једном орбиталом, стављених у чворове i периодичне решетке. Изоловани атом има четири својствена стања: $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, са својственим вредностима (енергијама), $0, \varepsilon_0, \varepsilon_0, U + 2\varepsilon_0$, респек-



Слика 1: Теорија средњег поља замењује решетку једним чвором спрегнутим са самоусаглашено одређеним резервоаром.

тивно. Орбитале суседних чворова се преклапају тако да електрони могу да ”прескоче“ са једног на други чвор са вероватноћом t_{ij} (*hopping* амплитудом).

Главна величина на коју се *DMFT* ослања је локална Гринава функција на једном чвору решетке [3, 4]

$$G_{ii}^{\sigma}(\tau - \tau') \equiv -\langle T d_{i\sigma}(\tau) d_{i\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle \quad (2)$$

У класичној теорији средњег поља, локална магнетизација $m_i = \langle S_i \rangle$ је одређена спином на чвору i који интерагује са ефективним пољем околних спинова. Аналогно, овде уводимо репрезентацију локалне Гринево функције која описује атом који је спрегнут (хибридизован) са ефективним резервоаром. Ово се може описати хамилтонијаном модела Андерсонове нечистоће

$$H_{AIM} = H_{atom} + H_{bath} + H_{coupling}, \quad (3)$$

где је

$$\begin{aligned} H_{atom} &= U n_{\uparrow}^d n_{\downarrow}^d + (\varepsilon_0 - \mu)(n_{\uparrow}^d + n_{\downarrow}^d), \\ H_{bath} &= \sum_{i\sigma} \tilde{\varepsilon}_i a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma}, \\ H_{coupling} &= \sum_{i\sigma} V_i (a_{i\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma}). \end{aligned} \quad (4)$$

У овим изразима је уведен скуп неинтерагујућих фермиона (a^{\dagger}), који представљају степене слободе честица ефективног резервоара (*cavity field, hybridization function*), који окружује чвор i . Параметре $\tilde{\varepsilon}_i$ и V_i , треба изабрати тако да се Гринево функције d -орбитала (нечистоћа) у једначини (4) поклапа са локалном Гриновом функцијом решетке Хабардовога модела. Заправо, ови параметри улазе једино кроз хибридизациону функцију:

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_l}. \quad (5)$$

Ово се може лако видети ако проблем преточимо у облик који не укључује експлицитно степене слободе резервоара. То, међутим, захтева коришћење формализма ефективног дејства. Када извршимо интеграцију по степенима слободе резервоара, добијамо ефективно дејство за ”нечистоћу“ у облику:

$$S_{eff} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma d_\sigma^+(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') d_\sigma(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_\uparrow(\tau) n_\downarrow(\tau), \quad (6)$$

где је

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \varepsilon_0 - \Delta(i\omega_n). \quad (7)$$

Видимо да локално дејство описује ефективну динамику локалног чвора, под чим се подразумева: фермион се ствара на том чвору у тренутку τ (долази из резервоара, тј. са неког другог чвора решетке) и нестаје у тренутку τ' (поново се враћа у резервоар). Докле год су присутна два фермиона (са супротним спином) у истом тренутку, енергија интеракције U је укључена. Одавде се може лако уочити да ефективно дејство описује флуктуације између четири атомска стања $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$. \mathcal{G}_0 се може интерпретирати као квантна генерализација Вајсовог ефективног поља у класичном случају. Основна разлика између класичног случаја (теорија средњег поља) и квантног ($DMFT$) је та да је у другом случају динамичко средње поље функција енергије (или времена), уместо само броја (положај чвора). Ова зависност је неопходна да би се потпуно урачунале локалне квантне флуктуације, што је и сврха увођења $DMFT$ -а. \mathcal{G}_0 такође игра улогу неинтерагујуће Гринево функције за ефективно дејство S_{eff} , али је не треба мешати са неинтерагујућом ($U = 0$) локалном Гринево функцијом кристалне решетке.

До сада смо увели квантну генерализацију ефективних Вајсових поља \mathcal{G}_0 и репрезентацију локалне Гринево функције $G(\tau - \tau') \equiv -\langle T d(\tau) d^+(\tau') \rangle_{S_{eff}}$. У даљем поступку, потребно је још наћи везу између ове две величине. У класичном случају је то била релација за самоусаглашено решавање (релација самоусаглашености). Један од начина да се добије ова веза је да се дефинише сопствена енергија (*self-energy*) помоћу интеракционе Гринево функције G и Вајсовог динамичког средњег поља, на следећи начин

$$\begin{aligned} \Sigma_{imp}(i\omega) &\equiv \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) - G^{-1}(i\omega) \\ &= i\omega_n + \mu - \varepsilon_0 - \Delta(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n) \end{aligned} \quad (8)$$

Са друге стране, сопствена енергија решетке је дефинисана помоћу Гринево функције $G_{ij}(\tau - \tau') \equiv -\langle T d_{i,\sigma}(\tau) d_{j,\sigma}^+(\tau') \rangle$. У импулсном простору

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}, \quad (9)$$

где је $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ (дисперзиона релација) одређена Фуријеовим трансформом *hopping* интеграла.

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} \equiv \sum_n t_{mn} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \quad (10)$$

На овом месту вршимо апроксимацију, да се сопствена енергија решетке поклапа са сопственом енергијом нечистоће. Заправо, овде смо занемарили све нелокалне компоненте Σ_{ij} и апроксимирали сопствену енергију на одређеном чвору са сопственом енергијом нечистоће Σ_{imp} ,

$$\Sigma_{ii} \simeq \Sigma_{imp}, \quad \Sigma_{i \neq j} \simeq 0. \quad (11)$$

Очигледно је, да је ово добра апроксимација, само ако води јединственом решењу Гринове функције на једном чвору која се поклапа са Гриновом функцијом нечистоће. Ако извршимо сумирање по \mathbf{k} у једначини (2), добијамо локалну Гринову функцију на i -том чвору. Када искористимо једначину (8), долазимо до услова самоусаглашености

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\Delta(i\omega_n) + G(i\omega_n)^{-1} - \varepsilon_{\mathbf{k}}} = G(i\omega_n), \quad (12)$$

где је сума по импулсима нормирана на јединицу ($\sum_{\mathbf{k}} 1 = 1$).

Можемо да дефинишемо неинтерагујућу густину стања на следећи начин

$$D(\varepsilon) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (13)$$

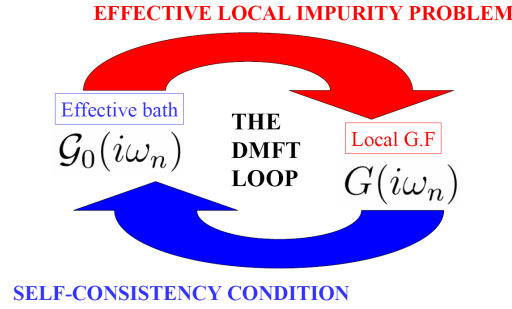
Користећи се претходном дефиницијом, сума у једначини (12), постаје

$$\int d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\Delta(i\omega_n) + G(i\omega_n)^{-1} - \varepsilon} = G(i\omega_n). \quad (14)$$

Добијени услов самоусаглашености повезује, за сваку фреквенцију, динамичко средње поље $\Delta(i\omega_n)$ и локалну Гринову функцију $G(i\omega_n)$. Овим смо затворили скуп једначина које, у принципу, у потпуности, одређују две функције, Δ и G (односно \mathcal{G}_0 и G).

