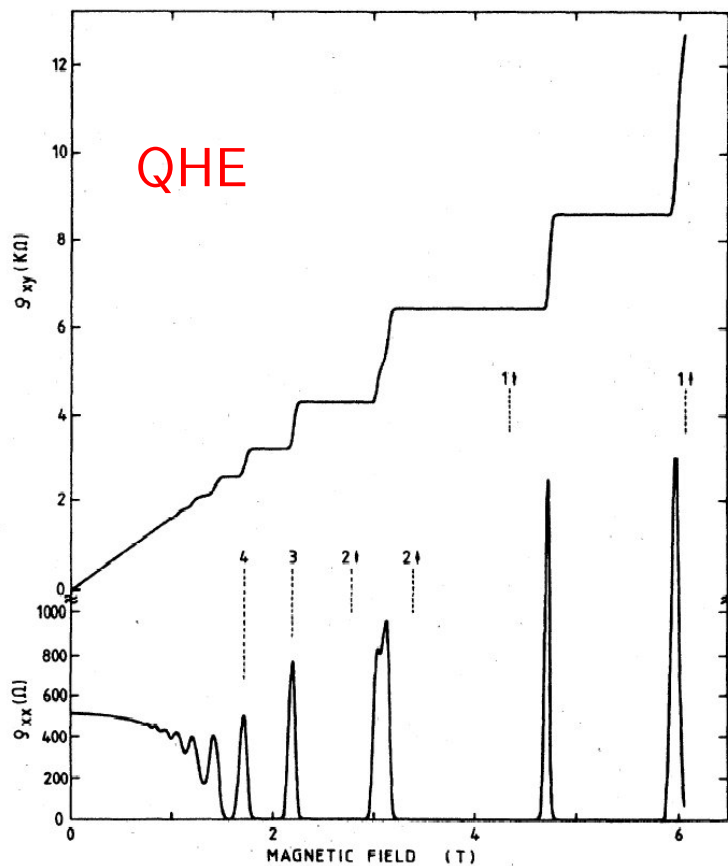


Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang und optische Leitfähigkeit in hohen Dimensionen

Nils Blümer

Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang und optische Leitfähigkeit in hohen Dimensionen

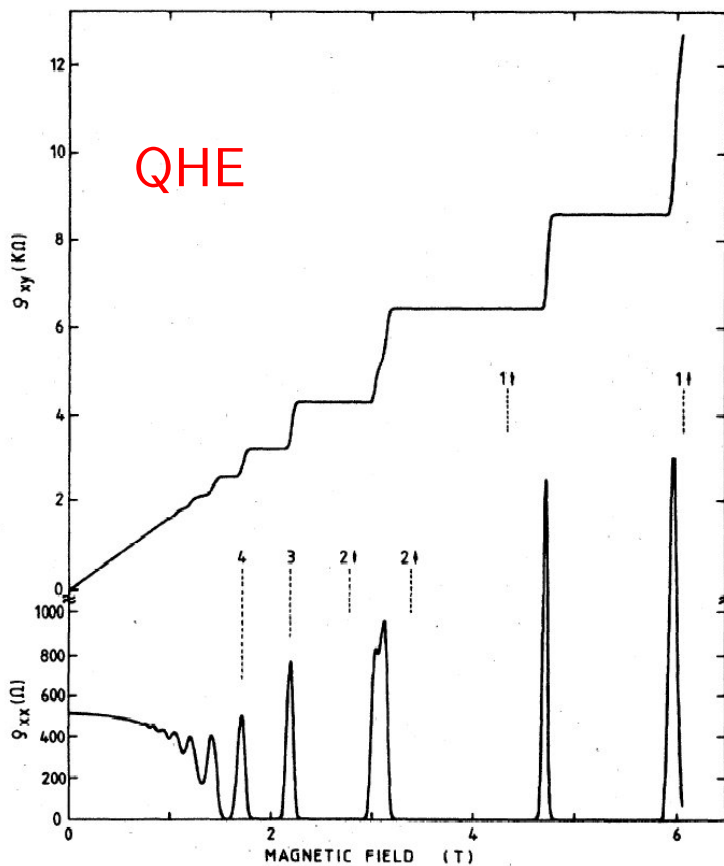
Nils Blümer



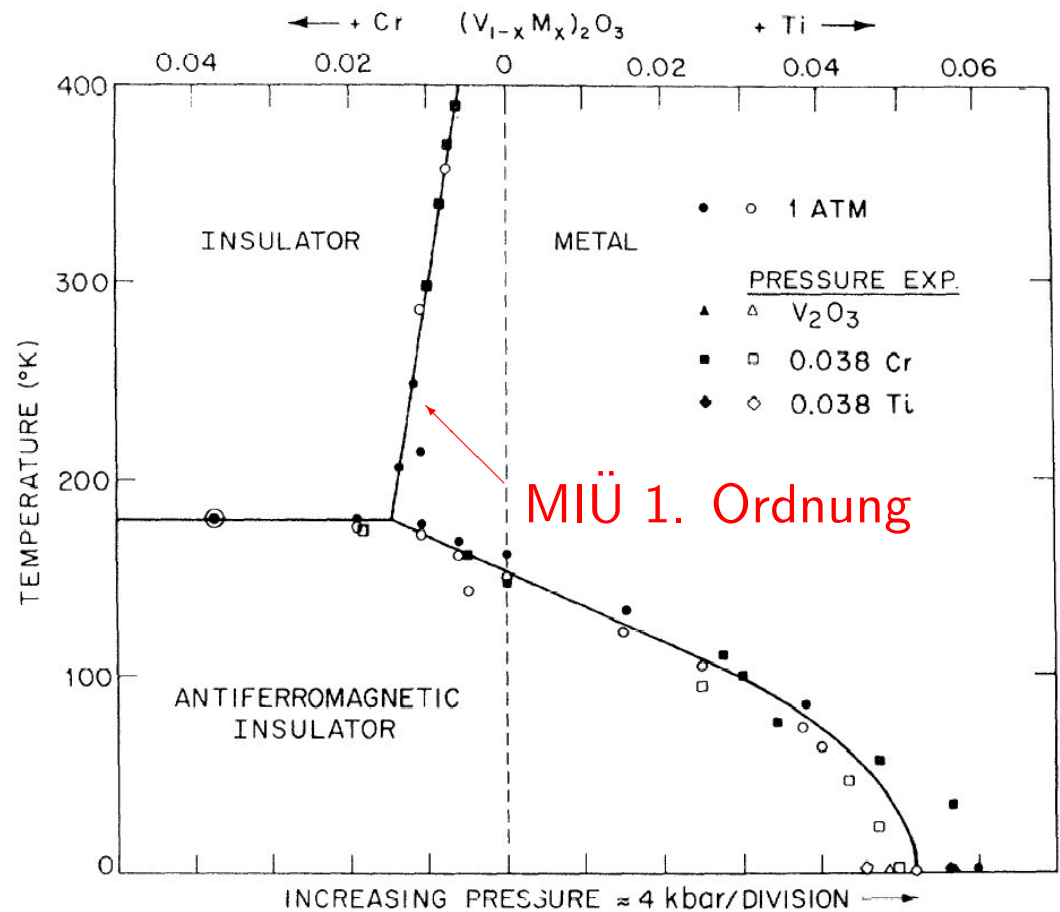
v. Klitzing (1986)

Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang und optische Leitfähigkeit in hohen Dimensionen

Nils Blümer



v. Klitzing (1986)



McWhan et al. (1971)

Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang und optische Leitfähigkeit in hohen Dimensionen

Nils Blümer

Inhalt

Einleitung

Quanten-Monte-Carlo Algorithmus

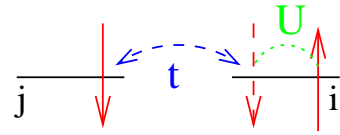
Mott Metall-Isolator-Übergang im halbgefüllten Hubbard-Modell

Gitter und Zustandsdichte in hohen Dimensionen

Spektren und optische Leitfähigkeit

Einleitung

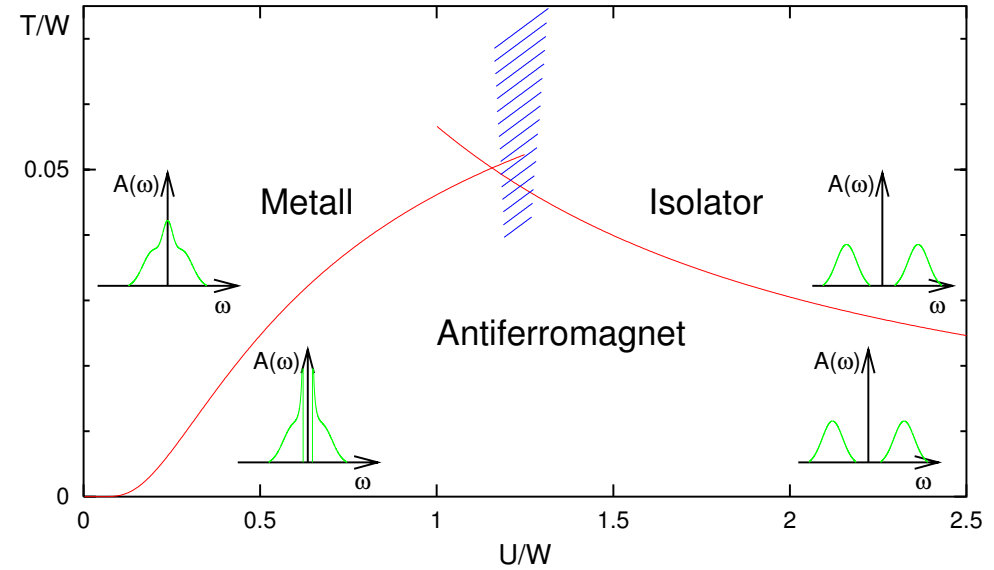
Ein-Band-Hubbard-Modell:



$$\hat{H} = \sum_{(i,j),\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$$

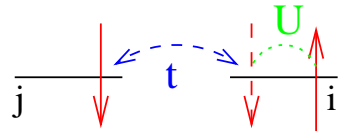
Für Bravais-Gitter: $\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}$

