

Quanten-Monte-Carlo-Untersuchungen stark korrelierter Elektronensysteme

N. Blümer

KOMET337 (AG Prof. van Dongen)

Inhalt

Durch Korrelationen zum Metall-Isolator-Übergang

Dynamische Molekularfeld-Theorie (DMFT)

Monte-Carlo Methode

Hirsch-Fye-QMC-Algorithmus für DMFT-Störstellenproblem

Metall-Isolator-Übergang im Hubbard-Modell

Zusammenfassung / Ausblick

Durch Korrelationen zum Metall-Isolator-Übergang

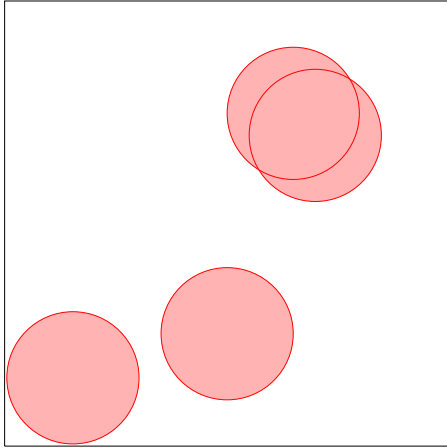
1. Klassischer Fall im Kontinuum

Freie nicht-ww Teilchen
sphärisch in $2-d$ Box

Freie Teilchen mit
Hard-Core-WW

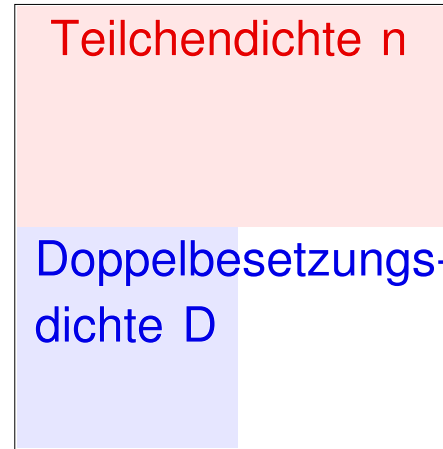
Durch Korrelationen zum Metall-Isolator-Übergang

1. Klassischer Fall im Kontinuum



Freie nicht-ww Teilchen
sphärisch in 2- d Box

Doppelbesetzungsdichte

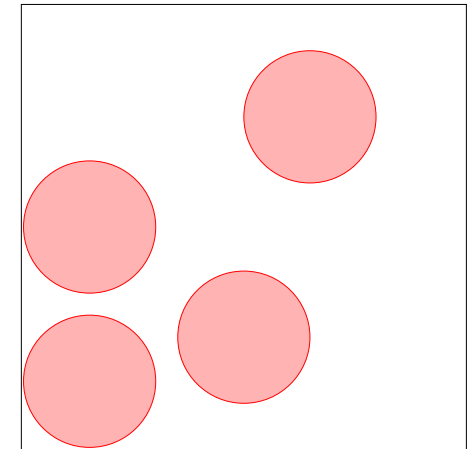


$$D = n^2$$

unkorreliert

$$D = 0$$

stark korr.



Freie Teilchen mit
Hard-Core-WW

2. Elektronen im Festkörper: Quanten-Gittermodelle, z.B. 1-Band Hubbard-Modell

Pauli-Prinzip: max 1 e^- pro Platz/Spinrichtung

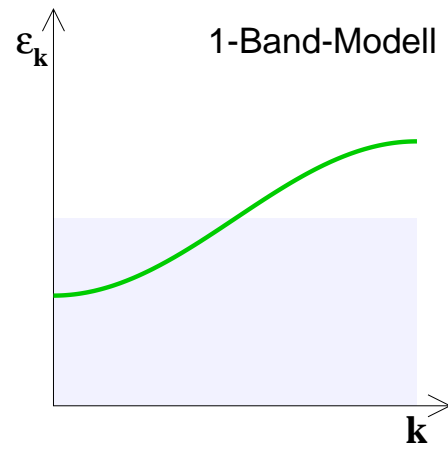
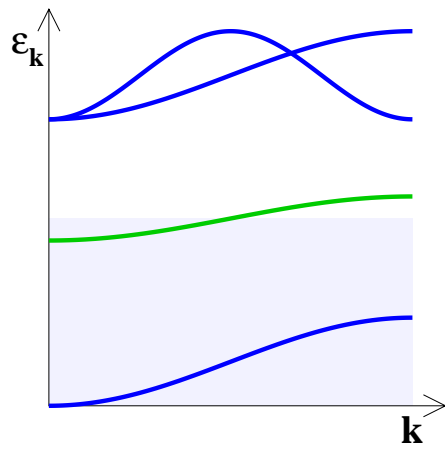
$$\text{Energie } E = E_{\text{kin}} + UD$$

nicht-ww Fall: $D = \langle \hat{n}_{\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{\downarrow} \rangle$, perfektes Metall

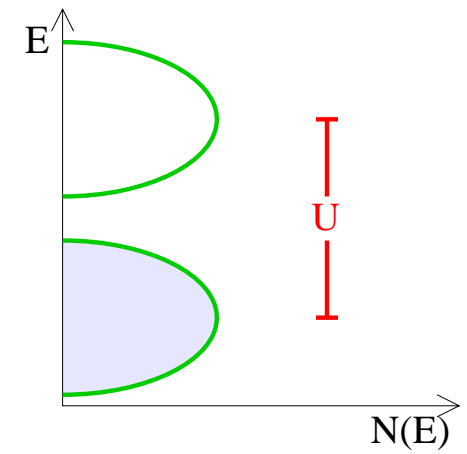
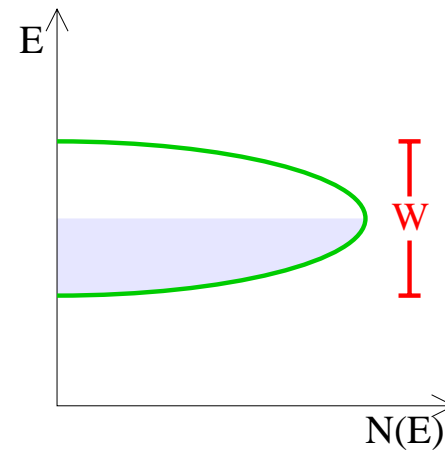
bei halber Füllung: $D \xrightarrow{U \rightarrow \infty} 0$, Isolator

Hier: repräsentative snapshots in imaginärer Zeit - keine echte Dynamik

Gitter spaltet Dispersion in Bloch-Bänder auf,

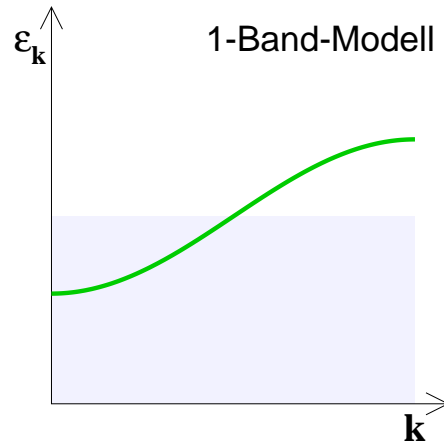
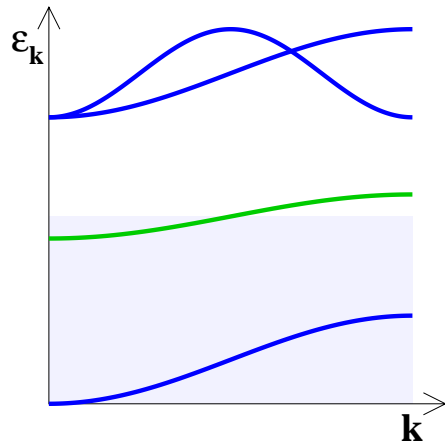