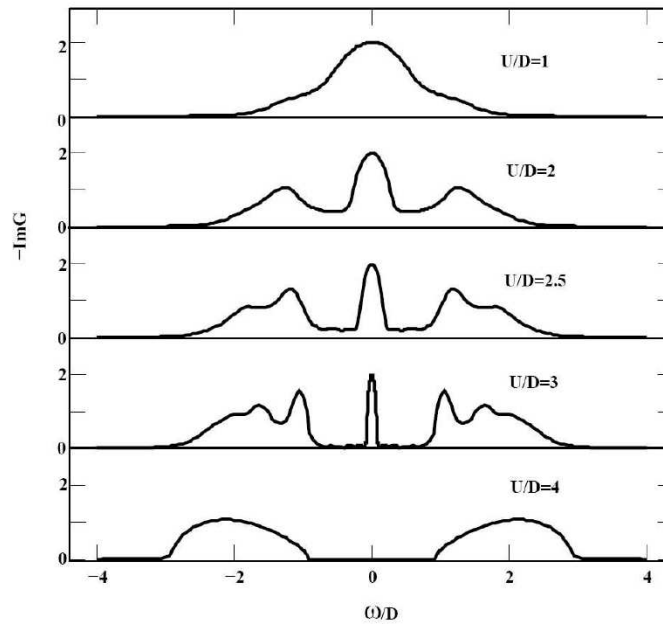
Може се направити итеративни ”рецепт“ за налажење самоусаглашеног решења. Полазна тачка је функција $\mathcal{G}_0 = i\omega_n + \mu - \varepsilon_0 - \Delta$, која се претпостави у неком облику (од облика зависи број итерација). Потом се израчунава Гринова функција нечистоће G коришћењем одговарајућег алгорита. Постоји неколико начина за налажење Гринове функције Андерсонове нечистоће [3]. У овом раду ћемо користити ”NCA“ апроксимацију [5], која се добија у најнижем (другом) реду пертурбације по хибридизацији V . Сопствена енергија нечистоће се израчунава по формули (8), $\Sigma_{imp}(i\omega) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) - G^{-1}(i\omega)$. Нова локална Гринова функција се добија интегралом (14), а нова Вајсова функција из релације $\mathcal{G}_{0,novo}^{-1} = G^{-1} + \Sigma_{imp}$. Она се убацује на почетак и почиње нова итерација. Процедура се понавља све док се не достигне конвергенција. Ово је шематски приказано на слици 2.

Први велики успех динамичке теорије средњег поља је успешан опис Мотовог метал-изолатор прелаза у оксидима прелазних метала, попут V_2O_3 , који

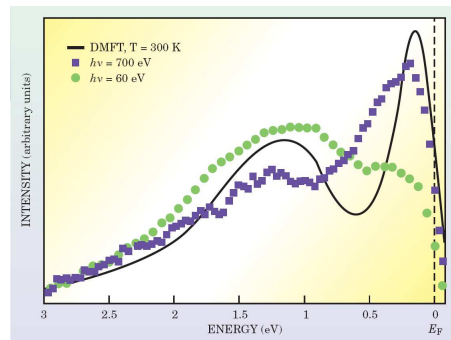


Слика 2: *DMFT* итеративна петља. Горња стрела представља *NCA*, доња поступак за добијање нове Вајсове функције.

поседују један валентни електрон по чвору решетке. Основни опис ових система је дат Хабардовим моделом попуњености $1/2$ (један електрон по чвору). Спектар једночестичних екситација (густина стања) се мења са интеракцијом U . Као додатак нискоенергетским квазичестицама (које имају спектралну тежину Z), једночестични спектар јако корелисаног метала садржи високоенергетске екситације спектралне тежине $1 - Z$. Резултат овога је постојање три пика у густини стања $A(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, \omega)$. Средишњи пик је квазичестични и налази се на Фермијевој енергији, а окружују га Хабардови пикови. Са приближавањем Мотовом метал-изолатор прелазу, спектрална тежина квазичестичног дела се смањује. У изолатору, нижа и виша Хабардова зона су раздвојене енергијским процепом. На слици 4 је приказана експериментална потврда *DMFT* теорије добијена фотоемисионим спектроскопским мерењима на ванадијум оксиду.



Слика 3: Локална спектрална функција за неколико вредности јачине интеракције [3]. Видимо како се квазичестични пик сужава и на крају потпуно нестаје, са порастом јачине интеракције. За $U/D = 4$ имамо енергецки процес између Хабардових зона.

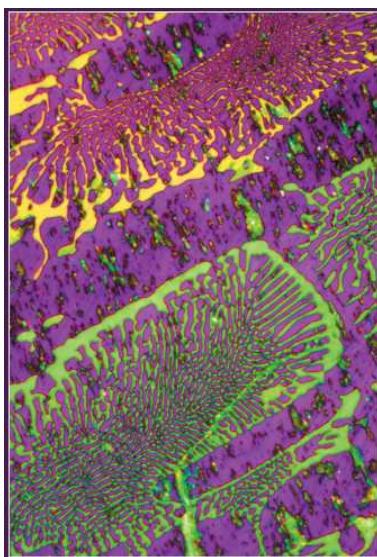


Слика 4: Фотоемисиони спектар ванадијум оксида (V_2O_3) у близини метал-изолатор прелаза. *DMFT* прорачун (линија) прати квалитативне особине експерименталног спектра. Теорија даје оштар квазичестични пик центриран на Фермијевом нивоу и Хабардове зоне. Фотони веће енергије (плаве тачке) су мање осетљиви на квалитет површине и боље приказују квазичестични пик. Преузето из [2].

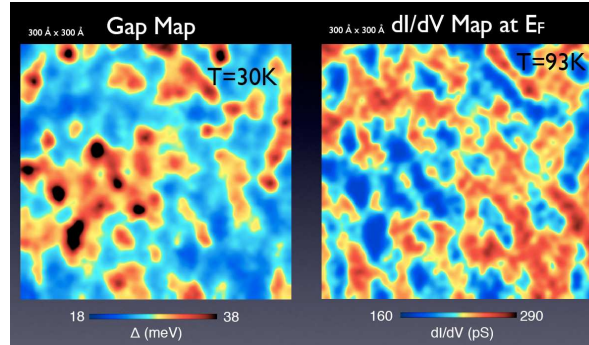
2.2 Мотов метал-изолатор прелаз у неуређеним системима

У последњих двадесетак година, откривене су различите класе јако корелисаних материјала са структуром која знатно одступа од идеално периодичне. То је нарочито случај код комплексних материјала који се добијају допирањем, односно заменом једног атома полазног једињења атомом друге врсте. Положај допираног атома у решетки је најчешће случајан и систем постаје неуређен. Објашњење физичких особина ових материјала представља велики интелектуални изазов и истовремено обећава значајне технолошке примене. Због тога је разумевање особина система у режиму где су јаке и електронске корелације и ефекти неуређености један од најважнијих отворених проблема у савременој физици кондензоване материје. Ово ћемо илустровати на неколико примера.

Слика 5 је преузета са постера радионице "*Complex behavior in correlated electron systems*", *Leiden 2005*. и показује широк спектар фаза које се могу јавити у манган-оксидима. Слика 6 је добијена из тунелних спектроскопских мерења (*scanning tunnelling microscopy*) на високотемпературним суперпроводницима, материјалима који се добијају допирањем Мотовог изолатора. Велики напредак у експерименталним техникама, које сада омогућавају локална мерења на наноскопској просторној скали, све више указује на значај ефеката неуређености. Један од начина да се ефекти неуређености систематски проуче

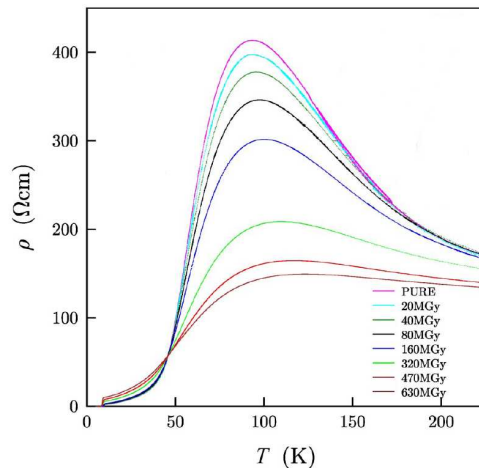


Слика 5: Перколациона проводност у полуметалној-феромагнетној и фероелектричној легури $((\text{La}, \text{Lu}, \text{Sr})\text{MnO}_3)$ [9]. Љубичасте области одговарају шестоугаоним LuMnO_3 (фероелектрик и антиферомагнетик), док светле области представљају орторомбичне $(\text{La}, \text{Sr})\text{MnO}_3$ (феромагнетни метал).