Minimal-Modell für korrelierte Elektronen



Einleitung

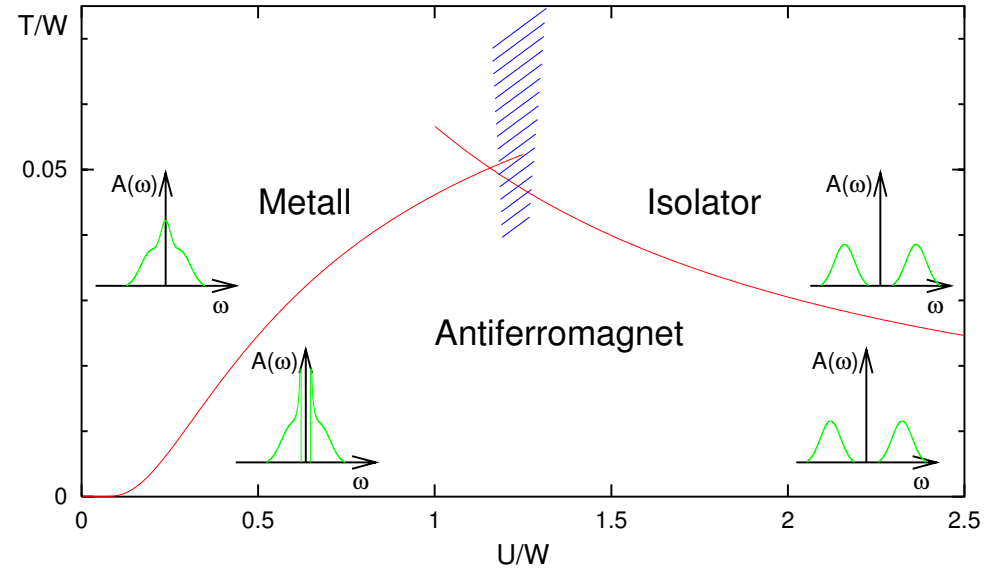
Ein-Band-Hubbard-Modell:



$$\hat{H} = \sum_{(i,j),\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$$

Für Bravais-Gitter: $\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}$

Minimal-Modell für korrelierte Elektronen



Dynamische Molekularfeld-Theorie (DMFT)

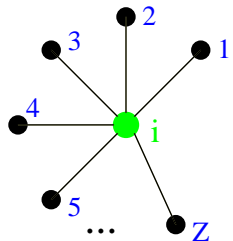


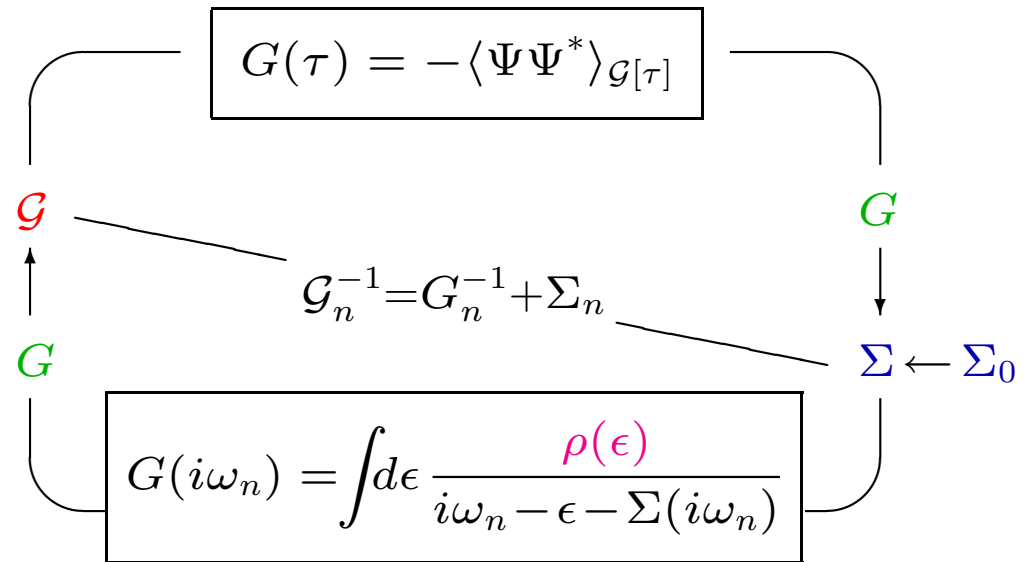
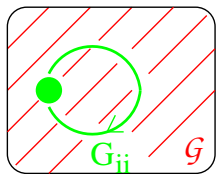
Abbildung des Gitterproblems auf Störstellenmodell plus Selbstkonsistenzbedingung

Skalierung der Hüpfmatrixelemente $t \propto 1/\sqrt{Z}$

DMFT

Selbstenergie $\Sigma(\omega)$ wird lokal

Exakt für Koordinationszahl $Z \rightarrow \infty$



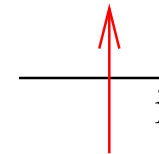
Lokale Eigenschaften hängen in DMFT nur über die Zustandsdichte $\rho(\epsilon)$ vom Gitter ab!

Quanten-Monte-Carlo Algorithmus

Trotter-Suzuki-Zerlegung $e^{-\beta(\hat{A}+\hat{B})} = (e^{-\Delta\tau\hat{A}}e^{-\Delta\tau\hat{B}})^\Lambda + \mathcal{O}(\Delta\tau)$; $\Lambda = \beta/\Delta\tau$

Hubbard-Stratonovich-Transformation, Wick-Theorem:

$$G_{\sigma ll'} = \frac{\sum_{\{s\}} (M_\sigma^{\{s\}})^{-1}_{ll'} \det M_\uparrow^{\{s\}} \det M_\downarrow^{\{s\}}}{\sum_{\{s\}} \det M_\uparrow^{\{s\}} \det M_\downarrow^{\{s\}}},$$



++++++
 -+++++
 +-++++
 --++++
 ⋮

$$M_{\sigma ll'}^{sl} = (\Delta\tau)^2 (\mathcal{G}_\sigma^{-1})_{ll'} e^{\lambda\sigma s l'} + \delta_{ll'} (1 - e^{\lambda\sigma s l})$$

Monte-Carlo importance sampling von $\{s\}$, unbekannter Vorfaktor in \mathcal{Z} kürzt sich weg

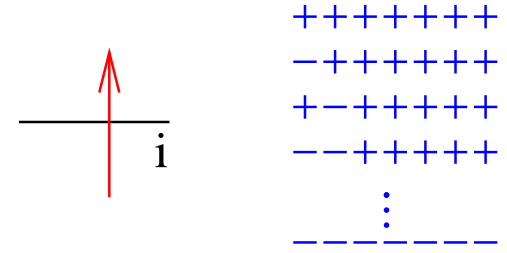
Quanten-Monte-Carlo Algorithmus

Trotter-Suzuki-Zerlegung $e^{-\beta(\hat{A}+\hat{B})} = (e^{-\Delta\tau\hat{A}}e^{-\Delta\tau\hat{B}})^\Lambda + \mathcal{O}(\Delta\tau)$; $\Lambda = \beta/\Delta\tau$

Hubbard-Stratonovich-Transformation, Wick-Theorem:

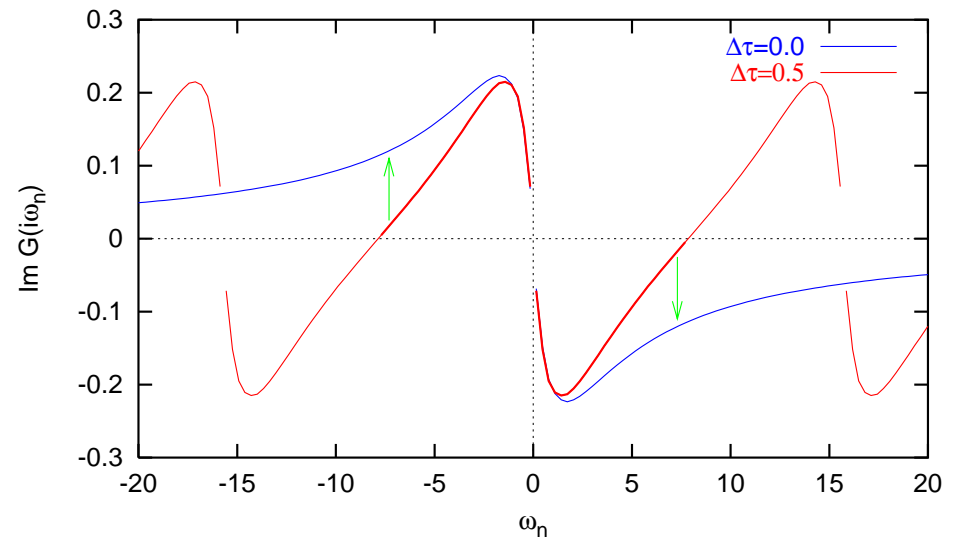
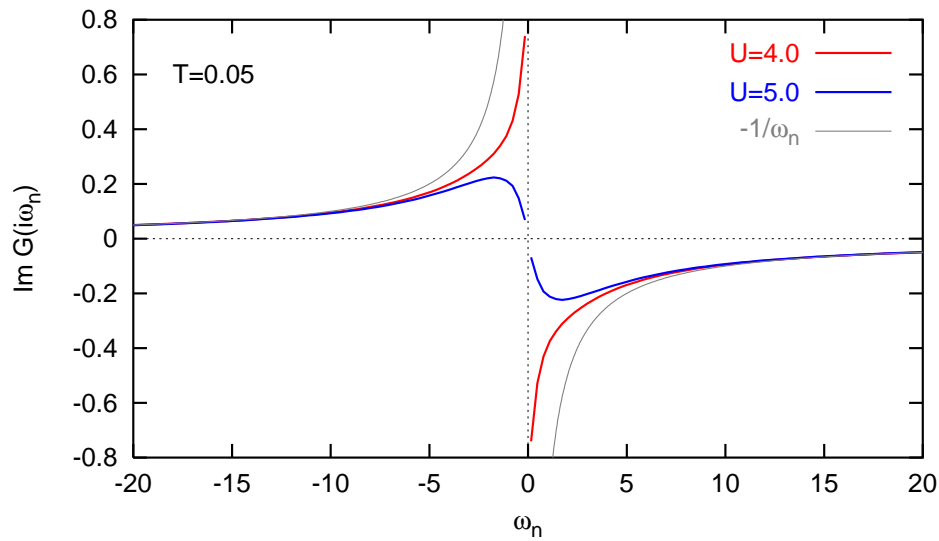
$$G_{\sigma ll'} = \frac{\sum_{\{s\}} (M_\sigma^{\{s\}})^{-1}_{ll'} \det M_\uparrow^{\{s\}} \det M_\downarrow^{\{s\}}}{\sum_{\{s\}} \det M_\uparrow^{\{s\}} \det M_\downarrow^{\{s\}}},$$

$$M_{\sigma ll'}^{sl} = (\Delta\tau)^2 (\mathcal{G}_\sigma^{-1})_{ll'} e^{\lambda\sigma sl'} + \delta_{ll'} (1 - e^{\lambda\sigma sl})$$