Modifikation durch Wechselwirkung

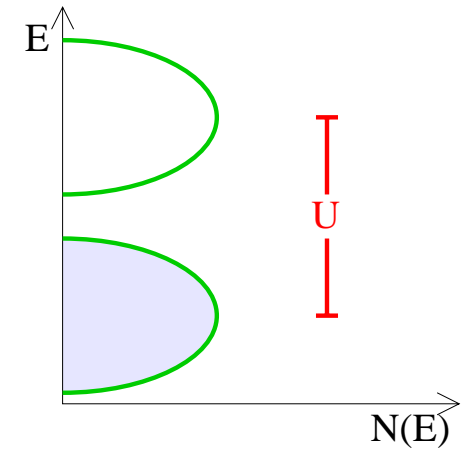
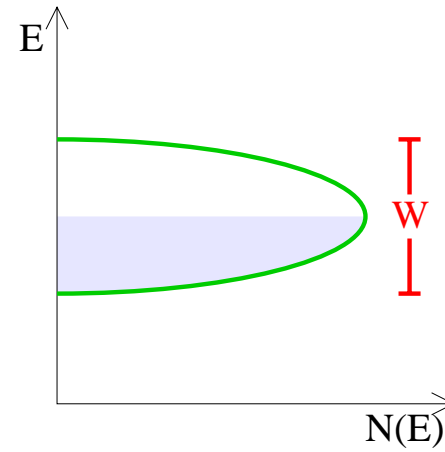


\Rightarrow : korrelationsinduzierter Metall-Isolator-Übergang oder Crossover bei $n = 1$ als Funktion von U .

Gitter spaltet Dispersion in Bloch-Bänder auf,



Modifikation durch Wechselwirkung

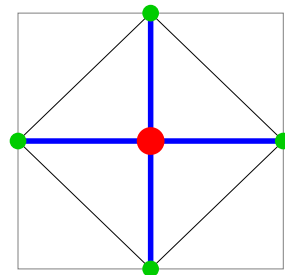


\Rightarrow : korrelationsinduzierter Metall-Isolator-Übergang oder Crossover bei $n = 1$ als Funktion von U .

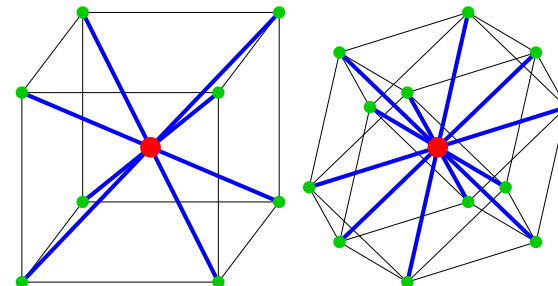
Dynamische Molekularfeld-Theorie (DMFT):

Abbildung des Gitterproblems auf Anderson-Störstellen-Modell + Selbstkonsistenz-Bedingung

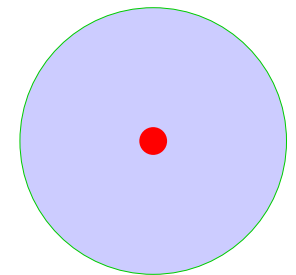
- exakt für $Z \rightarrow \infty$
- dynamische on-site Korrelationen erhalten
- nicht-perturbativ
 \rightsquigarrow gültig auch am MIÜ



$d=2: Z = 4$



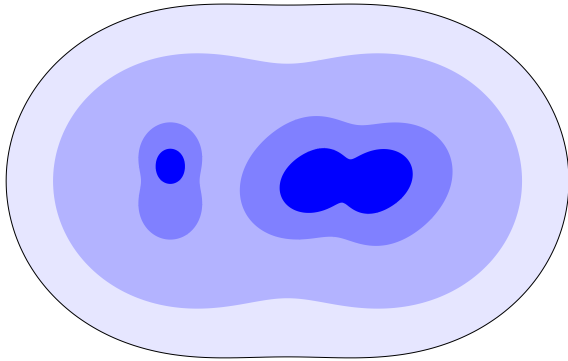
bcc: $Z = 8$ fcc: $Z = 12$



DMFT: $Z = \infty$

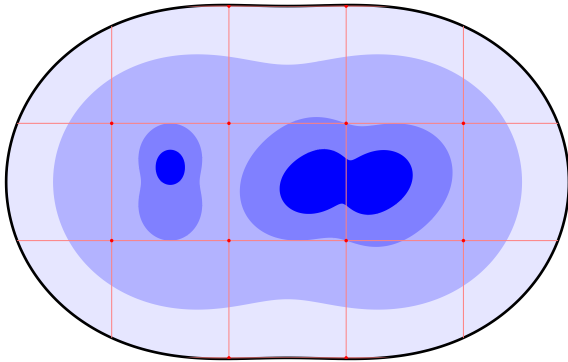
Monte-Carlo Methode

Beispiel: Berechnung der mittleren Wassertiefe \bar{h} eines Sees aus Tiefenverteilung $h(x_1, x_2)$



Monte-Carlo Methode

Beispiel: Berechnung der mittleren Wassertiefe \bar{h} eines Sees aus Tiefenverteilung $h(x_1, x_2)$



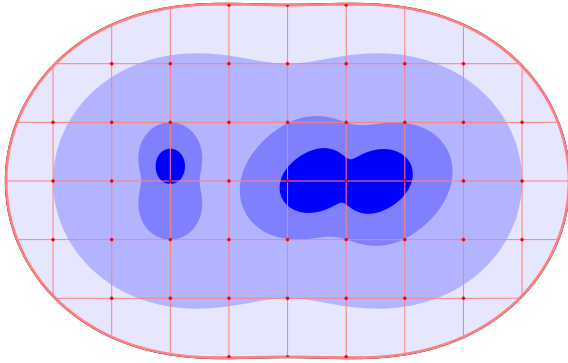
Deterministisch: Gitter + Trapezregel

$N = V/(\Delta x)^d$ Stützstellen

$$\Delta h \propto (\Delta x)^2 \propto N^{-2/d}$$

Monte-Carlo Methode

Beispiel: Berechnung der mittleren Wassertiefe \bar{h} eines Sees aus Tiefenverteilung $h(x_1, x_2)$