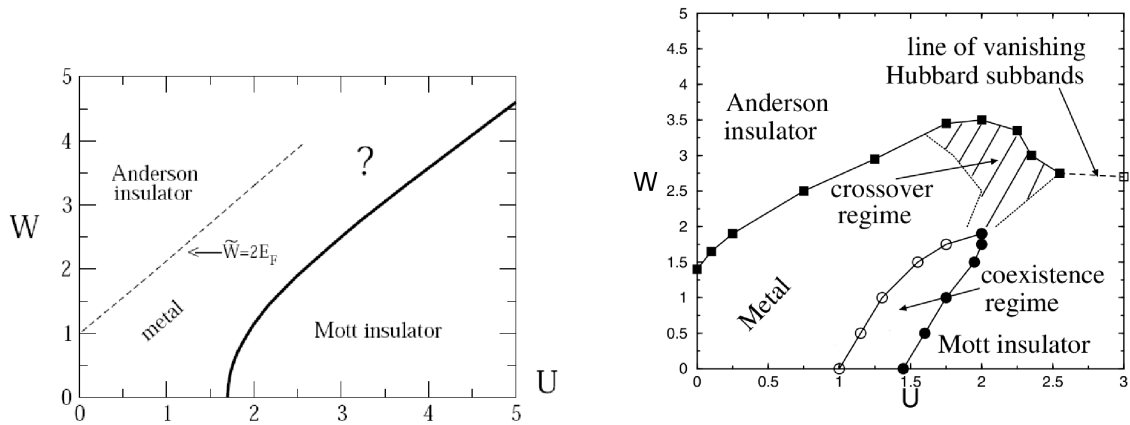
Слика 6: Просторна расподела суперпроводног процепа у $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ на $T = 30K$ (леви панел) и расподела проводности у нормалној фази на $T = 93K$. [14]

је уношење структурних дефеката путем озрачавања материјала. Слика 7 приказује температурну зависност отпора органског квази-двоструменског материјала $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu(SCN)_2$ за различите нивое озрачености.



Слика 7: Отпор $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu(SCN)_2$ у функцији температуре [6]. Структурна неуређеност је пропорционална степену озрачености материјала путем X-зрака.

Динамичка теорија средњег поља пружа одличан (можда и једини!) теоријски оквир за проучавање јако корелираних неуређених система. Слика 8 приказује фазни дијаграм за Хабардов модел попуњености $1/2$ у присуству неуређености. За разлику од чистог, у неуређеном случају потребно је самоусаглашено решити Андерсонов проблем за ансамбл нечистоћа.



Слика 8: *DMFT* фазни дијаграм за неуређени Хабардов модел на температури $T = 0$ [7, 8]. За малу неуређеност W , метал-изолатор прелаз настаје услед јаке интеракције U (Мотов прелаз). При слабој интеракцији, прелаз је Андерсоновог типа - јака неуређеност доводи до локализације електронских таласних функција. *DMFT* метод је у могућности да опише метал-изолатор прелаз у режиму где су јаки и интеракција и неуређеност (Мот-Андерсон прелаз).

3 Проводност у близини Мотовог прелаза

У овом, централном поглављу дипломског рада, биће представљени наши главни резултати. *DMFT* једначине су решене за Хабардов модел попуњености $1/2$ у чистом случају и у присуству неуређености. Израчунали смо густине стања и проводност система за различите нивое интеракције, неуређености и на различитим температурама. За налажење локалне Грине функције коришћен је *NCA* алгоритам [5] за решавање проблема Андерсонове нечистоће.

3.1 Грине функције за Андерсонову нечистоћу у “*NCA*“ апроксимацији

”Непресецајућа“ апроксимација (*noncrossing approximation, NCA*) представља најједноставнију апроксимацију у решавању Андерсоновог проблема. Садржи најниже чланове у пертурбативном развоју по хибридизационој функцији и првобитно је развијена за случај бесконачне јачине интеракције U . Међутим, за опис физике Мотовог метал-изолатор прелаза неопходна нам је генерализација која добро описује системе са коначном јачином интеракције. Представићу укратко ову генерализацију. Она очувава симетрију виртуелних прелаза на празне, или двоструко попуњене, локалне нивое. Ова особина је неопходна за добијање тачне Кондо температуре T_K [15]. Видећемо да за добијање квалитативно коректне Кондо температуре није довољно задржати се на првом члану развоја.

Размотрићемо систем у коме се локална нечистоћа (d ниво) хибридизује са проводним електронским стањима. Енергија E_d може бити мања, или већа од Фермијеве енергије, у зависности од попуњености нивоа. Два електрона са спиновима \uparrow и \downarrow на локалном нивоу интерагују Кулоновом интеракцијом U . Претпоставићемо да су локална стања креирана квазичестичним операторима b^\dagger (непопуњено стање), f_σ^\dagger (једноструко попуњено стање са спином σ) и a^\dagger (двоструко попуњено стање), који делују на вакуумско стање без нечистоће. f_σ је фермионски оператор, а a и b су бозонски оператори које ћемо звати тешки и лаки, респективно. Креациони оператор локалног (физичког) електрона може се написати као $d_\sigma^\dagger = f_\sigma^\dagger b + \sigma a^\dagger f_{-\sigma}$, где квазичестични окупациони бројеви морају да задовољавају услов

$$Q = a^\dagger a + b^\dagger b + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} = 1. \quad (15)$$

Овај услов изражава чињеницу да је у било ком тренутку времена нечистоћа у тачно једном од стања: празно, једноструко, или двоструко попуњено. Хамилтонијан Андерсоновог модела изражен преко квазичестичних опера-

тора, добија облик

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + E_d(2a^\dagger a + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma}) + Ua^\dagger a + \sum_{\vec{k}, \sigma} V(c_{\vec{k}\sigma}^\dagger b^\dagger f_{\sigma} + \sigma c_{\vec{k}\sigma}^\dagger f_{-\sigma}^\dagger a + H.c.), \quad (16)$$

где су $c_{\vec{k}\sigma}^\dagger$ фермионски оператори који креирају електроне у проводним стањима $|\vec{k}\sigma\rangle$ са енергијом ϵ_k . V је хибридациони матрични елемент.

Једночестичне Грине функције се могу изразити преко сопствених енергија $\Sigma_{f,b,c}(i\omega)$ као

$$\begin{aligned} G_{f\sigma}(i\omega) &= [i\omega + \mu - E_d - \Sigma_f(i\omega)]^{-1}, \\ G_b(i\omega) &= [i\omega + \mu - \Sigma_b(i\omega)]^{-1}, \\ G_a(i\omega) &= [i\omega + \mu - 2E_d - U - \Sigma_a(i\omega)]^{-1}. \end{aligned} \quad (17)$$

Локална Грина функција проводних електрона има облик

$$G_{c\sigma}(i\omega) = \left\{ [G_{c\sigma}^0(i\omega)]^{-1} - \Sigma_{c\sigma}(i\omega) \right\}^{-1}, \quad (18)$$

где је

$$G_{c\sigma}^0(i\omega) = \sum_{\vec{k}} G_{c\sigma}^0(\vec{k}, i\omega) = \sum_{\vec{k}} [i\omega - \epsilon_k]^{-1}. \quad (19)$$