Monte-Carlo importance sampling von $\{s\}$, unbekannter Vorfaktor in \mathcal{Z} kürzt sich weg

Fouriertransformationen $G(\tau) \leftrightarrow G(i\omega_n)$



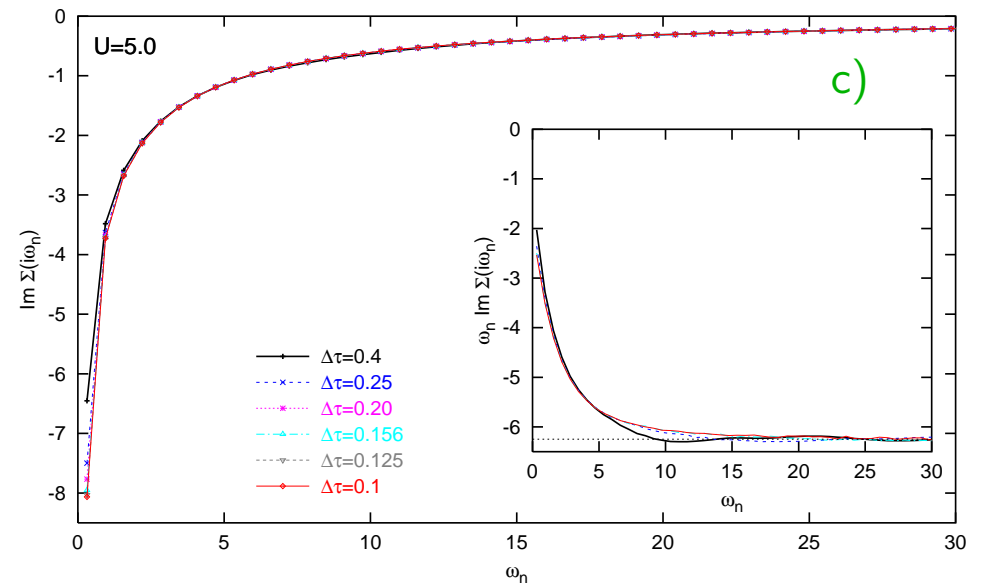
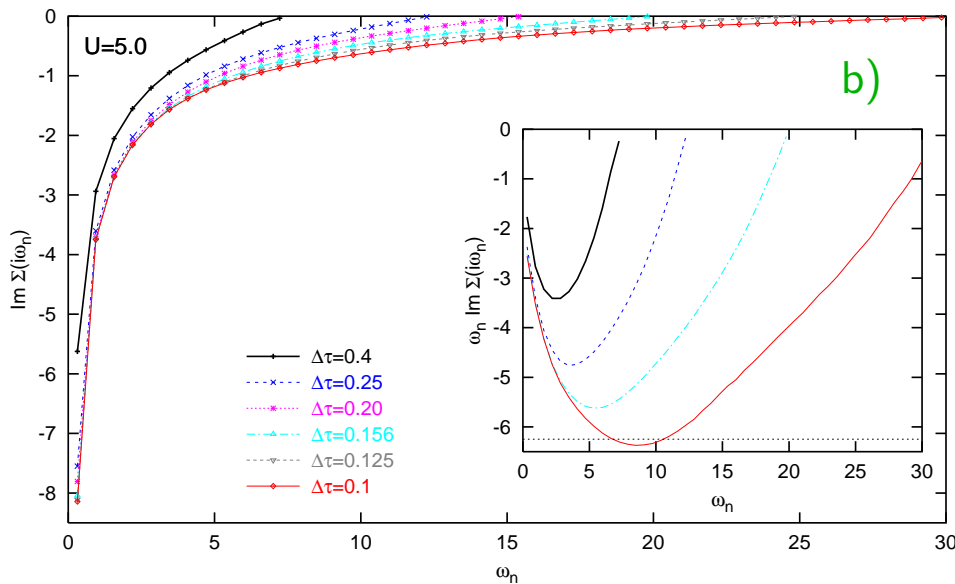
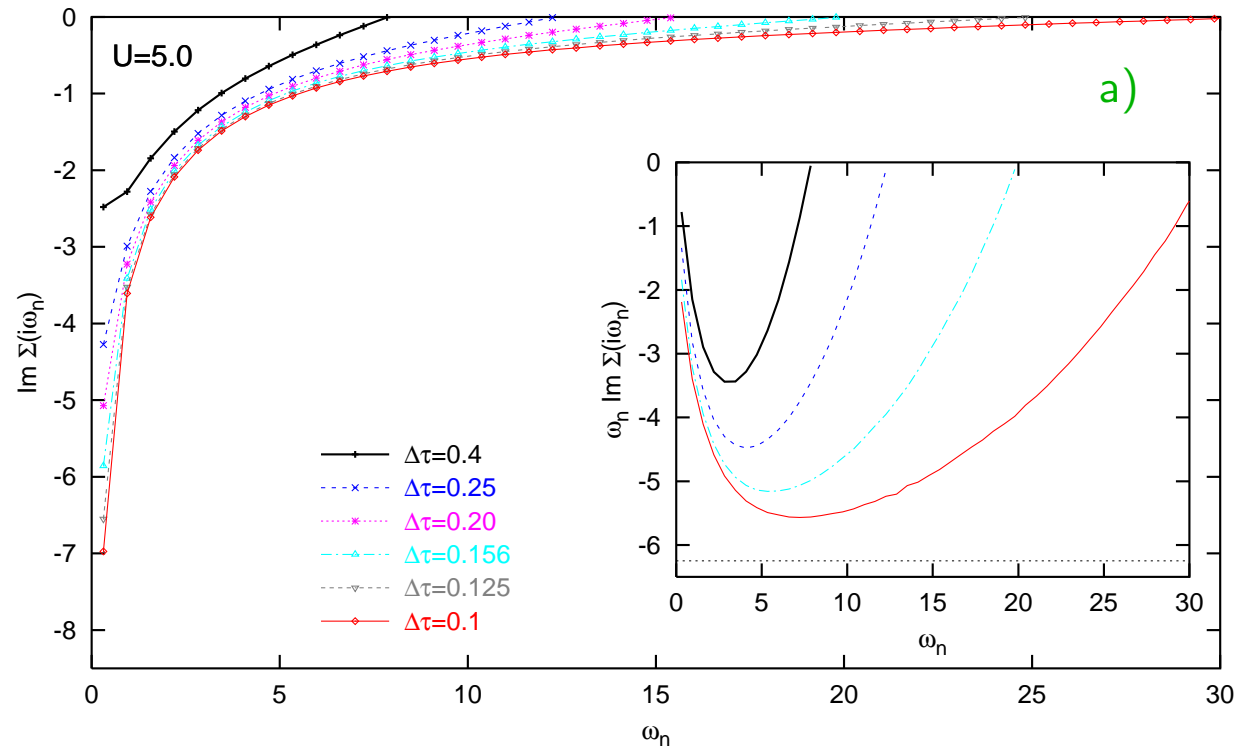
diskrete Fourier-Trafo + "Ulmke smoothing"

Fourier-Transformations-Verfahren:
Selbstenergie ($T = 0.1, U = 5.0$)

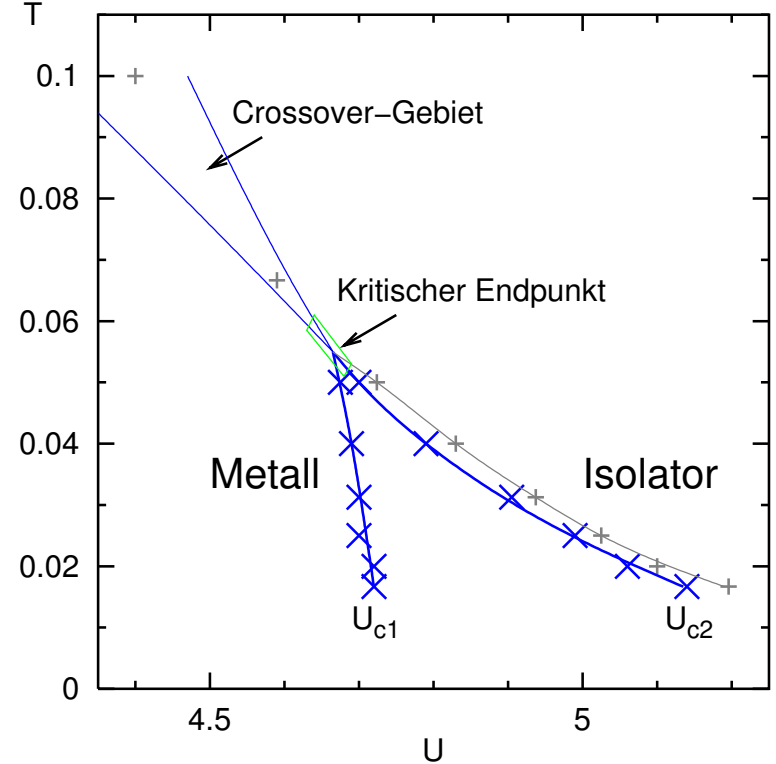
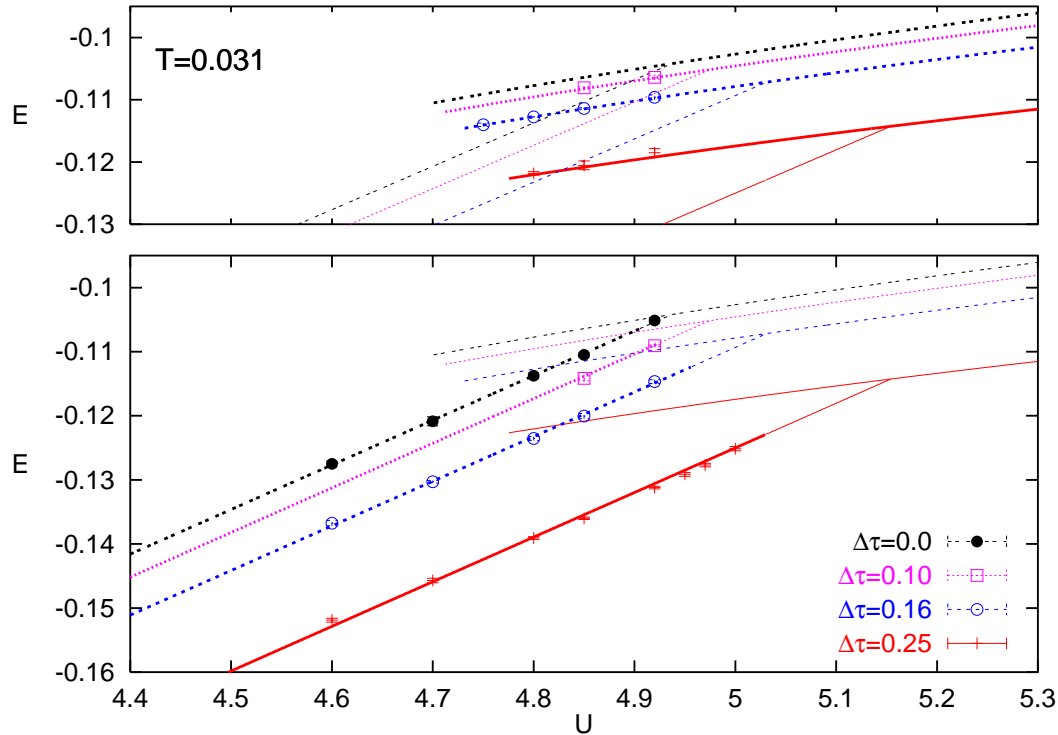
- a) "Ulmke Smoothing",
- b) verbessertes "Smoothing",
- c) Verfahren mit analytischen Hochfrequenz-Korrekturen