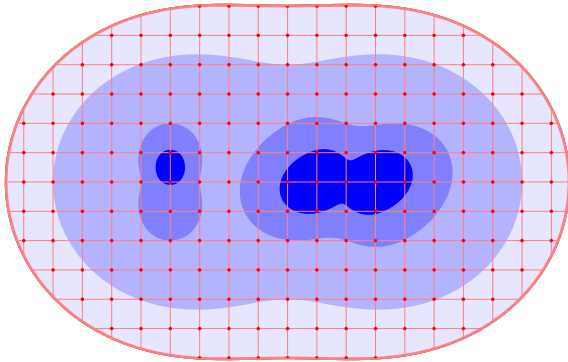
Deterministisch: Gitter + Trapezregel

$N = V/(\Delta x)^d$ Stützstellen

$$\Delta h \propto (\Delta x)^2 \propto N^{-2/d}$$

Monte-Carlo Methode

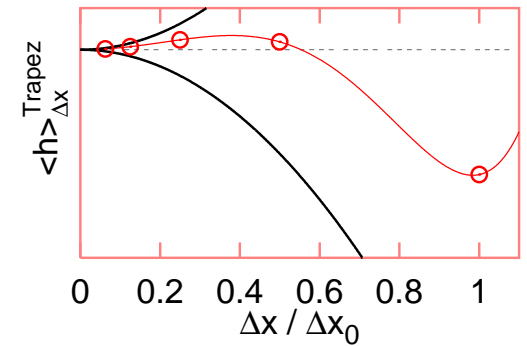
Beispiel: Berechnung der mittleren Wassertiefe \bar{h} eines Sees aus Tiefenverteilung $h(x_1, x_2)$



Deterministisch: Gitter + Trapezregel

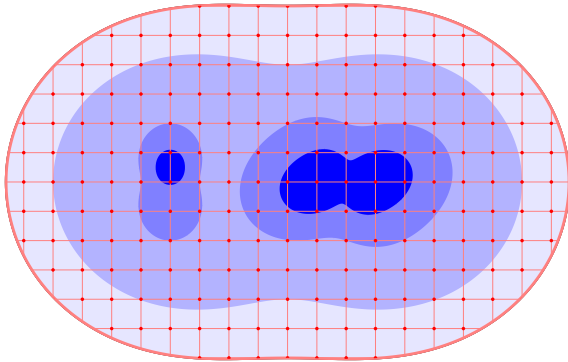
$N = V/(\Delta x)^d$ Stützstellen

$$\Delta h \propto (\Delta x)^2 \propto N^{-2/d}$$



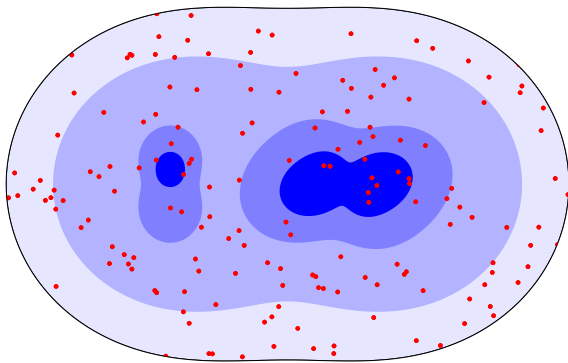
Monte-Carlo Methode

Beispiel: Berechnung der mittleren Wassertiefe \bar{h} eines Sees aus Tiefenverteilung $h(x_1, x_2)$



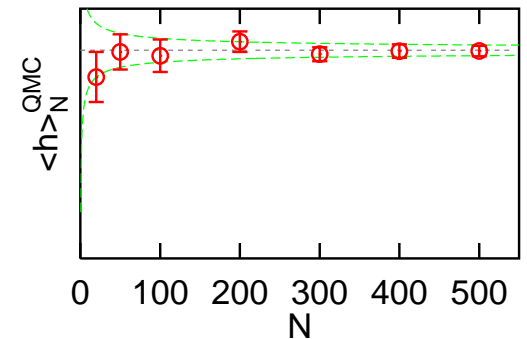
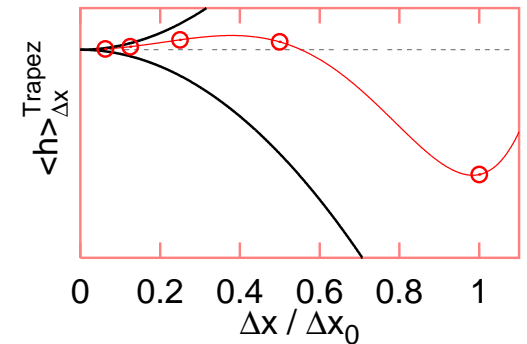
Deterministisch: **Gitter + Trapezregel**
 $N = V/(\Delta x)^d$ Stützstellen

$$\Delta h \propto (\Delta x)^2 \propto N^{-2/d}$$



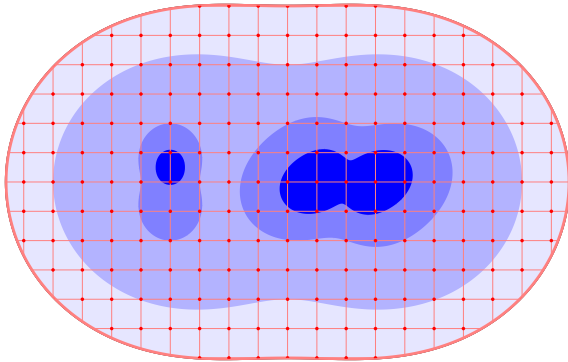
Stochastisch: **Simple Monte-Carlo**
 N "Konfigurationen", gleichverteilt

$$\Delta h \lesssim \sqrt{\frac{\text{var}\{h\}}{N}} \propto N^{-1/2}$$



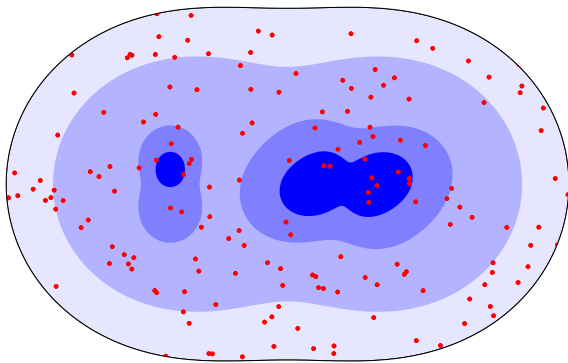
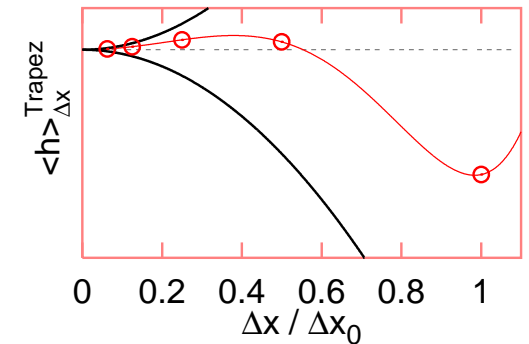
Monte-Carlo Methode

Beispiel: Berechnung der mittleren Wassertiefe \bar{h} eines Sees aus Tiefenverteilung $h(x_1, x_2)$