Најлакши начин за извођење апроксимације је помоћу одговарајућег Латингер-Ворд (*Luttinger-Ward*) функционала Φ из кога рачунамо корелационе функције и сопствене енергије. Избор дијаграма за одређену апроксимацију зависи од тога, који је доминантни процес у систему. Функционал садржи Фајманове дијаграме састављене од квазичестичних Гринских функција (G_f, G_b, G_a, G_c). Сопствене енергије ($\Sigma_f, \Sigma_b, \Sigma_a, \Sigma_c$) се израчунавају помоћу формуле

$$\Sigma_\mu = \frac{\delta\Phi}{\delta G_\mu}. \quad (20)$$

NCA је заправо најгрубља апроксимација (најнижи ред у развоју похибридизацији V) нашег модела. Латингер-Ворд функционал у овом случају је приказан на слици 9. Видимо да су узети само дијаграми у којима нема пресецања линија. То је и била инспирација за назив апроксимације.

$$\Phi = \text{[diagram 1]} + \text{[diagram 2]} \quad \text{a) NCA}$$

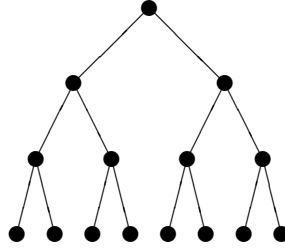
Слика 9: Два најнижа члана у развоју Латингер-Ворд функционала. Пуна, испрекидана, кривудава и цик-цак линија представљају проводни електрон c , псеудофермион f , лаки бозон b и тешки бозон a , респективно.

3.2 Густина стања близу Мотовог прелаза

Укратко ћу представити *DMFT* једначине за Бете (*Bethe*) решетку, изложити резултате за густину стања и упоредити их са оним за хиперкубну решетку.

3.2.1 Бете решетка

Видели смо, у поглављу 2.1, општу процедуру за налажење самоусаглашеног решења динамичког средњег поља. Сада ћемо то применити на случај Бете решетке, слика 10. Оно што нама, у ствари треба, је локална



Слика 10: Шемацки приказ Бетхе решетке са координационим бројем $z = 3$.

Гринова функција, јер из ње налазимо локалну густину стања

$$A(\omega) = \frac{-1}{\pi} \text{Im}G(\omega). \quad (21)$$

Када се разматра случај бесконачно великог координационог броја ($z \rightarrow \infty$), мора се скалирати *hopping* члан, $t_{ij} = t/\sqrt{z}$, јер би у супротном функције дивергирале. Гринова функција неинтерагујућих електрона на Бете решетки има облик

$$G_0(\omega) = \frac{\omega - \sqrt{\omega^2 - 4t^2}}{2t^2}, \quad (22)$$

а густина стања има облик полуелипсе

$$D(\epsilon) = \frac{1}{2\pi t^2} \sqrt{4t^2 - \epsilon^2}, \quad |\epsilon| < 2t. \quad (23)$$

Релација самоусаглашености се овде битно упрошћава

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - t^2 G(i\omega_n). \quad (24)$$

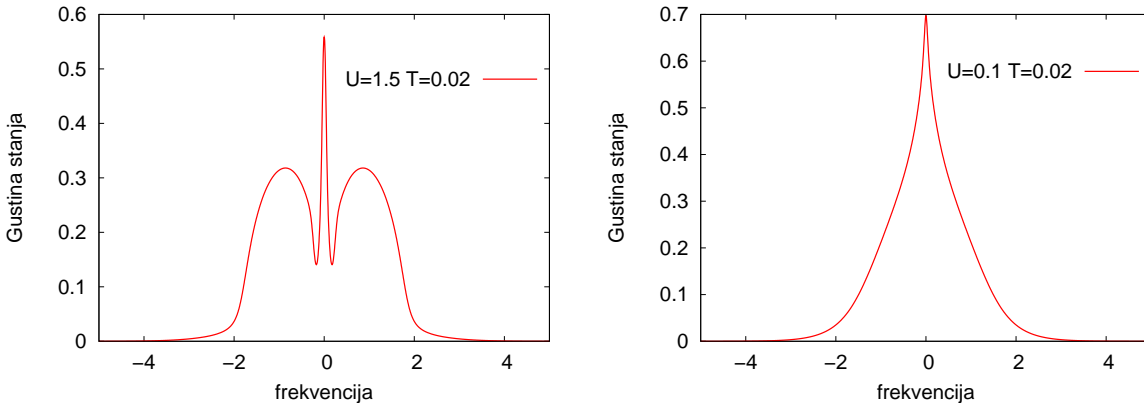
Хибридизациона функција Δ , је стога врло једностано повезана са локалном Гриновом функцијом

$$\Delta = t^2 G. \quad (25)$$

3.2.2 *DMFT* резултати за Бете решетку

У овом делу ћу изложити нумеричке резултате. Сви резултати су изражени у релативним јединицама: јединица за енергију је једнака полуширини зоне (D) за неинтерагујући систем. *DMFT* једначине за Хабардов модел попуњености $1/2$ су решене на примеру Бете решетке. За решавање Андерсоновог проблема, који је технички најзахтевнији корак у решавању *DMFT* једначина, користили смо *NCA* код, који смо добили од Кристјана Хаулеа са Универзитета "Rutgers", Њу Џерси, САД.

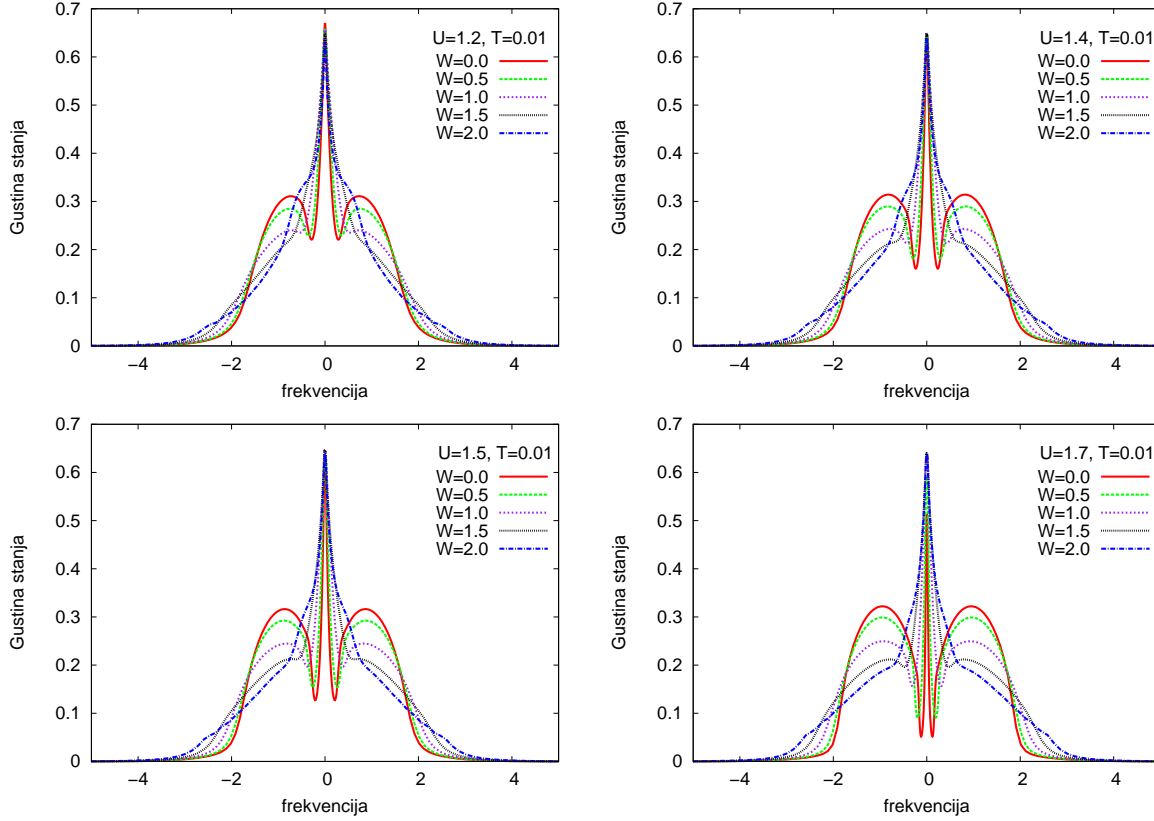
За проверу кода, поновили смо резултате из референце [12] и добили потпуно слагање резултата, слика 11. Резултат за јачину интеракције $U = 1.5$ је квалитативно добар, док је у случају $U = 0.1$ резултат очигледно лош (очекујемо густину стања облика полуелипсе). Овако лош резултат за случај слабих корелација је последица грубе апроксимације примењене у *NCA* алгоритму.