Stärkerer Effekt bei niedrigeren Temperaturen

Niederfrequenz-Anteil von $\Sigma(\omega)$ in b) und c) optimal erfasst

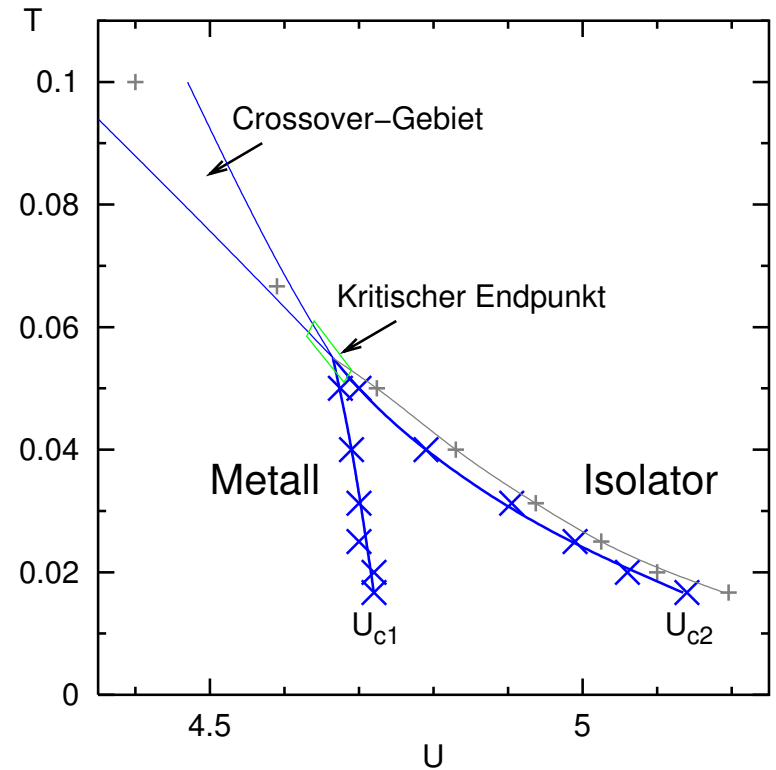
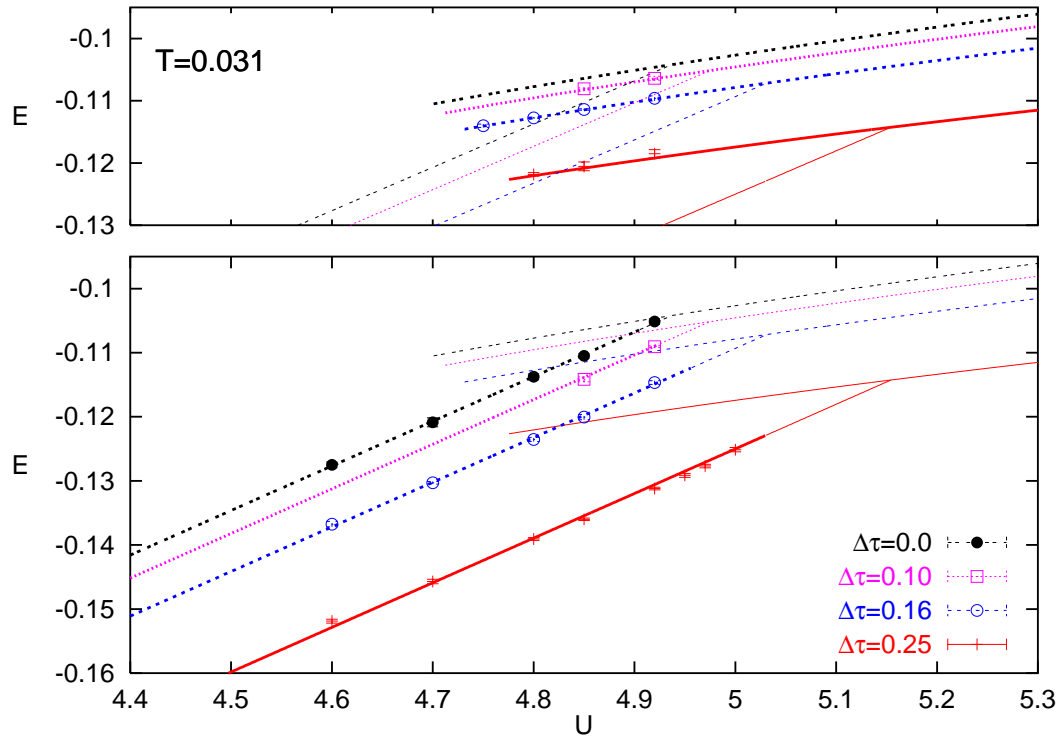


Mott Metall-Isolator-Übergang im halbgefüllten Hubbard-Modell



Messung der Energie \rightsquigarrow Koexistenz-Phasendiagramm

Mott Metall-Isolator-Übergang im halbgefüllten Hubbard-Modell

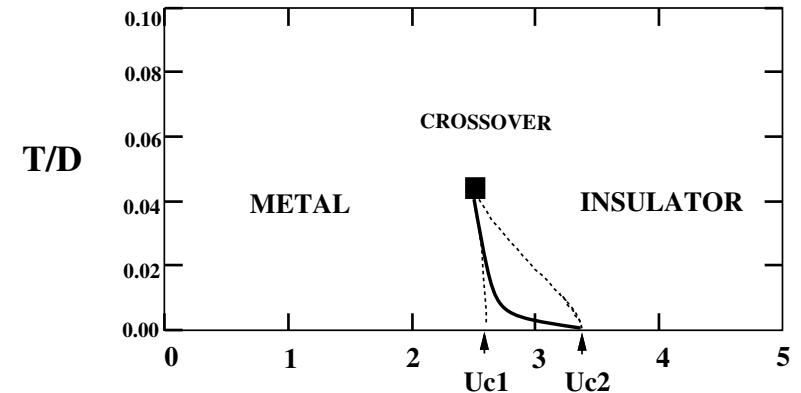


Messung der Energie \rightsquigarrow Koexistenz-Phasendiagramm

Verlauf des Phasenübergangs 1. Ordnung?

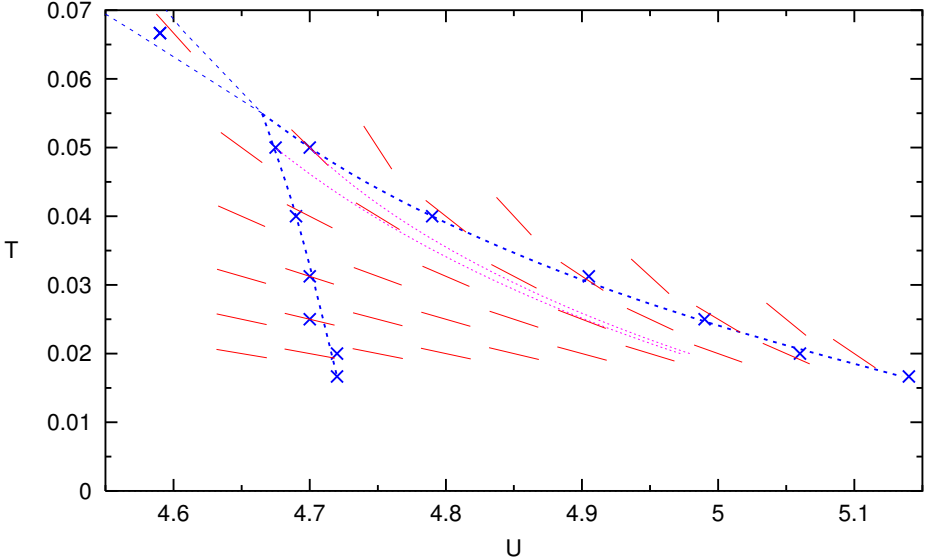
\mathcal{Z} und Freie Energie in QMC prinzipiell unbekannt

Konsistente Bestimmung von $U_c(T)$ selbst in iterierter Störungstheorie (IPT) schwierig



Clausius-Clapeyron-Gleichung:

$$\frac{dU_c(T)}{dT} = f(T, U_c(T)); f(T, U) \equiv \frac{\Delta E(T, U)}{T \Delta D(T, U)}$$



Clausius-Clapeyron-Gleichung:

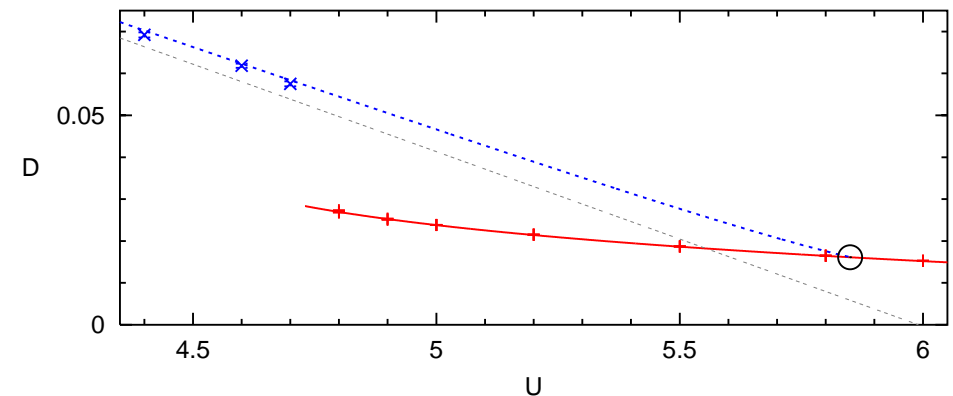
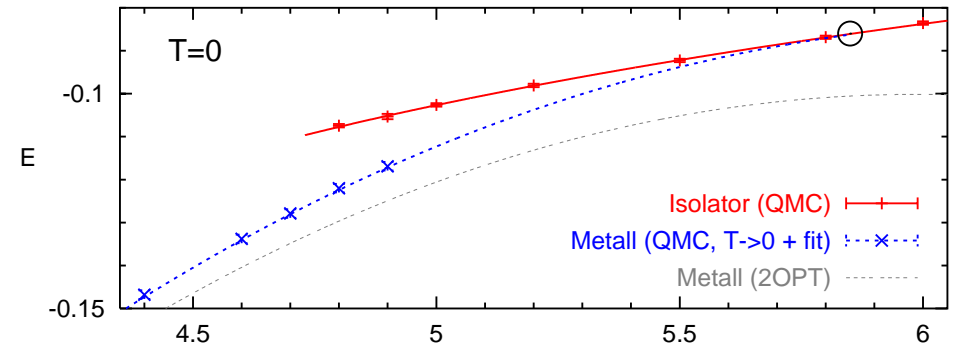
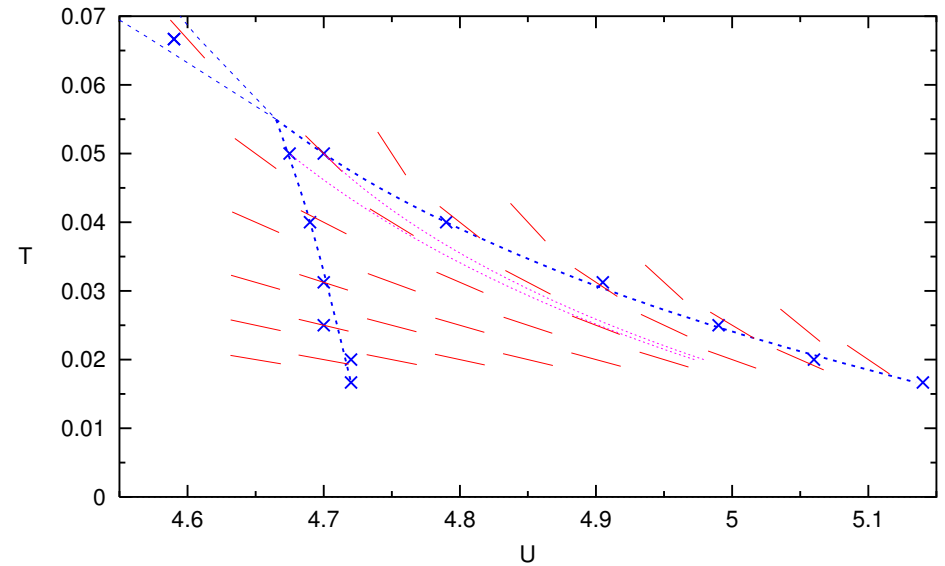
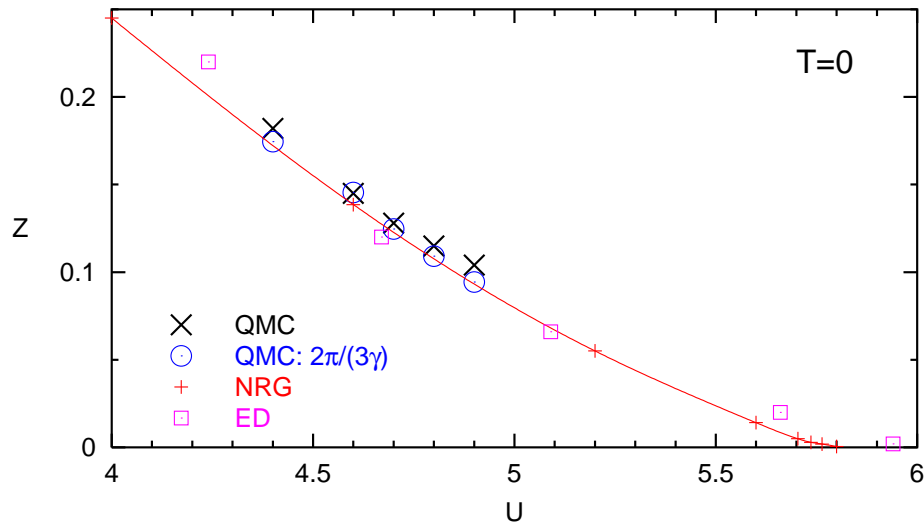
$$\frac{dU_c(T)}{dT} = f(T, U_c(T)); \quad f(T, U) \equiv \frac{\Delta E(T, U)}{T \Delta D(T, U)}$$

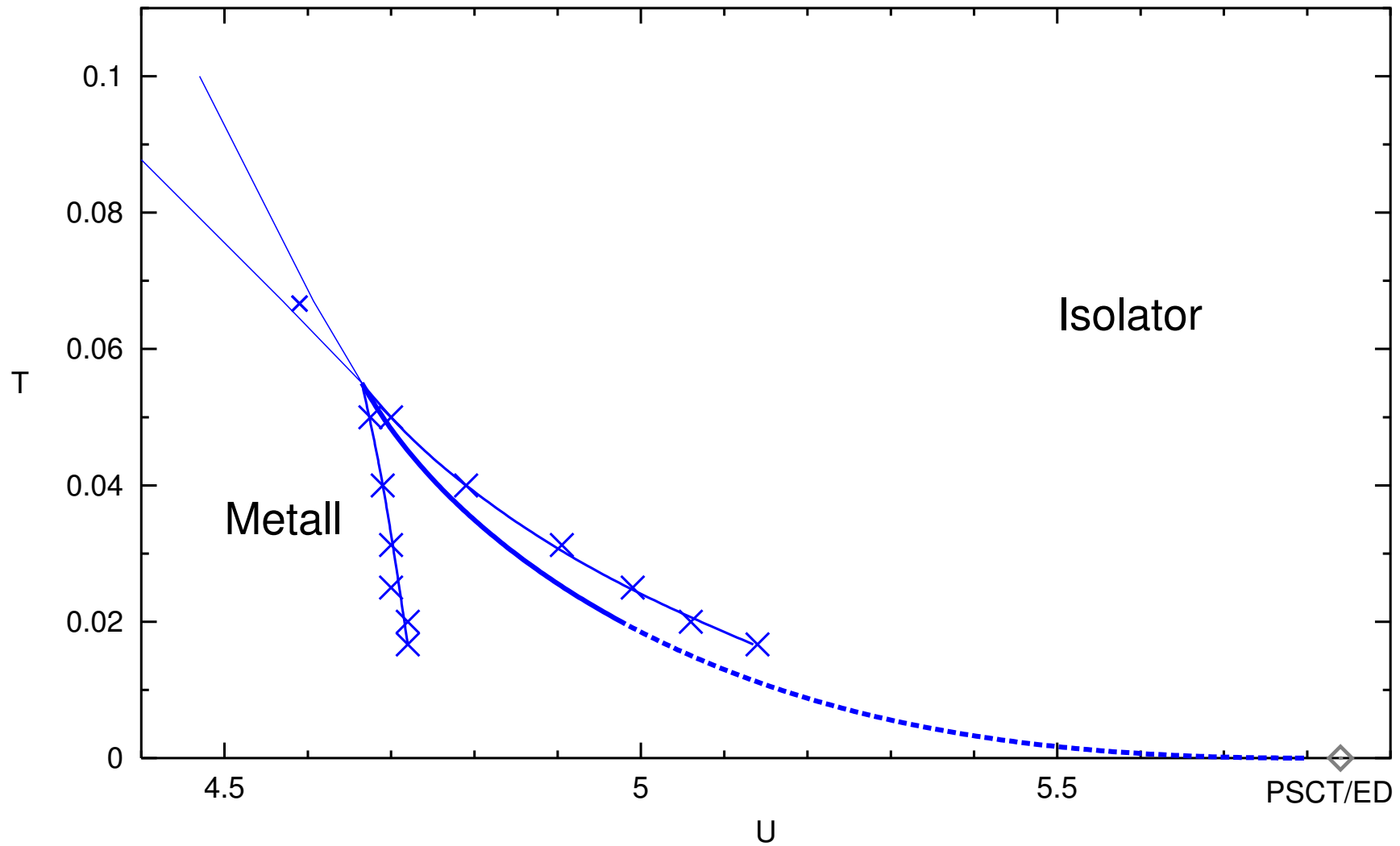
Fermiflüssigkeits-Eigenschaften,
Übergang 2. Ordnung bei $T = 0$:

$$U_c(T) = U_c^0 - \sqrt{\frac{2S_0 T}{a}} + \mathcal{O}(T)$$

Fit an Störungstheorie 2. Ordnung, $U_c(0)$ und $T \rightarrow 0$ extrapolierte QMC-Daten