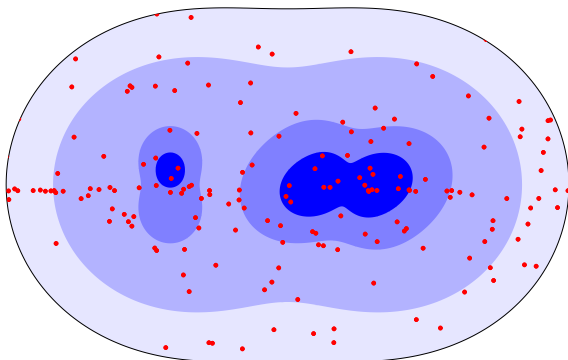
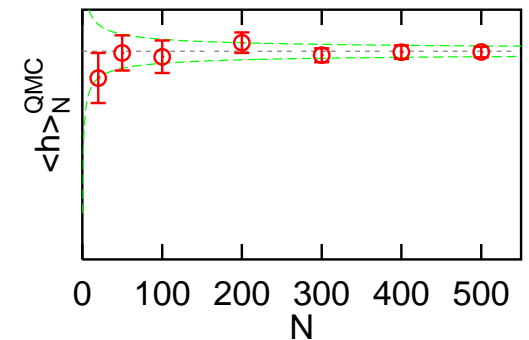
Deterministisch: **Gitter + Trapezregel**
 $N = V/(\Delta x)^d$ Stützstellen

$$\Delta h \propto (\Delta x)^2 \propto N^{-2/d}$$



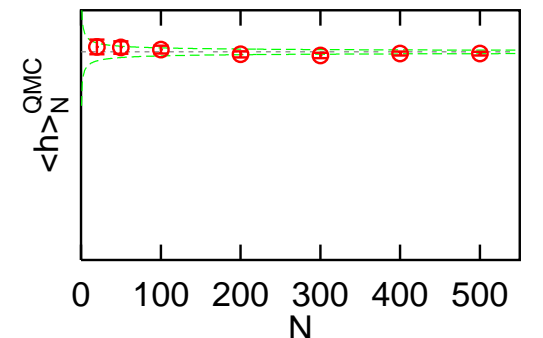
Stochastisch: **Simple Monte-Carlo**
 N "Konfigurationen", gleichverteilt

$$\Delta h \lesssim \sqrt{\frac{\text{var}\{h\}}{N}} \propto N^{-1/2}$$



Stochastisch: **Importance Sampling MC**
 Aufspaltung: $h(\vec{x}) = p(\vec{x}) o(\vec{x})$;
 $p(\vec{x})$ normiert, $\text{var}\{o\} \ll \text{var}\{h\}$

$$\Delta h \lesssim \sqrt{\frac{\text{var}\{o\}}{N_{\text{eff}}}} \propto N^{-1/2}$$



Anwendung von Monte-Carlo in Statistischer Physik

$$\langle O \rangle = \sum_i p_i O_i, \quad p_i = \frac{e^{-E_i/(k_B T)}}{\mathcal{Z}}, \quad \mathcal{Z} = \sum_i e^{-E_i/(k_B T)}$$

Simple Monte Carlo: Abschätzung beider Summen anhand einer Anzahl N (gleichwahrscheinlicher) Konfigurationen. **Problem:** typischerweise $\sqrt{\text{var}\{x\}} \gg \bar{x}$.

Importance Sampling MC: W -verteilung gegeben durch Boltzmann-Gewichte p_i .

Problem: Normierung $1/\mathcal{Z}$ unbekannt.

Lösung: erzeuge W -verteilung durch *Random Walk*, z.B. mit **Metropolis-Algorithmus:**

$$P\{i \rightarrow j\} = s_{i,j} \min\{p_j/p_i, 1\}, \quad p_j/p_i = e^{(E_j - E_i)/(k_B T)}, \quad s_{i,j} = s_{j,i}$$

Vorschlagswahrscheinlichkeiten $s_{i,j} \sim$ Ergodizität

+ Genaue Bestimmung von Observablen-Mittelwerten $\langle O \rangle$

– Prinzipiell unbestimmt: Zustandssumme \mathcal{Z} , Freie Energie F

Hirsch-Fye-QMC-Algorithmus für DMFT-Störstellenproblem

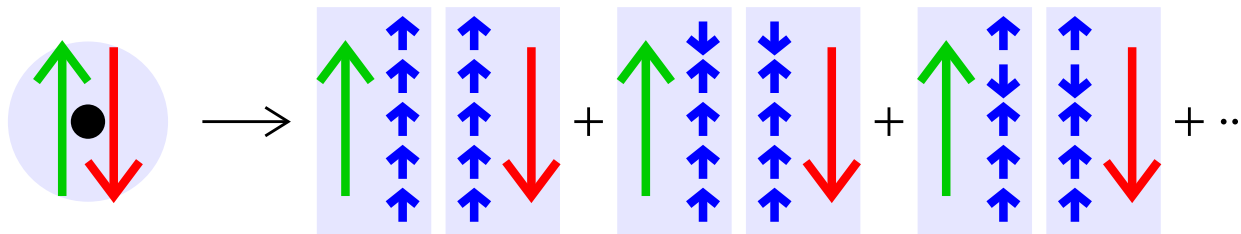
Gesucht: Green-Funktion $G(\omega)$ (\rightsquigarrow Zustandsdichte $N(\omega)$)

Behandlung in imaginärer Zeit mit Hilfe von fermionischen Graßmann-Variablen ψ, ψ^* :

$$G_\sigma(\tau_2 - \tau_1) \equiv G_\sigma(\tau_1, \tau_2) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}[\psi^*] \psi_\sigma(\tau_1) \psi_\sigma^*(\tau_2) e^{\mathcal{A}},$$

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_0 - \frac{U}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int_0^\beta d\tau \psi_\sigma^*(\tau) \psi_\sigma(\tau) \psi_{\sigma'}^*(\tau) \psi_{\sigma'}(\tau)$$

Diskretisierung $\beta = \Lambda \Delta\tau$, diskrete Hubbard-Stratonovich-Transformation



Wick-Theorem:

$$G = \frac{\sum M \det\{M\}}{\sum \det\{M\}}$$

Metropolis MC Importance Sampling über Ising-Hilfsfeld, 2^Λ Konfigurationen, $50 \lesssim \Lambda \lesssim 400$

+ nicht-perturbativ, numerisch exakt

– Aufwand skaliert wie T^{-3}

Hirsch-Fye-QMC-Algorithmus für DMFT-Störstellenproblem

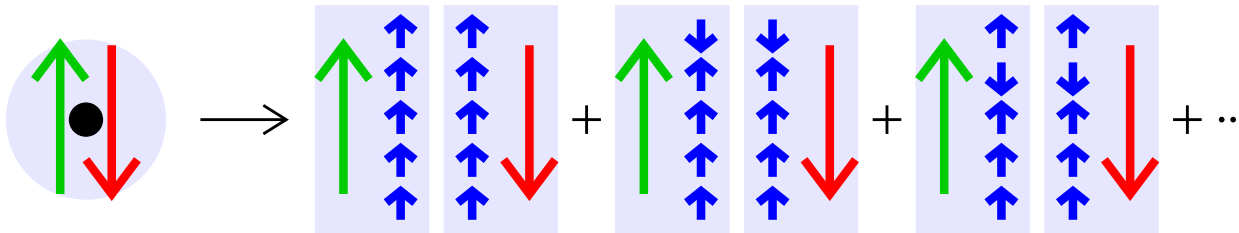
Gesucht: Green-Funktion $G(\omega)$ (\rightsquigarrow Zustandsdichte $N(\omega)$)

Behandlung in imaginärer Zeit mit Hilfe von fermionischen Graßmann-Variablen ψ, ψ^* :

$$G_\sigma(\tau_2 - \tau_1) \equiv G_\sigma(\tau_1, \tau_2) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}[\psi^*] \psi_\sigma(\tau_1) \psi_\sigma^*(\tau_2) e^{\mathcal{A}},$$

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_0 - \frac{U}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int_0^\beta d\tau \psi_\sigma^*(\tau) \psi_\sigma(\tau) \psi_{\sigma'}^*(\tau) \psi_{\sigma'}(\tau)$$