Слика 11: Густина стања за Бете решетку у јако корелисаном ($U = 1.5$) и слабо корелисаном ($U = 0.1$) случају.

На слици 12 су приказани *DMFT* резултати за Бете решетку. За почетак продискутујмо графике за чист случај (црвене линије). На спектру се могу уочити три пика. Високоенергетски пикови су нижа и виша Хабардова зона центриране симетрично око Фермијевог нивоа на енергијама $\pm U/2$. Њих раздваја узак квазичестични пик који се налази на Фермијевом нивоу. Уочљиво је да се квазичестични пик сужава, са растом интеракције, за $U = 1.7$ је прилично узак. Одатле можемо закључити да се систем (за параметре $T = 0.01$ и $U = 1.7$) налази у близини Мотовог метал-изолатор прелаза. Критична интеракција U_c је приближно 1.9. За вредности $U > U_c$ потпуно нестаје квазичестични пик, настаје процеп у енергетском спектру и имамо изолатор. Када ширина пика

постане врло мала, *DMFT* једначине садрже две врло различите енергетске скале, једну дату интеракцијом U , а другу ширином пика.



Слика 12: Густина стања (зависност имагинарног дела Гриневог функције од фреквенције). Приказани су графици на температури $T = 0.01$ и за јачине интеракције $U = 1.2$, $U = 1.4$, $U = 1.5$, $U = 1.7$, респективно. На сваком графику се налазе криве за неколико неуређености.

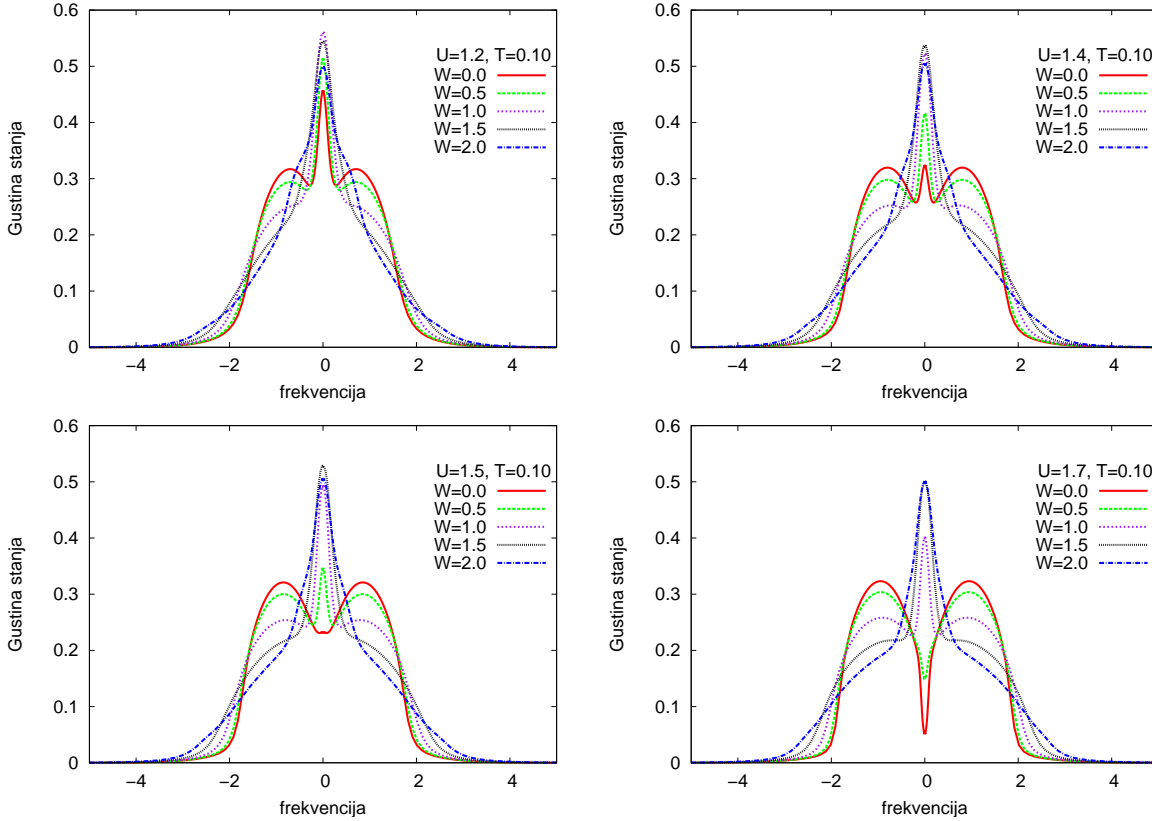
Посматрали смо систем различите степене неуређености. Хамилтонијан неуређеног Хабардовог модела је

$$H = - \sum_{ij,\sigma} t_{i,j} d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma}. \quad (26)$$

Неуређеност моделујемо случајним потенцијалом ε_i , узетим из униформне расподеле на интервалу $[-W/2, W/2]$. Гринуову функцију смо рачунали усредњавањем по локалној Гриневој функцији

$$G(i\omega_n) = \int d\varepsilon_j P(\varepsilon_j) G_j(i\omega_n), \quad (27)$$

где је $P(\varepsilon_j)$ расподела неуређености. Уочава се да неуређеност утиче на густину стања тако што снижава Хабардове пикове, док се квазичестични пик се шири. То ефективно одговара смањењу јачине интеракције, односно удаљавању од метал-изолатор прелаза.



Слика 13: Густина стања за Бете решетку на температури $T = 0.1$ и за јачине интеракције $U = 1.2, U = 1.4, U = 1.5, U = 1.7$, респективно. На сваком графику се налазе криве за неколико јачина неуређености $W = 0, 0.5, 1, 1.5, 2$.

Интересантно је погледати шта се дешава на вишим температурама. Слика 13 представља *DMFT* резултате за Бете решетку на температури $T = 0.1$. Видимо да на тој температури за јачину неуређености $U = 1.7$ нема квазичестичног пика. Упоредјујући слике 12 и 13 можемо закључити да је квазичестични пик врло осетљив на промену температуре. Његова висина се смањује када расте температура и пик нестаје када температура достигне карактеристичну вредност ε_F^* реда ширине пика на $T = 0$, остављајући псеудо процеп на Фермијевој енергији. То значи да не постоје дугоживуће квазичестице на

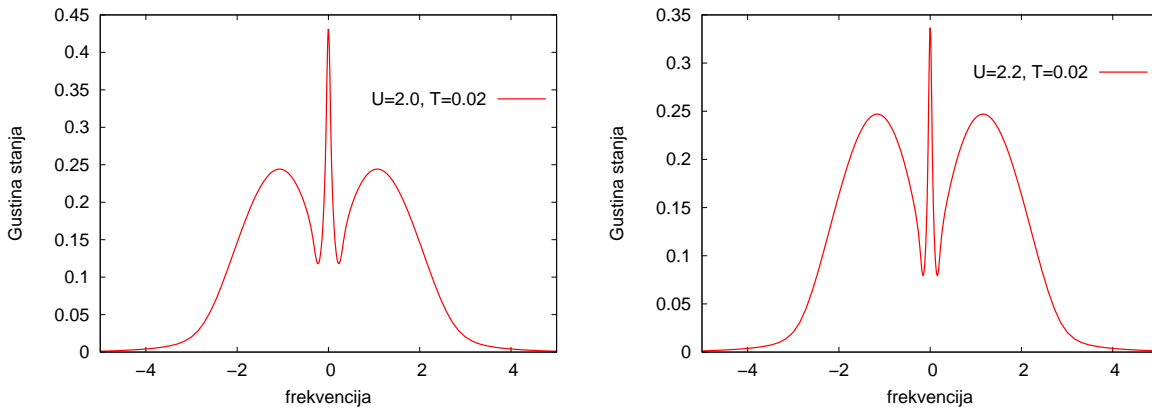
температури изнад ε_F^* . Одговарајућа спектрална тежина се расподељује у великом опсегу енергија реда U (које је много веће од температуре). Ово потсећа на Кондо систем, што није изненађујуће пошто знамо да *DMFT* установљава формалну и физичку везу између метала у близини Мотовог прелаза и Кондо проблема. Локални момент који постоји на малим временским скалама је екраниран изменским Кондо процесом који укључује нискоенергетски део електронског гаса. Прерасподела спектралне густине је карактеристична за јако корелисане системе.

