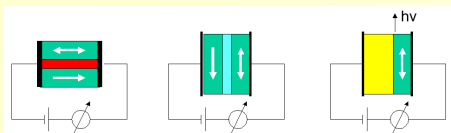


Zielsetzung des Projektes:

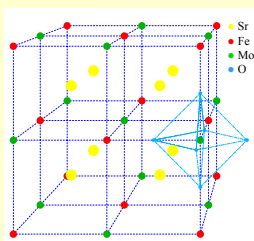
Ziel des Projektes ist die Entwicklung und Anwendung von Algorithmen im Rahmen der Dynamischen Molekularfeldtheorie (DMFT) und ihrer Erweiterungen zur Untersuchung stark korrelierter Elektronensysteme. Schwerpunkt ist die weitere Verbesserung und Verallgemeinerung eines Quanten-Monte-Carlo-Verfahrens (QMC), das mittels analytischer Hochfrequenzentwicklung die Präzision bei gegebenem numerischen Aufwand wesentlich erhöht. Die für den Ein-Band-Fall (im Zusammenhang mit dem bei V_2O_3 beobachteten Mott-Metall-Isolator-Übergang) schon nachgewiesene extreme Genauigkeit soll schrittweise für komplexere Probleme (mehr Bänder, geringere Symmetrie) verifiziert und nutzbar gemacht werden, bis hin zu 3- und 5-Band-Modellen, wie sie für halbmetallische Doppelperskitt relevant sind. Ergänzend soll eine neue Methode, die Selbstenergie-Funktionaltheorie, für die gleichen Modelle erweitert werden, um insbesondere auch Grundzustände untersuchen zu können.

Motivation:

„Spintronics“ - TP 6 „Mikroskopische Theorie der Doppelperskitt: LDA+DMFT mit Auswertung durch QMC“ (Blümer, van Dongen) der DFG-Forscherguppe 559 „Neue Materialien mit hoher Spinpolarisation“ (Mainz-Kaiserslautern, seit 8/2004)



Beispiele für Spintronic-Effekte: Giant magnetoresistance (GMR), tunnel magnetoresistance (TMR) und spin injection



Doppelperskitt Sr_2FeMoO_6

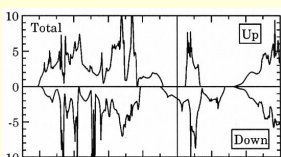
Halbmetallische Doppelperskitt: Sr_2FeMoO_6 , Sr_2FeReO_6

Valenzen: Sr^{2+} [Kr] Fe^{3+} [Ar] $3d^5$
 Mo^{5+} [Kr] $4d^1$ O^{2-} [Ne]

Kubische Symmetrie \rightarrow 3 entartete t_{2g} -Bänder, 2 entartete e_g -Bänder

Halbmetallischer Ferrimagnetismus mit $T_C \approx 400K$

LSDA+U-Bandstruktur von Sr_2FeMoO_6 [Saitoh et al. (2002)]



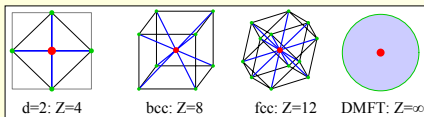
Mikroskopische Theorie: 5-Band-Modell für stark korrelierte Elektronen

$$H = \sum_{i\alpha} \epsilon^i n_{i\alpha}^i + \sum_{i\alpha} \epsilon^m n_{i\alpha}^m + \sum_{i,\alpha\beta\alpha'} U_{\alpha\alpha'}^i n_{i\alpha}^i n_{i\alpha'}^i + \sum_{j,\alpha\beta\alpha'} U_{\alpha\alpha'}^m n_{j\alpha}^m n_{j\alpha'}^m + \sum_{(ij)\alpha} t^{ijm} (f_{i\alpha}^m m_{j\alpha} + hc) + \sum_{(ij)\alpha} t^{mm} m_{j\alpha}^m m_{j\alpha}^m + \sum_{(i'j')\alpha} t^{i'j'} f_{i'\alpha}^i f_{j'\alpha}^i$$

$t^{ijm} \approx 0.25eV > t^{mm} \approx 0.15eV \gg t^{i'j'} \approx 0.03 eV$ [Phillips et al. (2003)]