Diskretisierung $\beta = \Lambda \Delta\tau$, diskrete Hubbard-Stratonovich-Transformation

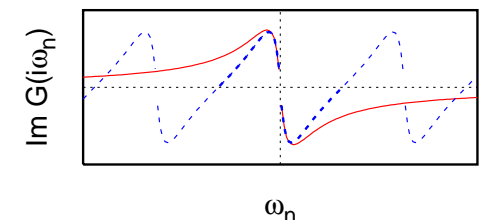
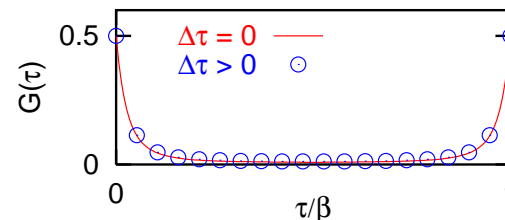


Wick-Theorem:

$$G = \frac{\sum M \det\{M\}}{\sum \det\{M\}}$$

Metropolis MC Importance Sampling über Ising-Hilfsfeld, 2^Λ Konfigurationen, $50 \lesssim \Lambda \lesssim 400$

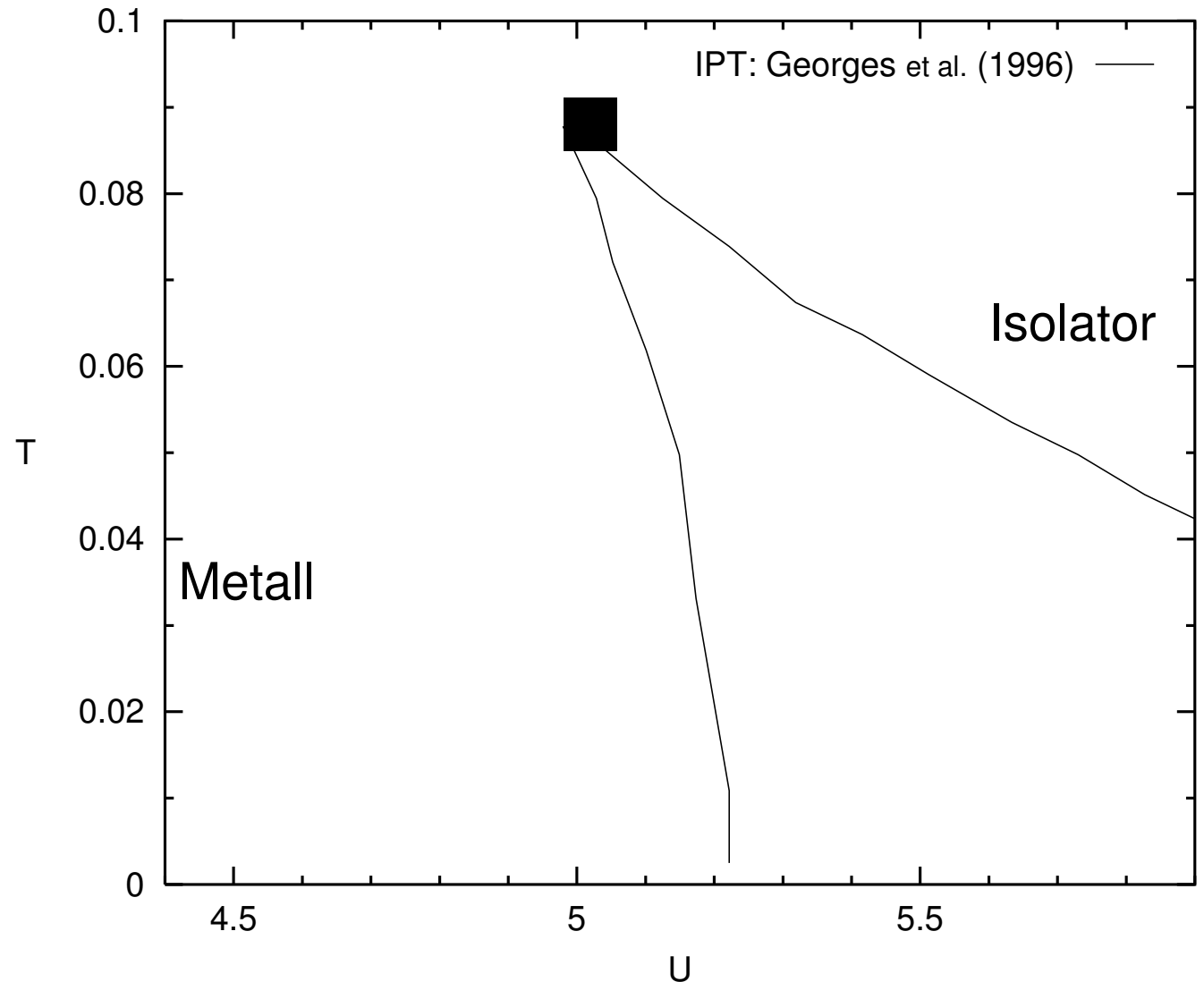
- + nicht-perturbativ, numerisch exakt
- Aufwand skaliert wie T^{-3}
- keine Information für $\omega \gtrsim \omega_{\text{Nyquist}}$:



Metall-Isolator-Übergang im Hubbard-Modell

Ergebnisse für frustriertes Hubbard-Modell mit halb elliptischer DOS bei halber Füllung ($n = 1$)