3.2.3 *DMFT* резултати за хиперкубну решетку

Представићу, у овом делу, резултате добијене за чисту хиперкубну решетку. Једина разлика у *DMFT* једначинама за Бете и хиперкубну решетку је у неинтерагујућој густини стања. Густина стања неинтерагујућих електрона на хиперкубној решетки има Гаусов облик

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{t\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{2t^2}\right). \quad (28)$$

Услов самоусаглашености је нешто сложенији него за Бете решетку и имплементирали смо га користећи релацију (14). Критична јачина интеракције је нешто већа него код Бете решетки. Са слике 14, међутим, видимо да је густина стања близу метал-изолатор прелаза веома слична густини за Бете решетку, што потврђује познату чињеницу да *DMFT* резултати веома мало зависе од детаљног облика густине стања неинтерагујућег система.



Слика 14: Густина стања за хиперкубну решетку на температури $T = 0.02$ и за јачине интеракције $U = 2$, $U = 2.2$.

3.3 Оптичка проводност

Истраживање електричних особина материјала на коначним фреквенцијама захтева коришћење оптичке спектроскопије. Оптичка спектроскопија обезбеђује директан увид у фреквентну зависност проводности. Оптичка проводност (σ) дефинише се релацијом

$$\vec{j}(\omega) = \sigma(\omega)\vec{E}(\omega). \quad (29)$$

Она се може израчунати из корелационе функције [10]

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{-i\omega} \left[\frac{ne^2}{m} - \langle j(\omega)j(-\omega) \rangle \right]. \quad (30)$$

Видимо да се израз (30) састоји из два дела, водећи дијамагнетни део који описује високофреквентни одговор система на векторски потенцијал и други, парамагнетни део. Парамагнетни део, тј. корелациону функцију $\langle j(\omega)j(-\omega) \rangle$, можемо написати у облику

$$\langle j(\omega)j(-\omega) \rangle = i \int_0^\infty dt d^3x \langle [j(x,t), j(0)] \rangle e^{i\omega t}. \quad (31)$$

j је густина струје дефинисана са

$$j(x) = -i \frac{\hbar}{m} \psi^\dagger(x) \nabla \psi(x). \quad (32)$$

Можемо да видимо да корелациона функција зависи од свих прошлих тренутака времена, тј. да је ретардирана.

За наше потребе користићемо формулу за оптичку проводност изведена у *DMFT* апроксимацији [3]

$$\sigma(i\omega) = \frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu' D(\epsilon) \rho(\epsilon, \nu) \rho(\epsilon, \nu') \frac{f(\nu) - f(\nu')}{\nu - \nu' + i\omega}, \quad (33)$$

одакле се аналитичким продужењем на реалну осу добија

$$\text{Re } \sigma(\omega + i0^+) = \pi \frac{e^2}{\hbar ad} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu D(\epsilon) \rho(\epsilon, \nu) \rho(\epsilon, \nu + \omega) \frac{f(\nu) - f(\nu + \omega)}{\omega}. \quad (34)$$

Овде је f Фермијева функција, $D(\epsilon)$ неинтерагујућа густина стања, ρ једночасична спектрална функција стања интерагујућих електрона

$$\rho(\epsilon, \nu) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\epsilon, \nu + i0^+) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{(\nu + i0^+) + \mu - \epsilon - \Sigma(\nu + i0^+)} \quad (35)$$

Наше резултате ћемо нормирати на фактор $\pi e^2 / \hbar ad$.

3.3.1 Оптичка проводност слабо корелисаног метала

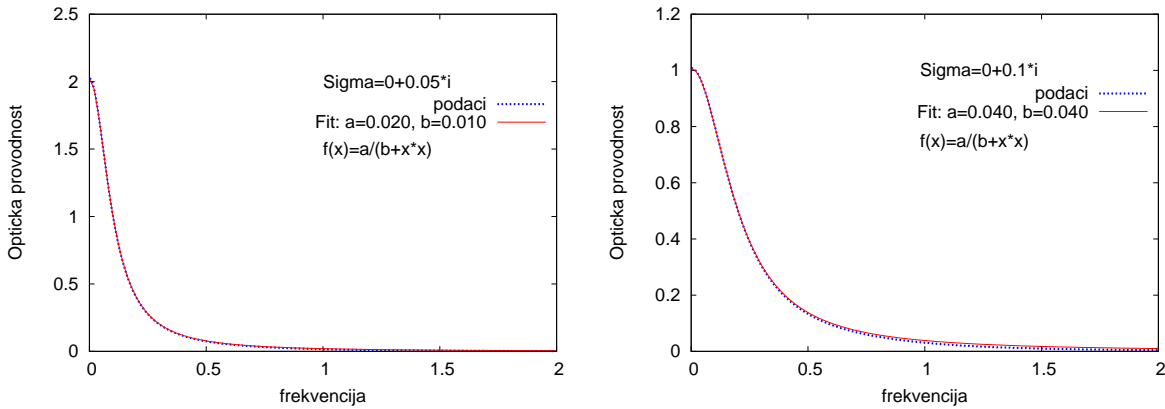
Слабо корелисан метал карактерише слаба фреквентна зависност сопствене енергије у близини Фермијеве површи. У том режиму Друдеова теорија добро одређује оптичку проводност. За мале вредности фреквенције Σ је практично константно. Имагинарни део Σ повезан је са Друдеовим временом релаксације τ преко:

$$\tau^{-1} = -2 \operatorname{Im} \Sigma. \quad (36)$$

Формула за Друдеову проводност је:

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{1}{\tau^{-1} - i\omega} \quad (37)$$

Овде смо једноставно проверили наш нумерички код за добијање оптичке проводности на Друде случају. Резултати су приказани на слици 15, из фита се види одлично слагање резултата са Друдеов формулом.