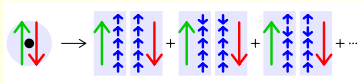
Methodischer Zugang: Dynamische Molekularfeldtheorie (DMFT)

- lokale Selbstenergie $\Sigma(\mathbf{k},\omega) \equiv \Sigma(\omega)$
- Abb. Gitterproblem \rightarrow Störstellenmodell
- nicht-perturbativ: gültig auch an MIÜs
- dynamische lokale Korrelationen erhalten
- im thermodynamischen Limes
- exakt für Koordinationszahl $Z \rightarrow \infty$



Lösung des Störstellenmodells durch Quanten-Monte-Carlo-Simulationen (QMC)

- Behandlung in imaginärer Zeit τ (\sim inv. Temperatur β)
- Diskretisierung $\Delta\tau = \beta/\Lambda$, Trotter-Entkopplung
- diskrete Hubbard-Stratonovich-Transformation
- nicht-perturbativ, numerisch exakt, Aufwand $\sim T^{-3}$

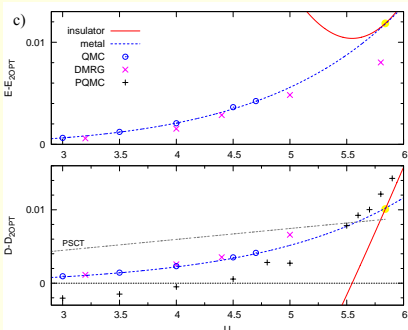
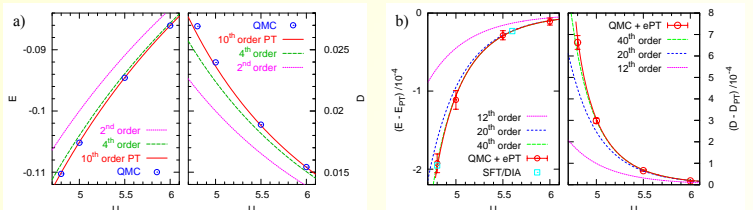


Problem: QMC liefert wegen Diskretisierung keine Information für $\omega > \omega_{Nyquist}$ \rightarrow naive Fourier-Transformation führt zu nicht-kausaler Green-Funktion und Selbstenergie; Trick/Spline-Verfahren bisher schlechte Konvergenz

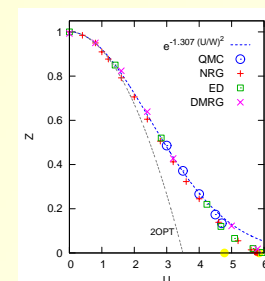
Lösung: Kombination von QMC mit analytischer Hochfrequenz-Entwicklung

Ergebnisse:

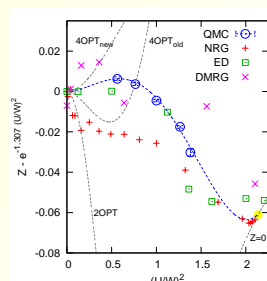
1. Anwendung: Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang im frustrierten 1-Band-Modell (für V_2O_3)



- Energie E und Doppelbesetzung D im Isolator: QMC vs. Starkkopplungs-Störungstheorie (PT)
- Höhere Auflösung durch Differenzbildung zu PT: QMC stimmt exzellent mit extrapolierte Störungstheorie unendlicher Ordnung (ePT) überein und übertrifft selbst 40. Ordnung PT; nur Selbstenergiefunktionaltheorie (SFT/DIA) ist konkurrenzfähig
- Energie und Doppelbesetzung der metallischen Phase (Differenz zu Störungstheorie): Trotz expliziter Extrapolation der Temperatur $T \rightarrow 0$ ist QMC wesentlich genauer als die Grundzustandsmethoden PSCT, DMRG und PQMC (und thermodynamisch konsistent)



Quasiteilchengewicht Z für metallische Phase bei $T=0$: Präzision von QMC übertrifft (nach Extrapolationen) bei weitem die aller bekanntesten Grundzustandsmethoden wie NRG, ED und DMRG und erlaubt Bestätigung neuerer Schwachkopplungs-Störungstheorie 4. Ordnung ($4OPT_{new}$)



2. Anwendung: anisotropes 2-Band-Modell ohne Spin-Flip-Terme – orbital-selective Mott transition (OSMT)?

Fundamentale Fragestellung: unter welchen Umständen treten in Modellen mit 2 entarteten Orbitalen unterschiedlicher Bandbreite als Funktion der Wechselwirkung ein oder zwei Metall-Isolator-Übergänge (gemeinsam für beide Orbitale oder orbital-selektiv) auf? Mögliche experimentelle Realisierung: $Ca_{2-x}Sr_xRuO_4$, $La_{n+1}Ni_nO_{3n+1}$.