1. Frage: scharfer MIÜ?
Wo? Welche Ordnung?



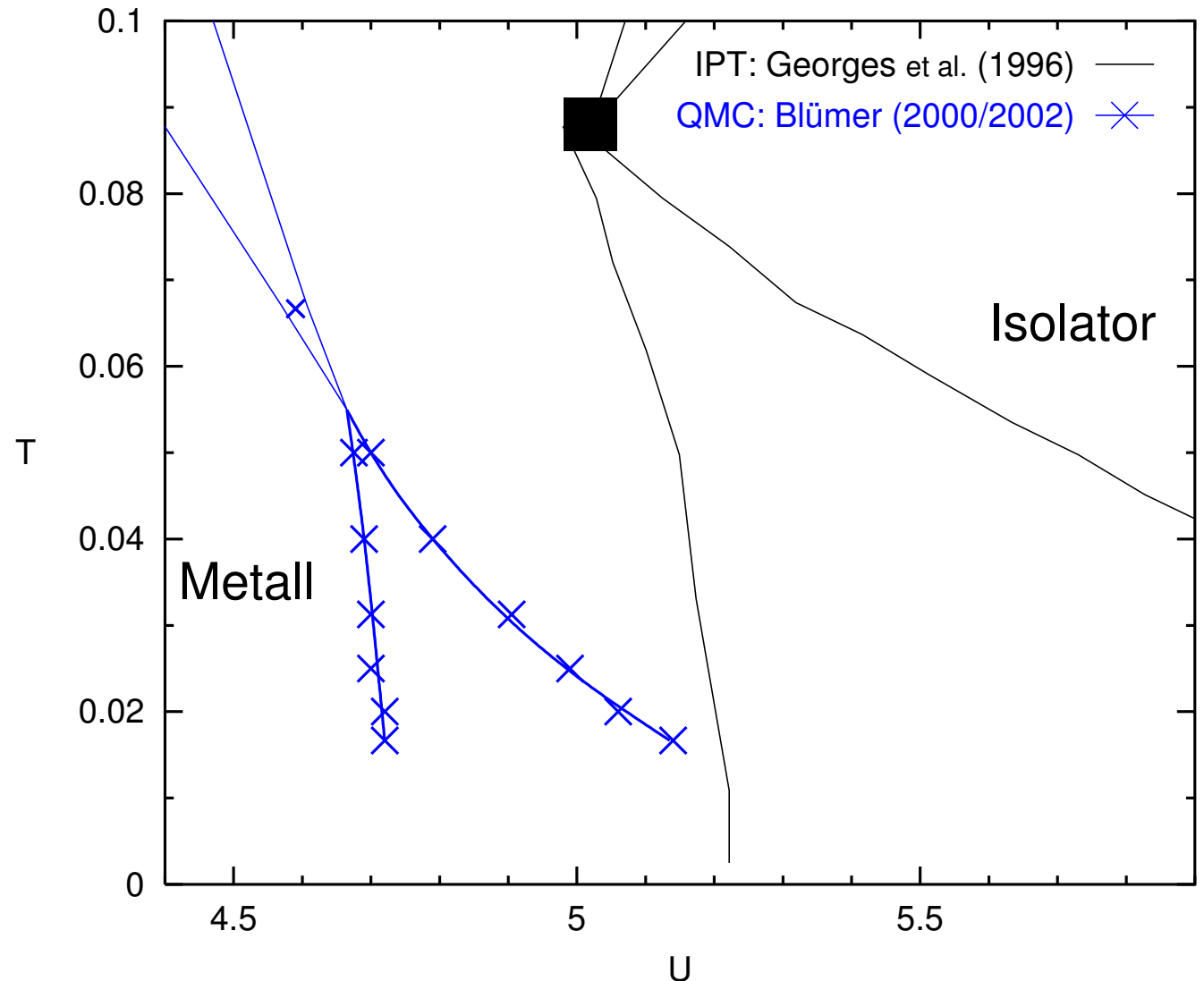
Metall-Isolator-Übergang im Hubbard-Modell

Ergebnisse für frustriertes Hubbard-Modell mit halb-elliptischer DOS bei halber Füllung ($n = 1$)

1. Frage: scharfer MIÜ?
Wo? Welche Ordnung?

- verbesserter QMC-Algorithmus
- geeignete Observable (Energie)
- sehr viel Rechenzeit

Koexistenz \rightsquigarrow 1. Ordnung



Metall-Isolator-Übergang im Hubbard-Modell

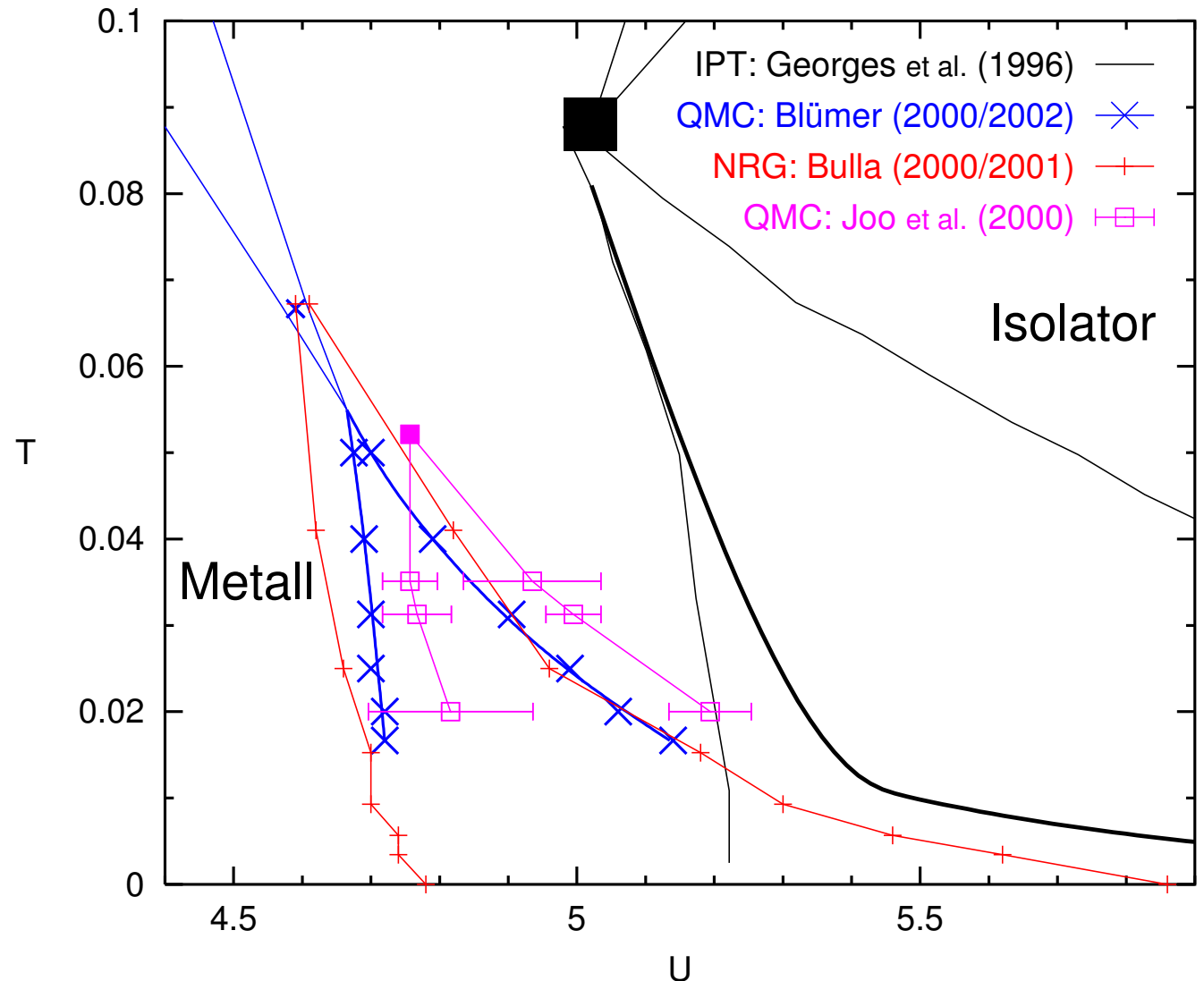
Ergebnisse für frustriertes Hubbard-Modell mit halbelliptischer DOS bei halber Füllung ($n = 1$)

1. Frage: scharfer MIÜ?
Wo? Welche Ordnung?

- verbesserter QMC-Algorithmus
- geeignete Observable (Energie)
- sehr viel Rechenzeit