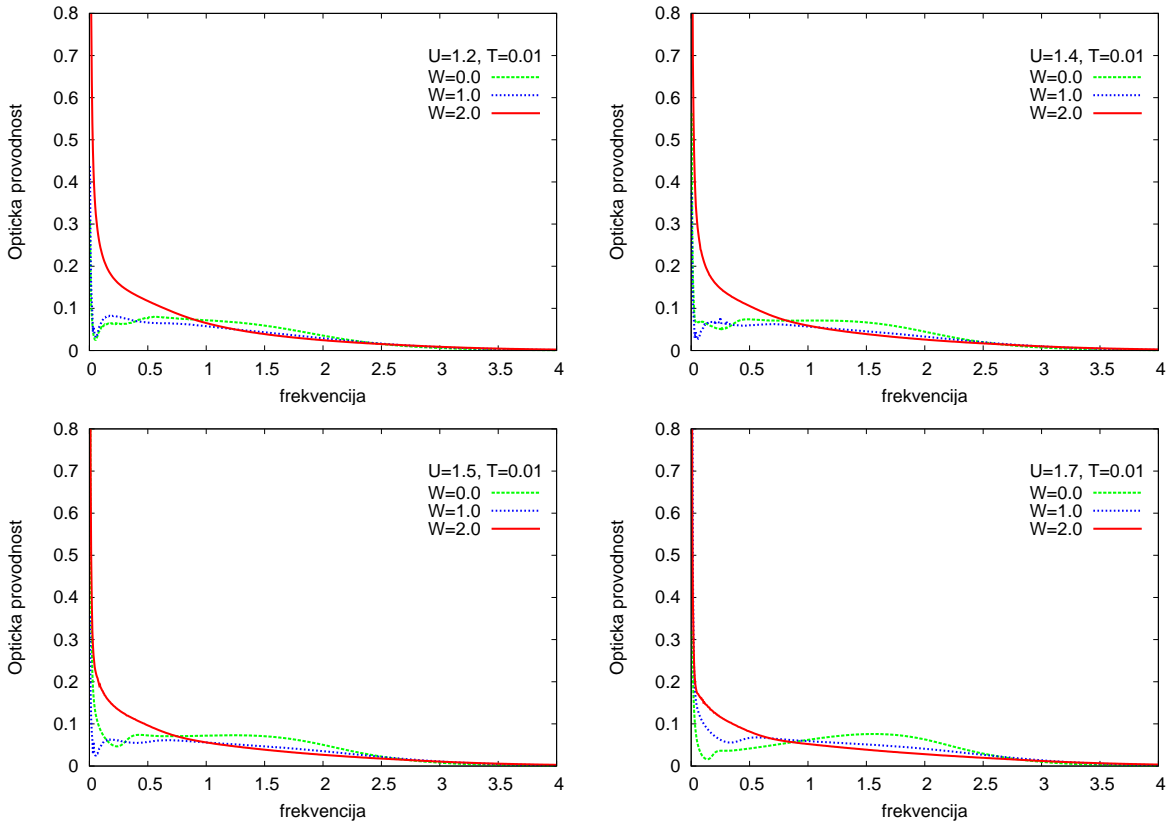


Слика 15: Оптичка проводност (Друдеов облик) за две вредности времена релаксације. Нумерички резултати (зелена линија) су фитовани Друдеовом формулом (црвена линија).

3.3.2 Оптичка проводност у близини Мотовог прелаза

Нумерички резултати за оптичку проводност на ниској температури су приказани на слици 16. На први поглед се виде поједина нефизичка својства добијеног резултата. У принципу, на ниским фреквенцијама требало би да Друдеова теорија добро описује оптичку проводност и да имамо облик налик лоренцијану центрираном у нули, што овде није случај. То је последица

ограничења NCA апроксимације, која не репродукује добро физику на ниским температурама. Нека још драстичнија нефизичка својства која су се јављала на ниским температурама (за поједине вредности фреквенције оптичка проводност је била негативна) смо исправили *ad hoc*.¹ Проблем је био што је NCA алгоритам давао позитивне вредности имагинарног дела сопствене енергије у интервалу око фермјеве енергије. Знамо да је имагинарни део

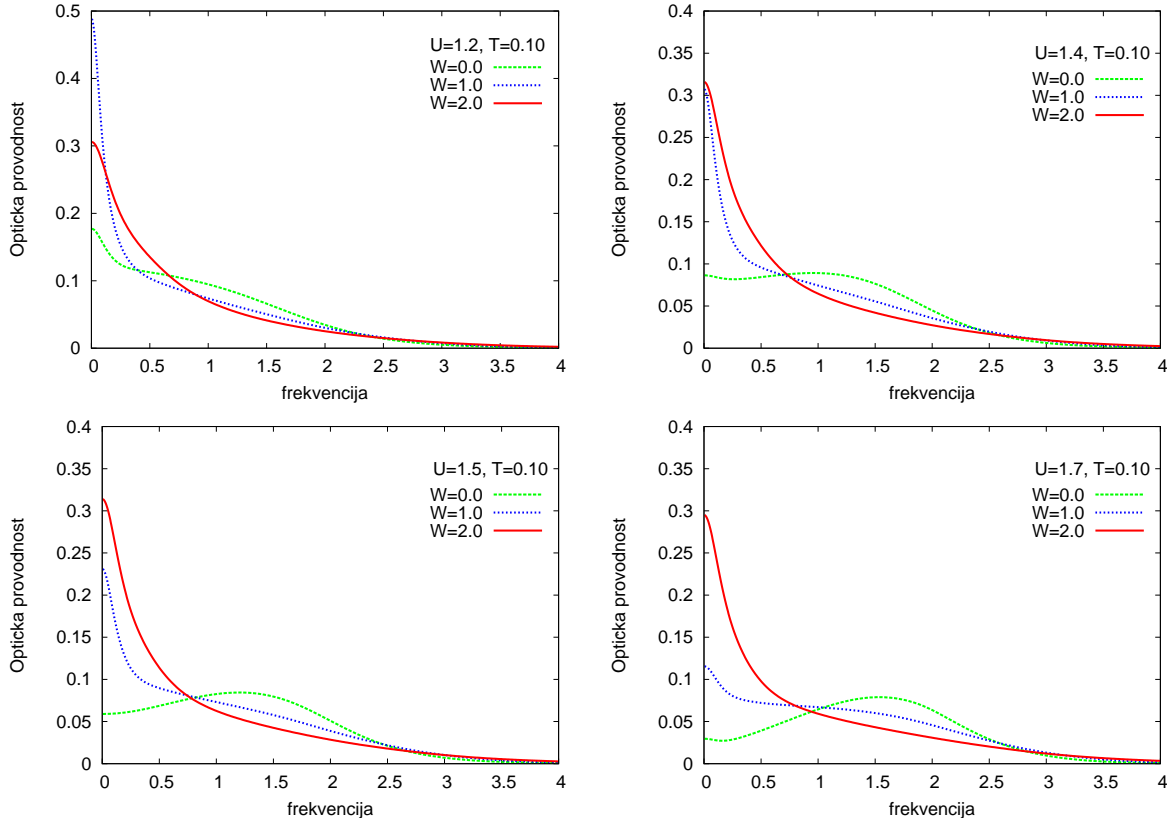


Слика 16: Зависност оптичке проводности од фреквенције. Коришћена је исправљена NCA сопствена енергија. Приказани су графици на температури $T = 0.01$, за јачине интеракције $U = 1.2$, $U = 1.4$, $U = 1.5$, $U = 1.7$, респективно. На сваком графику се налазе криве за неколико јачина неуређености.

сопствене енергије повезан са временом релаксације (36), па мора увек бити негативан. У интервалу где је $\text{Im } \Sigma$ било позитивно заменили смо га вредношћу -10^{-5} и добили квалитативно добру проводност. Са слике можемо још видети квалитативно коректно понашање проводности за више фреквенције.

¹Сугестије смо добили од Кристјана Хаулеа.

Уочава се локални максимум на фреквенцијама које одговарају јачини интеракције U , а надаље проводност опада асимптоцки ка нули.

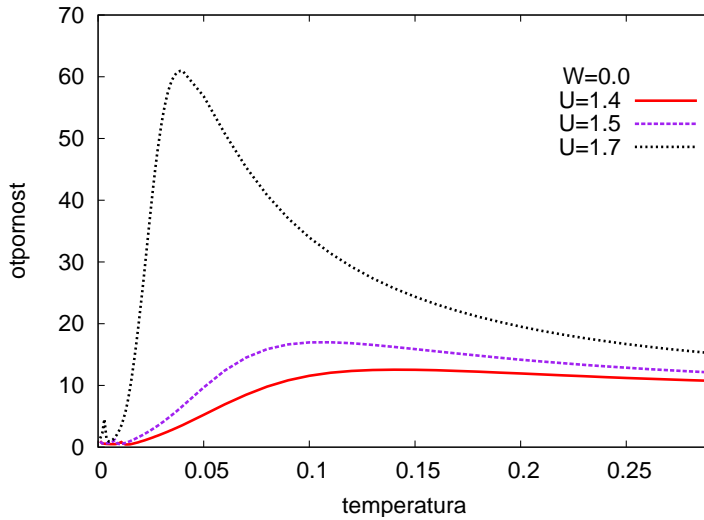


Слика 17: Зависност оптичке проводности од фреквенције. Приказани су графици на температури $T = 0.1$, за јачине интеракције $U = 1.2$, $U = 1.4$, $U = 1.5$, $U = 1.7$, респективно. На сваком графику се налазе криве за неколико јачина неуређености.