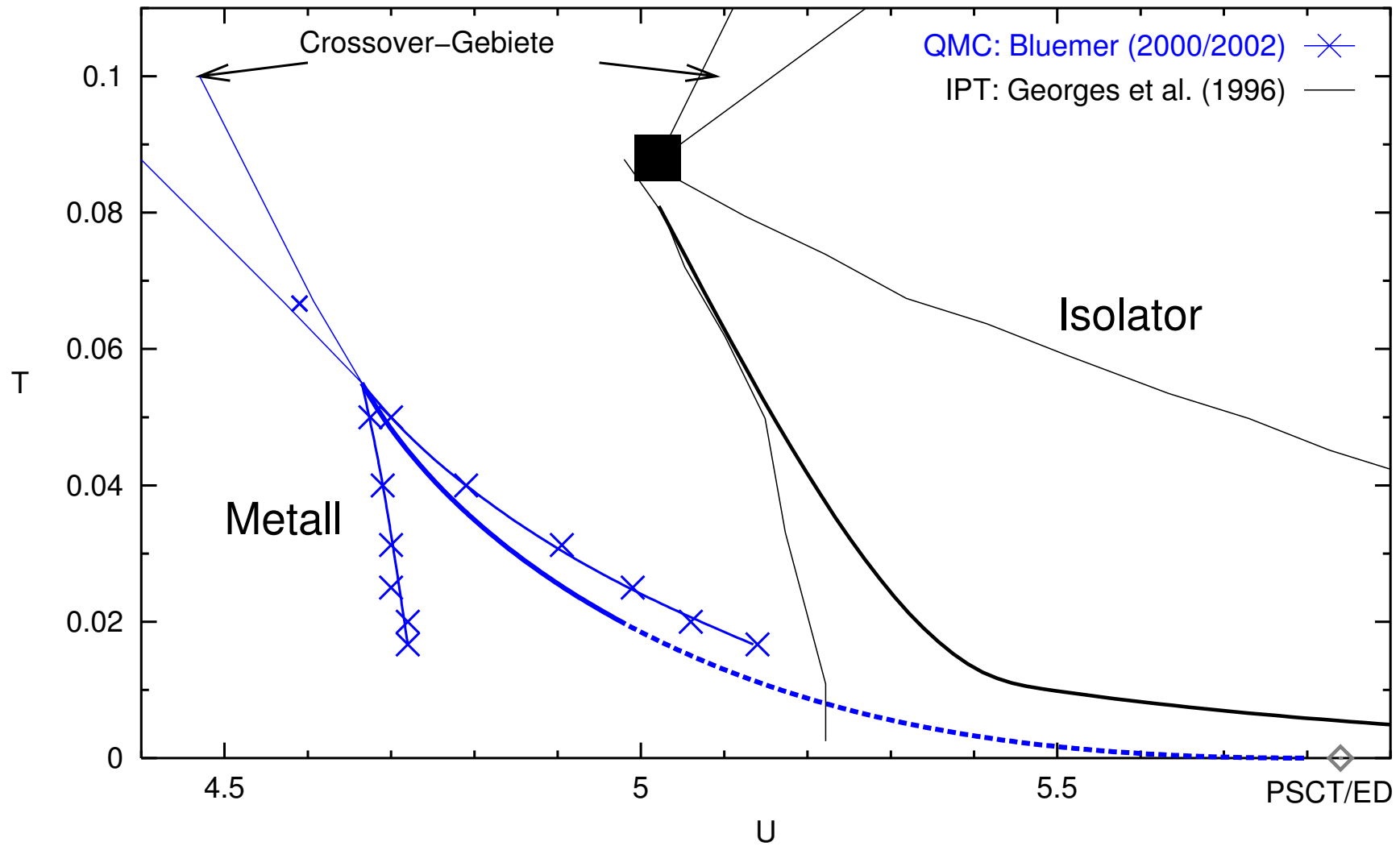
Hervorragende Konsistenz





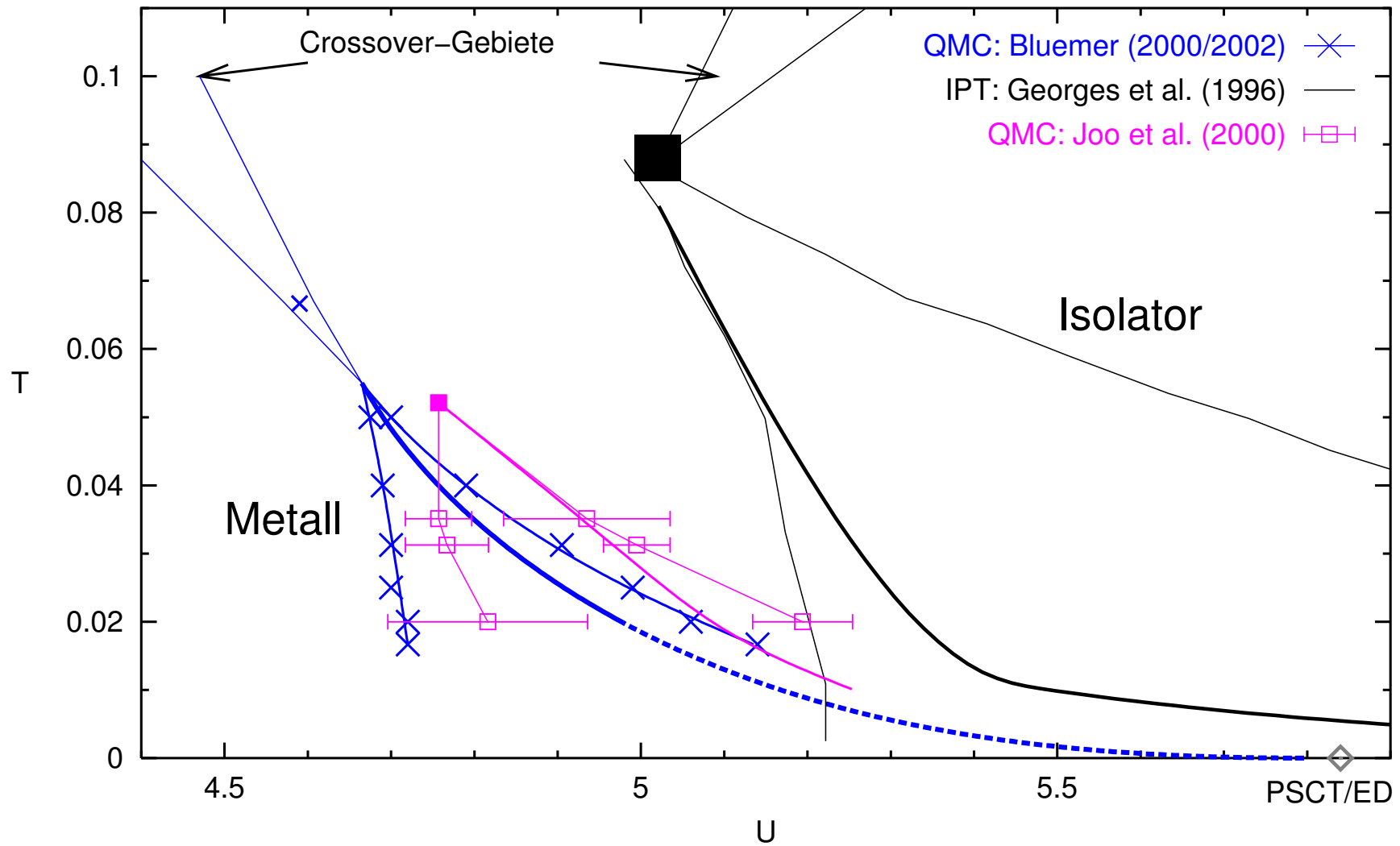
Vollständige Frustration unrealistisch für $T \rightarrow 0$ (3. Hauptsatz)

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



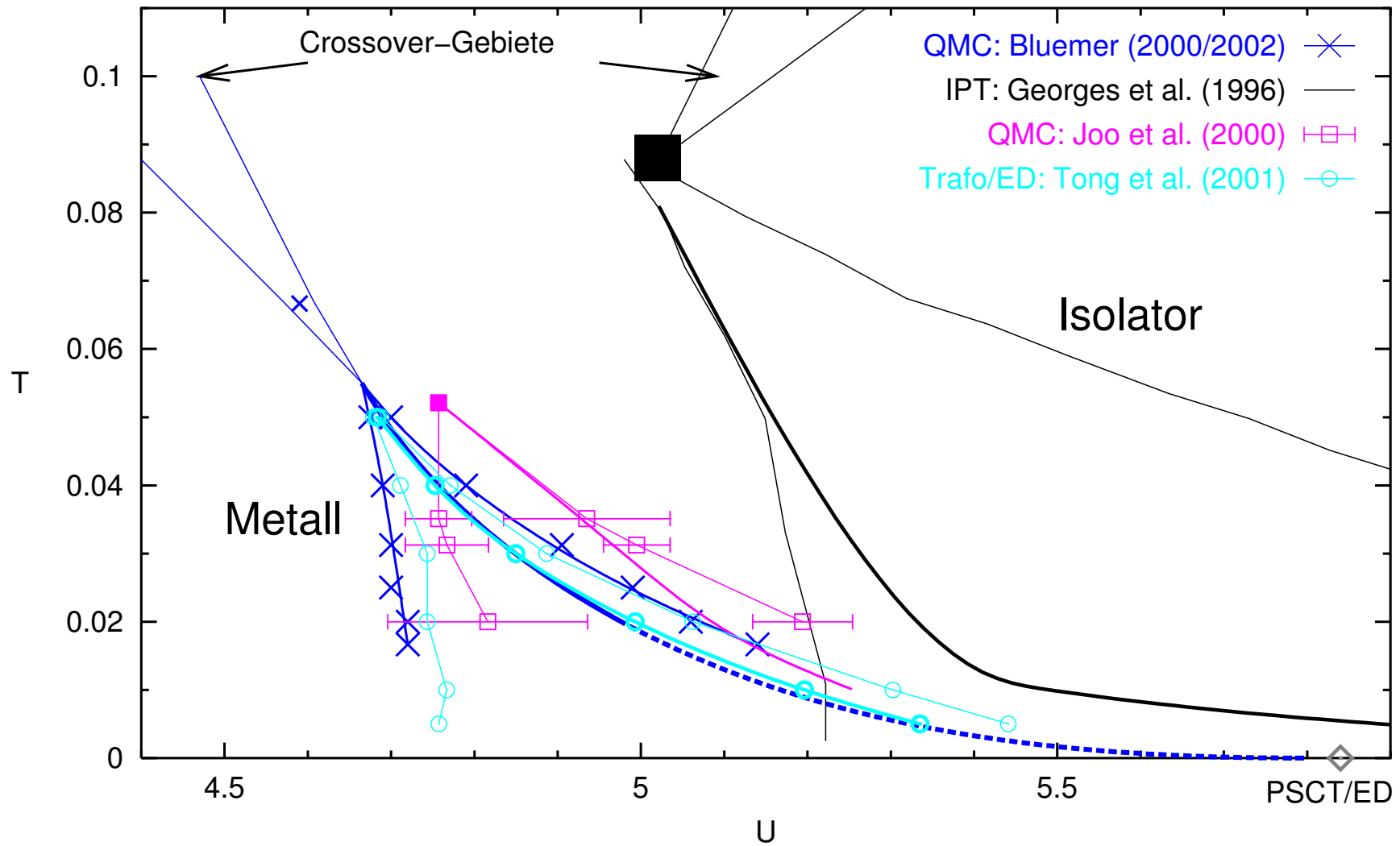
Vollständige Frustration unrealistisch für $T \rightarrow 0$ (3. Hauptsatz)

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



Vollständige Frustration unrealistisch für $T \rightarrow 0$ (3. Hauptsatz)