Koexistenz \rightsquigarrow 1. Ordnung

2. Frage: genaue Position der MIÜ-Linie $U_c(T)$?



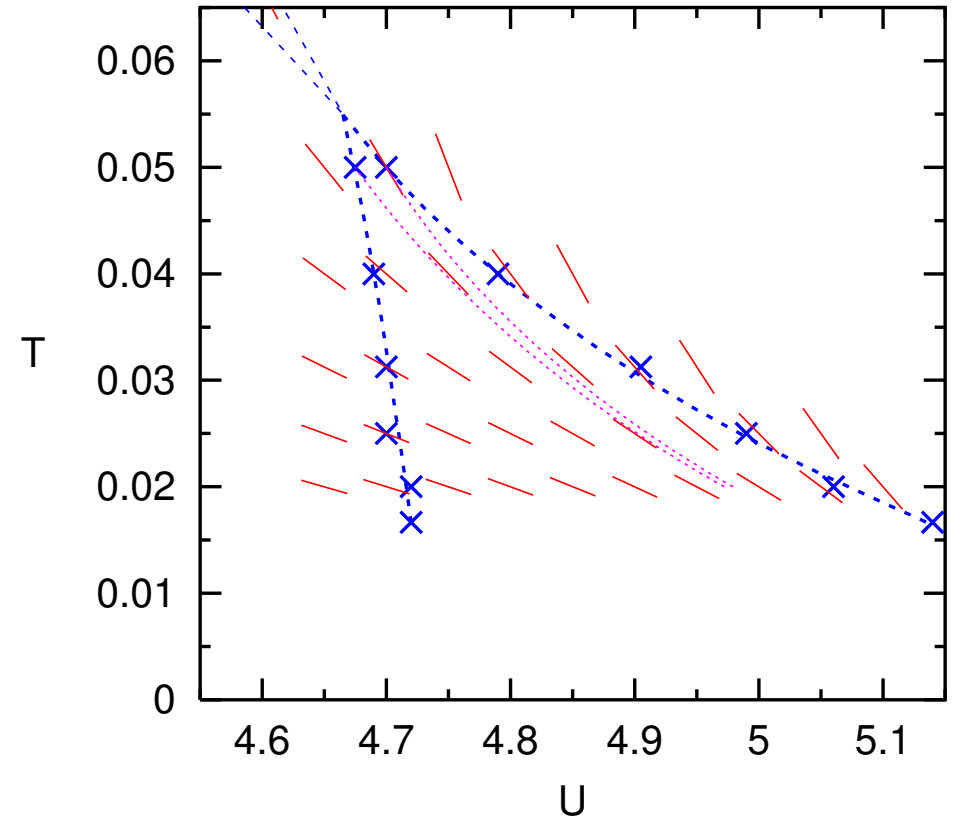
Clausius-Clapeyron-Gleichung:

$$\frac{dU_c(T)}{dT} = f(T, U_c(T))$$

mit $f(T, U) \equiv \frac{\Delta E(T, U)}{T \Delta D(T, U)}$

neues Extrapolations-Schema für D

↔ $U_c(T)$ für $T \geq 0.02$



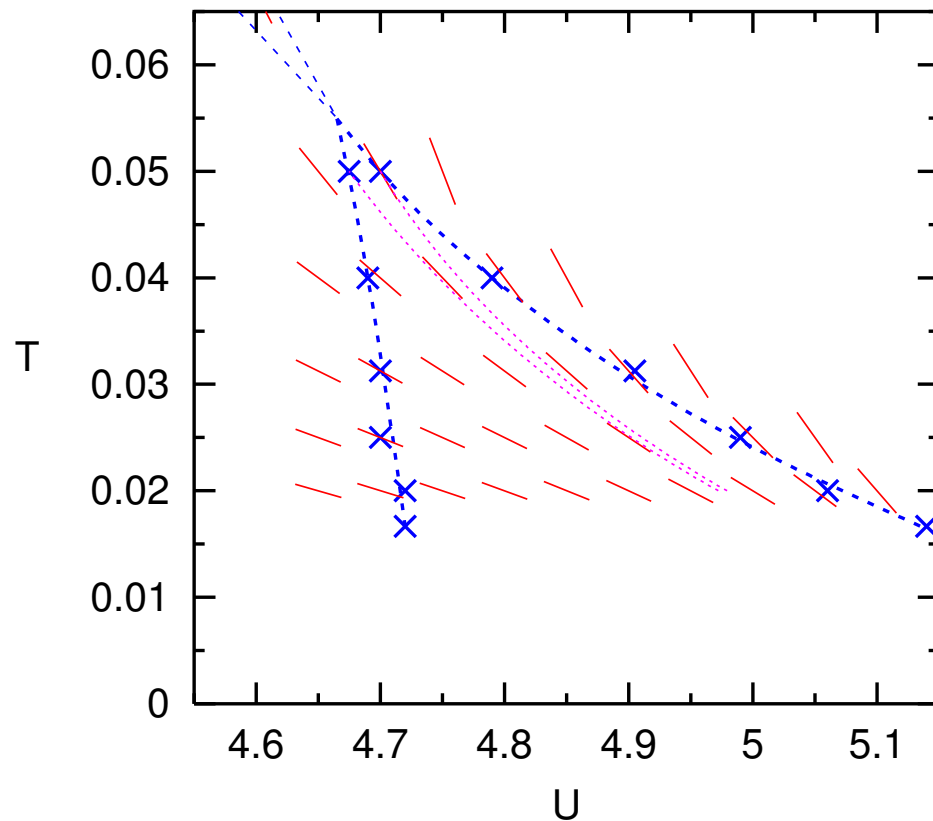
Clausius-Clapeyron-Gleichung:

$$\frac{dU_c(T)}{dT} = f(T, U_c(T))$$

$$\text{mit } f(T, U) \equiv \frac{\Delta E(T, U)}{T \Delta D(T, U)}$$

neues Extrapolations-Schema für D

↔ $U_c(T)$ für $T \geq 0.02$

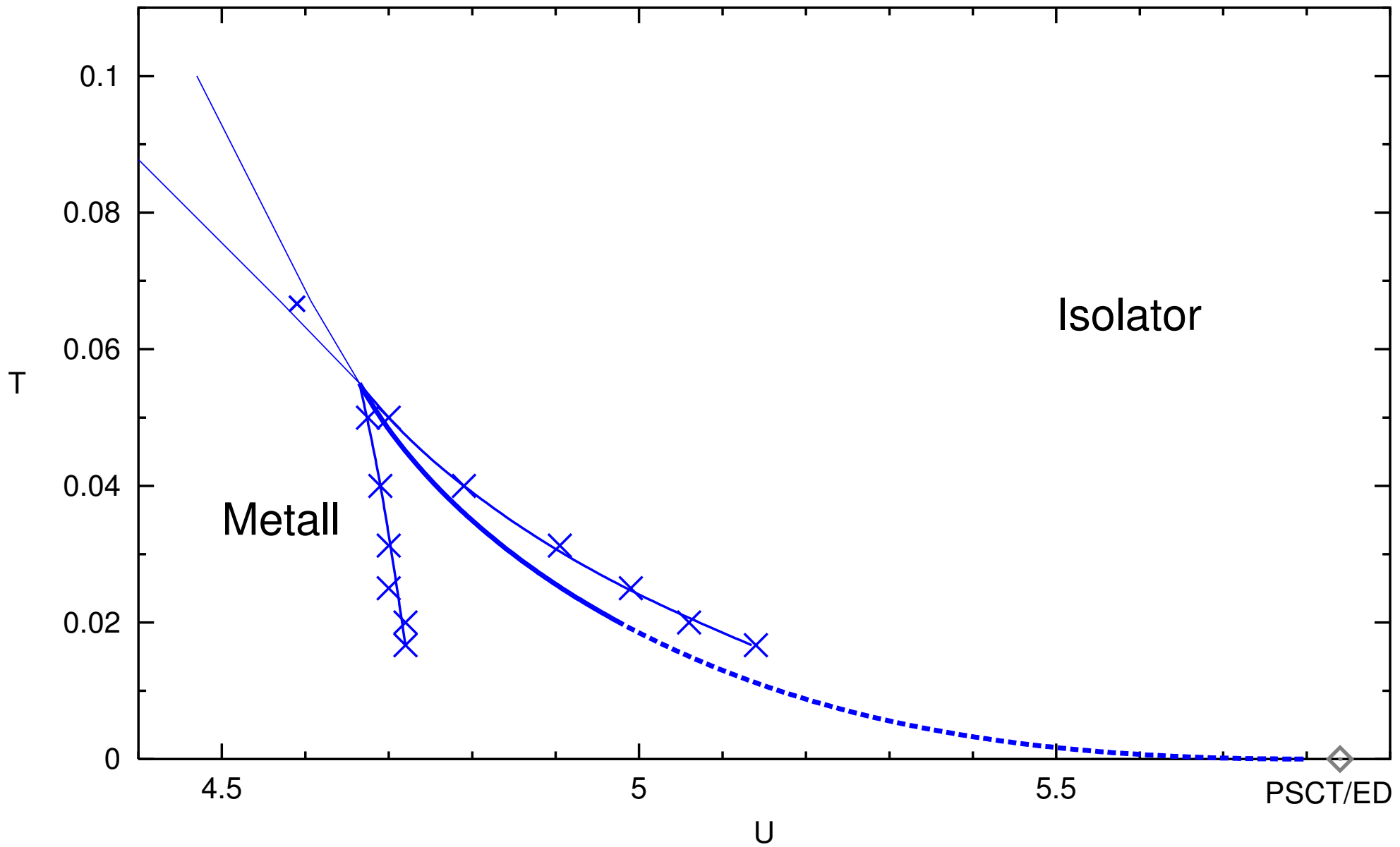


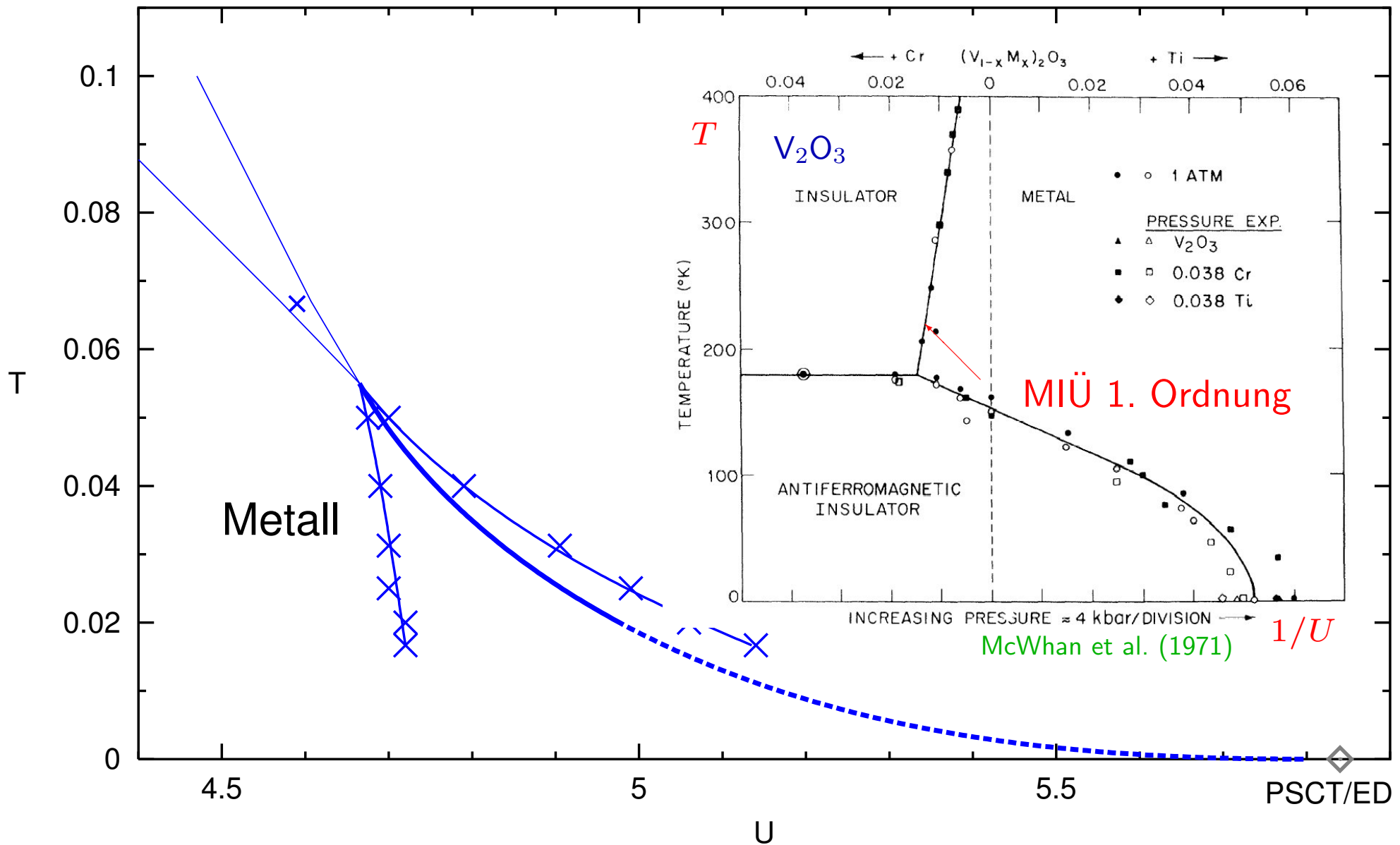
Fermiflüssigkeits-, Grundzustands-Eigenschaften:

$$U_c(T) = U_c^0 - \sqrt{\frac{2S_0T}{a}} + \mathcal{O}(T)$$

Fit an: Störungstheorie 2. Ordnung und extrapolierte QMC-Daten ↔ Parameter a

↔ $U_c(T)$ für alle T





Essenz des Mott Metall-Isolator-Übergangs 1. Ordnung erfasst

Bei partieller Frustration: verbleibende AF-Phasen für $T \rightarrow 0$

Zusammenfassung / Ausblick

Grundlagen: Korrelationen, DMFT, Monte-Carlo-Methode, Hirsch-Fye-QMC-Algorithmus

Anwendung: Metall-Isolator-Übergang im frustrierten 1-Band Hubbard-Modell

Nicht gezeigt: Modellierung magnetischer Phasen (Meta-Magnetismus, Ferromagnetismus)
Berechnung von dynamischen Größen mit MEM (Spektren, Optische Leitfähigkeit)
QMC-Algorithmus mit analytischer Hochfrequenz-Entwicklung (Poster: C. Knecht)
Realistische Mehrband-Rechnungen: LDA+DMFT (\rightsquigarrow Forschergruppe)

Weitere Arbeitsgebiete der Gruppe van Dongen:

Dichte-Matrix-Renormierungsgruppe (DMRG) für niederdimensionale Systeme (E. Jeckelmann)

Störungstheorie bei großer und kleiner Kopplung, QMC (C. Knecht)

Magnetische Eigenschaften von aromatischen Verbindungen (M. Himmerich)

Domänengrenzen von niederdimensionalen Magneten (M. Lippert)