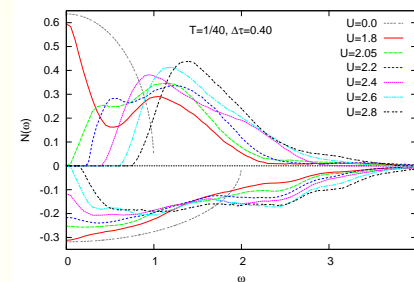
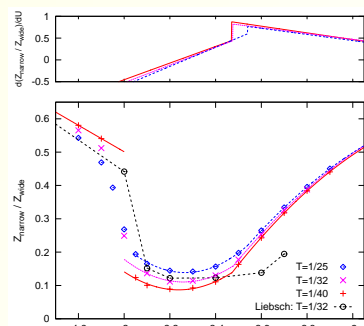
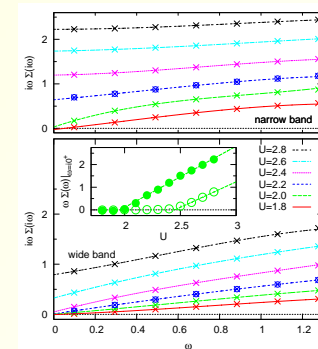
Derzeit intensive theoretische Studien vieler Gruppen (Deutschland, USA, Japan, Italien, Frankreich) im Rahmen der DMFT; bisherige Behauptung (Liebsch, 2004): kein OSMT in QMC oder iterierter Störungstheorie (IPT) bei Ising-artiger Hundscher Kopplung (ohne Spin-Flip-Terme).

Unsere QMC-Rechnungen (für $J=U/4, V=U/2$) zeigen, dass am 1. Mott-Übergang bei $U \approx 2.0$ nur das schmalere Band isolierend wird (siehe z.B. Spektren unten rechts)

Der 2. Übergang bei $U \approx 2.5$ ist mit dem konventionellen Kriterium der „Quasiteilchengewichte“ Z (Abb. rechts) gerade nachweisbar (Knicke in Fit-Kurven)

Mit der Analyse der möglichen Singularität der Selbstenergie bei $\omega=0$ (Abb. unten) werden beide Übergänge gleich deutlich sichtbar.

Fazit: OSMT-Szenario auch ohne Spin-Flip-Terme!



Perspektiven:

- Verallgemeinerung des QMC-Algorithmus mit Hochfrequenzentwicklung auf beliebige Bandfüllung; Verifikation
- QMC-Rechnungen für 3-Band-Doppelperskitt-Modelle (t_{2g} -Elektronen plus effektive Fe- e_g -Spins)
- dabei Wechselwirkungen zunächst nur auf Fe-Plätzen, später auch auf Mo/Re-Orbitalen
- zunächst wenige Hüpf-/Wechselwirkungsparameter
- später LDA+DMFT-Rechnungen mit Input der Gruppen Felser / Schönhense
- mittelfristig: 5-Band-Rechnungen, Berücksichtigung von Unordnung, etc.
- Implementierung von Spin-Flip-Termen der Hundschen Kopplung
- Alternativer Zugang: Verallgemeinerung / Implementation von Selbstenergie-Funktionaltheorie für Mehrband-Modelle; Rechnungen für Doppelperskittmodelle vor allem im Grundzustand und mit Spin-Flips

Stellung/ Kooperation im MWFZ:

- Umfassende Zusammenarbeiten im Rahmen der DFG-Forscherguppe 559 vor allem mit
 - TP 7 (Schönhense/Felser): Bandstrukturrechnungen, Theorie
 - TP 4 (Tremel): Doppelperskitt-Physik
 - TP 5 (Elmers): Magnetisierung
 - TP 10 (Aeschlimann/Bauer): Elektronenspektroskopie

Gemeinsames Theorie-Seminar zur Forscherguppe (Blümer/Fecher)