Нефизичке особине решења нестају на вишим температурама. На слици 17 су приказани резултати на $T = 0.1$. Проводност има Друдеов облик на ниским фреквенцама, осим јако близу прелаза, када температура уништи квазичестични пик. У чистом случају, примећујемо максимум на $\omega \approx U$, који потиче од екситација између Хабардових зона. Из резултата за оптичку проводност, такође видимо да се са растом неуређености удаљавамо од метал-изолатор прелаза. Примећујемо да проводност на $\omega \rightarrow 0$ има нетривијалну функционалну зависност, пошто зависи и од W и од T и од интерагујуће густине стања.

3.4 Температурна зависност отпора у близини Мотовог прелаза

Проводност (*DC conductivity*) представља одговор система на константно електрично поље. ”*DC*“ проводност се може израчунати из оптичке проводности у лимесу $\omega \rightarrow 0$, $\sigma_{DC} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma(\omega)$. На слици 18 је приказана температурна зависност отпорности, $\rho_{DC} = 1/\sigma_{DC}$ за неколико јачина интеракције. У близини Мотовог прелаза отпроност драматично расте са температуром и достиже максимум на температури која уништава кохерентни пик, што доводи до настајања псеудо процепа на Фермијевој површи. Значајно ће бити да упоредимо овај максимум са Мот-Јофе-Регел (*Mott-Ioffe-Regel*) границом за максималну металну отпорност [11]. Даљим растом температуре, стања на Фермијевој површи се попуњавају, што одговара ”изолаторском“ делу криве на високим температурама. Уочавамо, међутим да резултати на



Слика 18: Температурна зависност отпорности за неколико јачина интеракције.

ниским температурама показују нефизичке карактеристике, што је артефакт *NCA* апроксимације. Одавде је постало очигледно је да нам је за даљи рад потребан бољи алгоритам (*impurity solver*) за решавање модела Андерсонове нечистоће.

3.5 UNCA

Видели смо да *NCA* не описује добро физику Фермијеве течности на ниским температурама. Разлог је у изостављању виших чланова у пертурбативном

$$\begin{aligned}
\Phi &= \text{[diagram 1]} + \text{[diagram 2]} & \text{a) NCA} \\
&+ \text{[diagram 3]} & \text{b) UNCA}
\end{aligned}$$

Слика 19: *UNCA* додаје следећи члан у развоју Латинцер-Ворд функционала. Пуна, испрекидана, кривудава и цик-цак линија представљају проводни електрон c , псеудофермион f , лаки бозон b и тешки бозон a , респективно.

развоју. *UNCA* [5] представља најједноставније уопштење *NCA*, која знатно боље описује физику на ниским енергијама. Разликује се од претходне у томе што је додат следећи члан у развоју Латинцер-Ворд функционала, слика 19. Ова генерализација *NCA*-а добро процењује Кондо температуру T_K (ширину и висину квазичестичног пика) и познато је да се коришћењем овог алгоритма добија и квантитативно коректно решење *DMFT* једначина, макар на температурама $T > T_K$ [13]. *UNCA* апроксимација, која до сада није примењивана за решавање једначина у присуству неуређености, се намеће као метод који ћемо користити у будућем раду.

4 Закључне напомене

У раду смо детаљно проучавали густину стања, оптичку и DC проводност Хабардовог модела у близини Мотовог метал-изолатор прелаза. Радили смо у оквиру динамичке теорије средњег поља. Локалну Гринову функцију, која је централна величина у $DMFT$ приступу, смо рачунали користећи нумерички NCA алгоритам за решавање Андерсоновог проблема. Користећи овај приступ репродуковали смо већину резултата познатих из $DMFT$ теорије за Хабардов модел. Међутим, сусрели смо се и са значајним ограничењима нашег приступа, која су произашла из коришћења NCA алгоритма, који лоше описује физику система на ниским температурама.

У будућем раду користећемо уопштење NCA алгоритма, такозвану $UNCA$ апроксимацију, која знатно боље описује физику Андерсонове нечистоће и самим тим даје знатно боље решење $DMFT$ једначина. Такође, за решење једначина на најнижим температурама, $T \lesssim 0.05$, искористићемо нумерички егзактан Монте Карло алгоритам. Тиме ћемо добити, практично, егзактно решење $DMFT$ једначина у целом опсегу температура. То је од кључног значаја за детаљно испитивање утицаја неуређености на физику у близини Мотовог метал-изолатор прелаза. Могућност премашивања Мот-Јофе-Регел границе за максималну металну отпроност, степен екранирања неуређености на ниским температурама и утицај неуређености на температурну зависност отпора, су само нека од важних отворених питања на која желимо да дамо одговор.

Литература

- [1] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College Publishing (1976).
- [2] Gabriel Kotliar and Dieter Vollhardt, *Electronic Structure of Strongly Correlated Materials: Insights from Dynamical Mean Field Theory*, *Physics Today* **57**, 53 (2004).
- [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] Antoine Georges, *Strongly Correlated Electron Materials: Dynamical Mean-Field Theory and Electronic Structure*, arXiv:cond-mat/0403123.
- [5] K. Haule, S. Kirchner, J. Kroha, and P. Wlfle, *Anderson impurity model at finite Coulomb interaction U : Generalized noncrossing approximation*, *Phys. Rev. B* **64**, 155111 (2001).
- [6] James G. Analytis, Arzhang Ardavan, Stephen J. Blundell, Robin L. Owen, Elspeth F. Garman, Chris Jeynes, and Ben J. Powell, *Effect of Irradiation-Induced Disorder on the Conductivity and Critical Temperature of the Organic Superconductor κ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu(SCN) $_2$* , *Phys. Rev. Lett.* **96**, 177002 (2006).
- [7] D. Tanasković, V. Dobrosavljević, E. Abrahams, and G. Kotliar, *Disorder Screening in Strongly Correlated Systems*, *Phys. Rev. Lett* **91**, 0666031 (2003).
- [8] Krzysztof Byczuk, Walter Hofstetter, and Dieter Vollhardt, *Mott-Hubbard Transition versus Anderson Localization in Correlated Electron Systems with Disorder*, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 056404 (2005).
- [9] S. Park, N. Hur, S. Guha, and S.-W. Cheong, *Percolative Conduction in the Half-Metallic-Ferromagnetic and Ferroelectric Mixture of (La,Lu,Sr)MnO $_3$* , *Phys. Rev. Lett.* **92**, 167206 (2004).
- [10] P. Coleman *Many Body Physics*, Rutgers University, on-line.
- [11] N. E. Hussey, K. Takenaka, H. Takagi, *Universality of the Mott-Ioffe-Regel limit in metals*, *Philosophical Magazine* vol. **84**, 2847 (2004).
- [12] Serge Florens and Antoine Georges, *Quantum impurity solvers using a slave rotor representation*, *Phys. Rev. B* **66**, 165111 (2002).
- [13] Th. Pruschke, D. L. Cox, and M. Jarrell, *Hubbard model at infinite dimensions: Thermodynamic and transport properties*, *Phys. Rev. B* **47**, 3553 (1993).

- [14] Abhay N. Pasupathy, Aakash Pushp, Kenjiro K. Gomes, Colin V. Parker, Jinsheng Wen, Zhijun Xu, Genda Gu, Shimpei Ono, Yoichi Ando, and Ali Yazdani, *Electronic Origin of the Inhomogeneous Pairing Interaction in the High- T_c Superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$* , *Science* **320**, 196 (2008).
- [15] Th. Pruschke and N. Grewe, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **74**, 439 (1989).