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

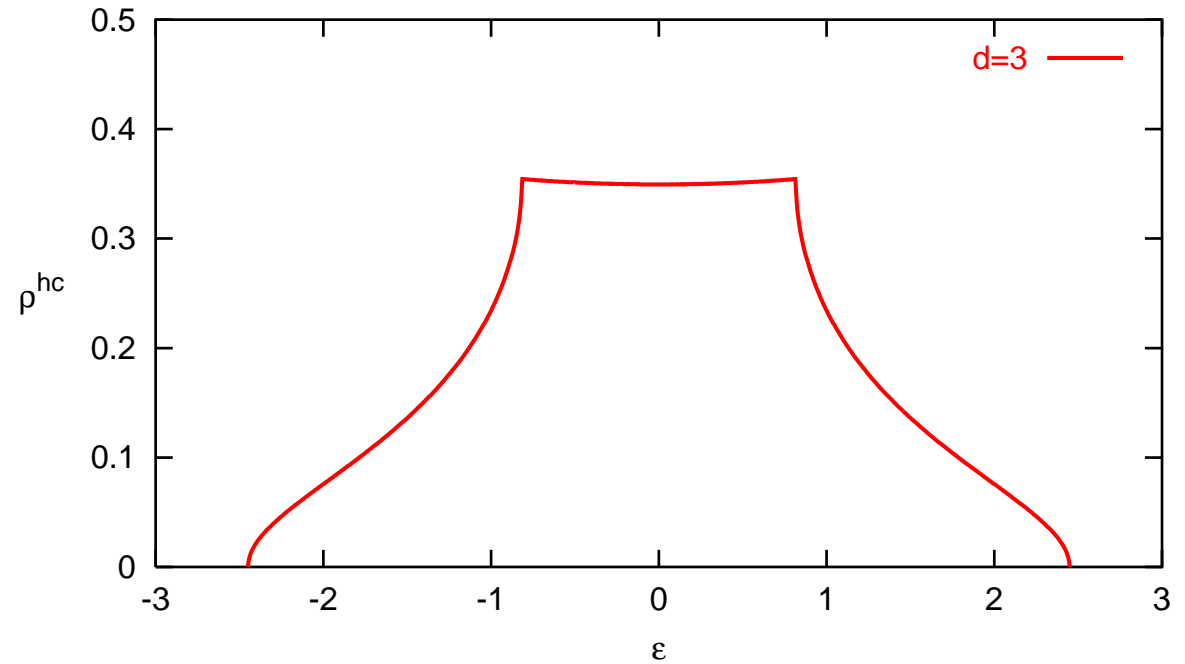


Vollständige Frustration unrealistisch für $T \rightarrow 0$ (3. Hauptsatz)

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

Gitter und Zustandsdichte in hohen Dimensionen

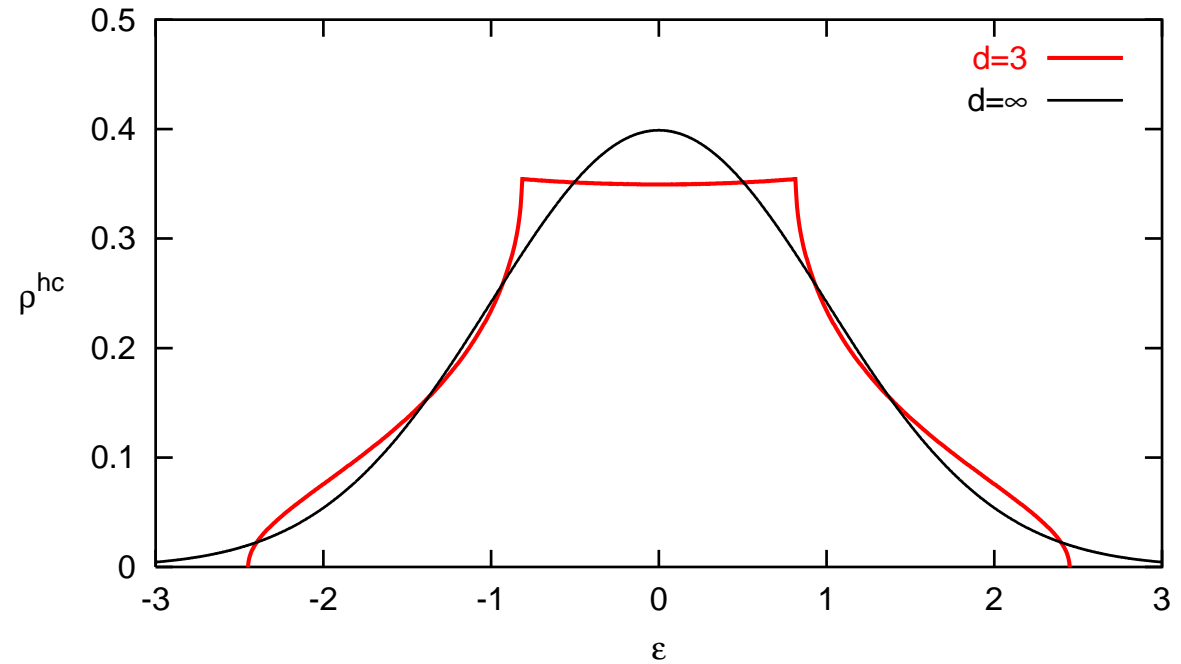
Nächst-Nachbar (NN) Hüpfen auf
hyperkubischem (hc) Gitter:
scharfe Wurzel-Bandkanten in $d = 3$



Gitter und Zustandsdichte in hohen Dimensionen

Nächst-Nachbar (NN) Hüpfen auf
hyperkubischem (hc) Gitter:
scharfe Wurzel-Bandkanten in $d = 3$

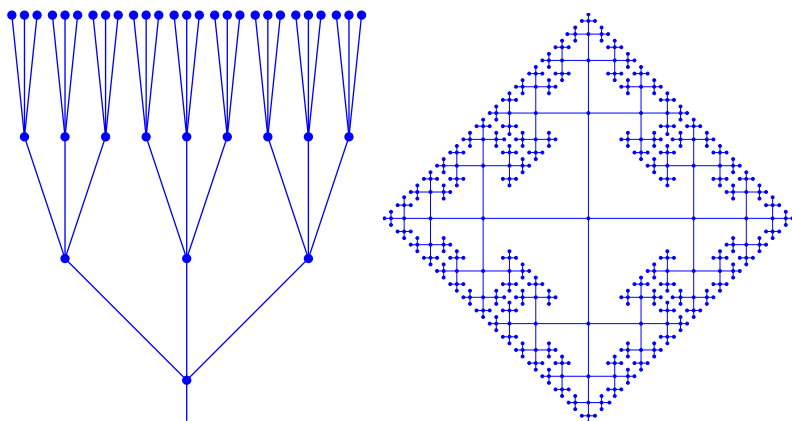
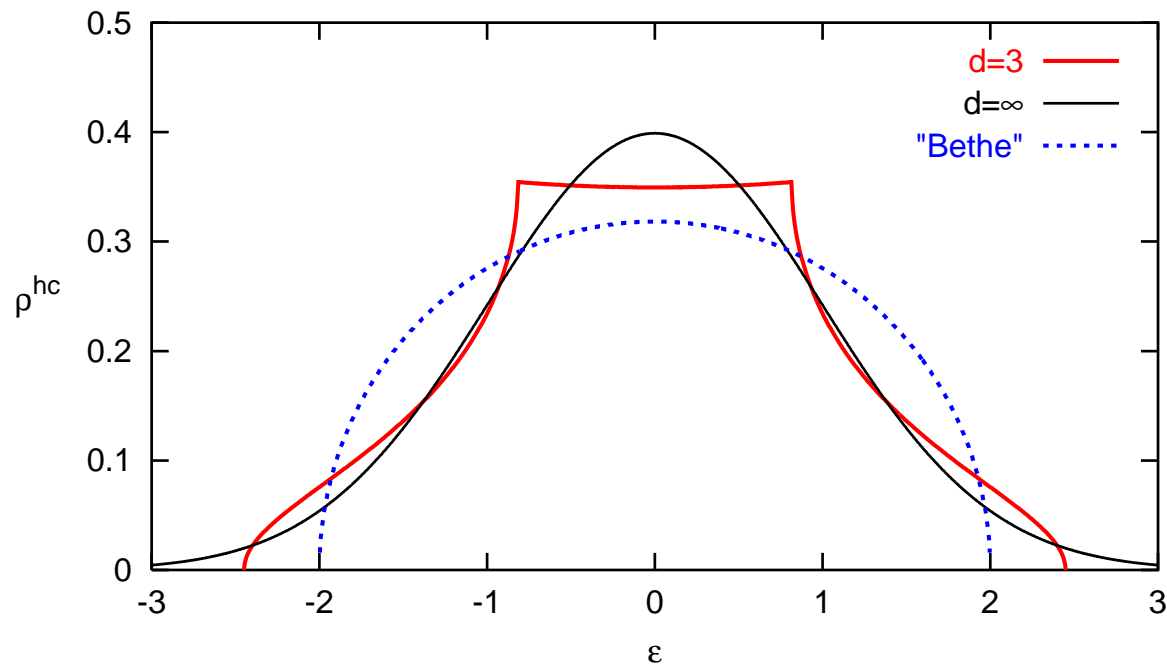
$$\rho^{\text{hc}}(\epsilon) \xrightarrow{d \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi t^*}} e^{-\epsilon^2 / (2t^{*2})}$$



Gitter und Zustandsdichte in hohen Dimensionen

Nächst-Nachbar (NN) Hüpfen auf
hyperkubischem (hc) Gitter:
scharfe Wurzel-Bandkanten in $d = 3$

$$\rho^{\text{hc}}(\epsilon) \xrightarrow{d \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi t^*}} e^{-\epsilon^2 / (2t^{*2})}$$

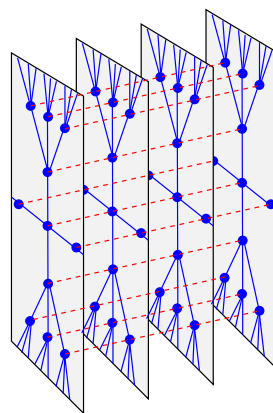
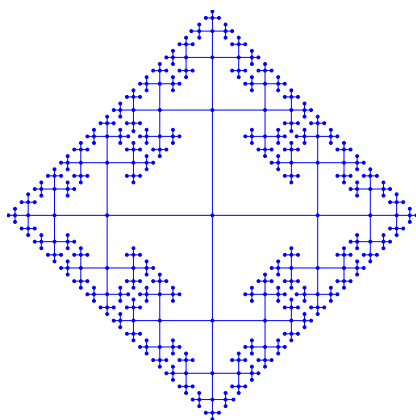
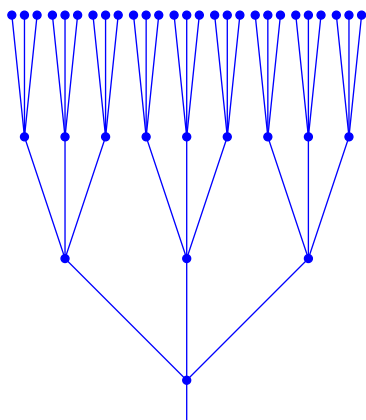
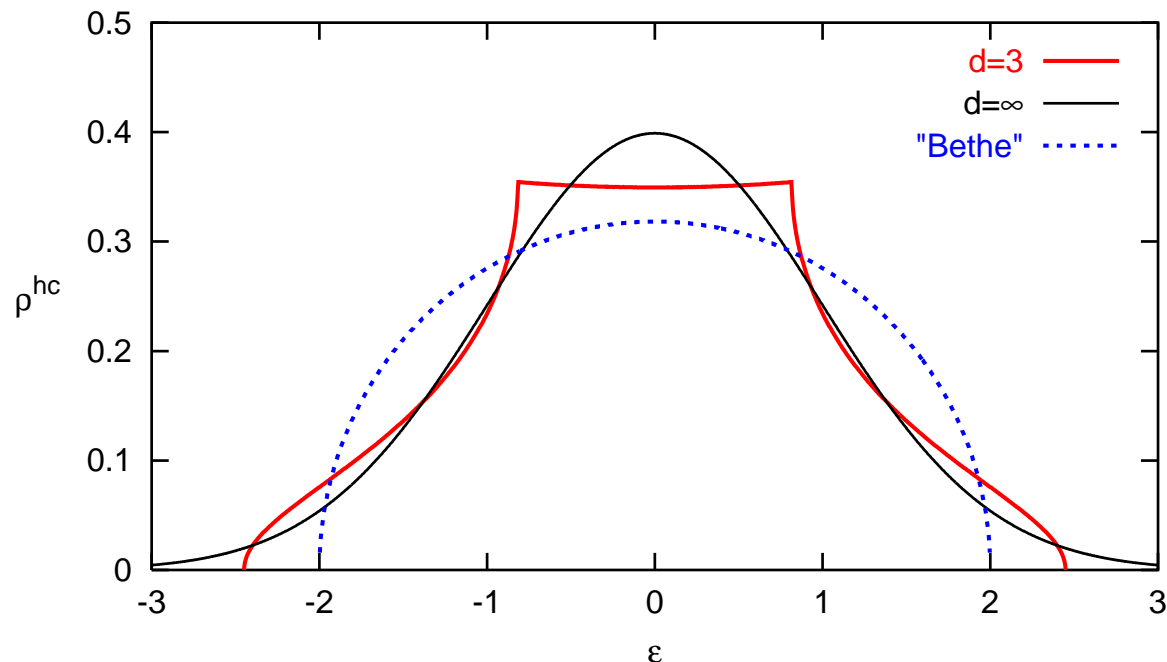


Bethe-"Gitter" ($Z=4$)

Gitter und Zustandsdichte in hohen Dimensionen

Nächst-Nachbar (NN) Hüpfen auf hyperkubischem (hc) Gitter:
scharfe Wurzel-Bandkanten in $d = 3$

$$\rho^{\text{hc}}(\epsilon) \xrightarrow{d \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi t^*}} e^{-\epsilon^2 / (2t^*{}^2)}$$

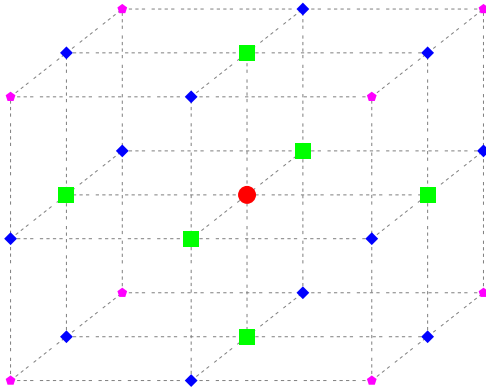


Bethe-"Gitter" ($Z=4$)

Transporteigenschaften für Bethe-Gitter a priori undefiniert

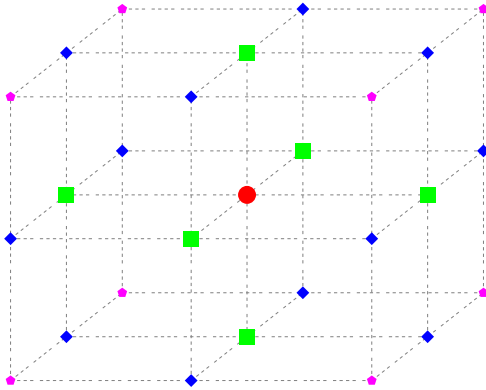
Bisher kohärente Definition der Leitfähigkeit nur für periodisch fortgesetztes Gitter: anisotrop

Alternativ: Unordnung (inkohärent)



“general dispersion”-Formalismus: definiert mikroskopisches Modell mit beliebiger (z.B. halbelliptischer) DOS

- reguläres Bravais-Gitter
- alle Transporteigenschaften wohldefiniert
- kohärente Leitfähigkeit im Grenzfall $U \rightarrow 0$
- hyperkubische Symmetrie: isotroper Transport (für $\mathbf{k} \rightarrow 0$)



“general dispersion”-Formalismus: definiert mikroskopisches Modell mit beliebiger (z.B. halb elliptischer) DOS

- reguläres Bravais-Gitter
- alle Transporteigenschaften wohldefiniert
- kohärente Leitfähigkeit im Grenzfall $U \rightarrow 0$
- hyperkubische Symmetrie: isotroper Transport (für $\mathbf{k} \rightarrow 0$)

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \sum_{D=1}^{\infty} \frac{t_D^*}{\sqrt{D!}} \text{He}_D(\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{hc}}) =: \mathcal{F}(\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{hc}})$$

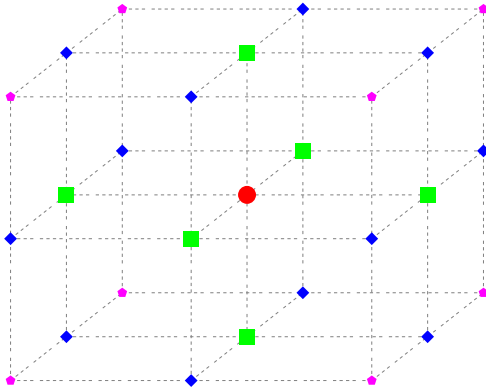
$$t_D^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi D!}} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \mathcal{F}(\epsilon) \text{He}_D(\epsilon) e^{-\epsilon^2/2}$$

Wähle **monotone** Transformations-Funktion:

$$\mathcal{F}^{-1}(\epsilon) = \sqrt{2} \text{erf}^{-1} \left(2 \int_{-\infty}^{\epsilon} d\epsilon' \rho(\epsilon') - 1 \right)$$

Anwendung auf halb elliptische DOS: erstes reguläres Gitter mit endlicher Bandbreite für $d \rightarrow \infty$

Exponentiell abfallende Hüpfmatrixelemente, schnelle Konvergenz



“general dispersion”-Formalismus: definiert mikroskopisches Modell mit beliebiger (z.B. halb elliptischer) DOS

- reguläres Bravais-Gitter
- alle Transporteigenschaften wohldefiniert
- kohärente Leitfähigkeit im Grenzfall $U \rightarrow 0$
- hyperkubische Symmetrie: isotroper Transport (für $\mathbf{k} \rightarrow 0$)

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \sum_{D=1}^{\infty} \frac{t_D^*}{\sqrt{D!}} \text{He}_D(\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{hc}}) =: \mathcal{F}(\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{hc}})$$

$$t_D^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi D!}} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \mathcal{F}(\epsilon) \text{He}_D(\epsilon) e^{-\epsilon^2/2}$$

Wähle **monotone** Transformations-Funktion:

$$\mathcal{F}^{-1}(\epsilon) = \sqrt{2} \text{erf}^{-1} \left(2 \int_{-\infty}^{\epsilon} d\epsilon' \rho(\epsilon') - 1 \right)$$

Anwendung auf halb elliptische DOS: erstes reguläres Gitter mit endlicher Bandbreite für $d \rightarrow \infty$

Exponentiell abfallende Hüpfmatrixelemente, schnelle Konvergenz

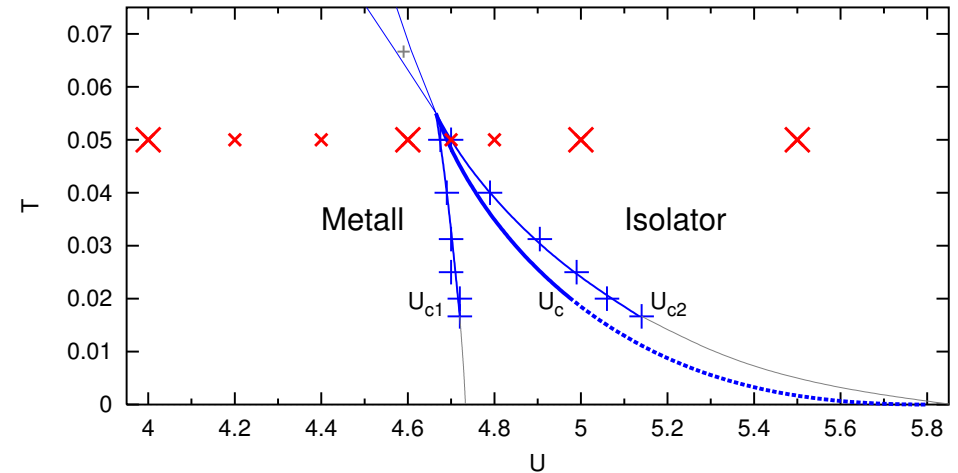
f -Summenregel: $\int_0^{\infty} d\omega \sigma(\omega) \propto \left\langle \frac{\tilde{\rho}'(\epsilon)}{\rho(\epsilon)} \right\rangle = \left\langle \mathcal{F}''(\mathcal{F}^{-1}(\epsilon)) - \mathcal{F}^{-1}(\epsilon) \mathcal{F}'(\mathcal{F}^{-1}(\epsilon)) \right\rangle$

Spektren und optische Leitfähigkeit

Hubbard Modell: $n = 1$, Bethe DOS, $W = 4$

QMC Diskretisierung $\Delta\tau = 0.1$

Analytische Fortsetzung mit Maximum-Entropie-Methode

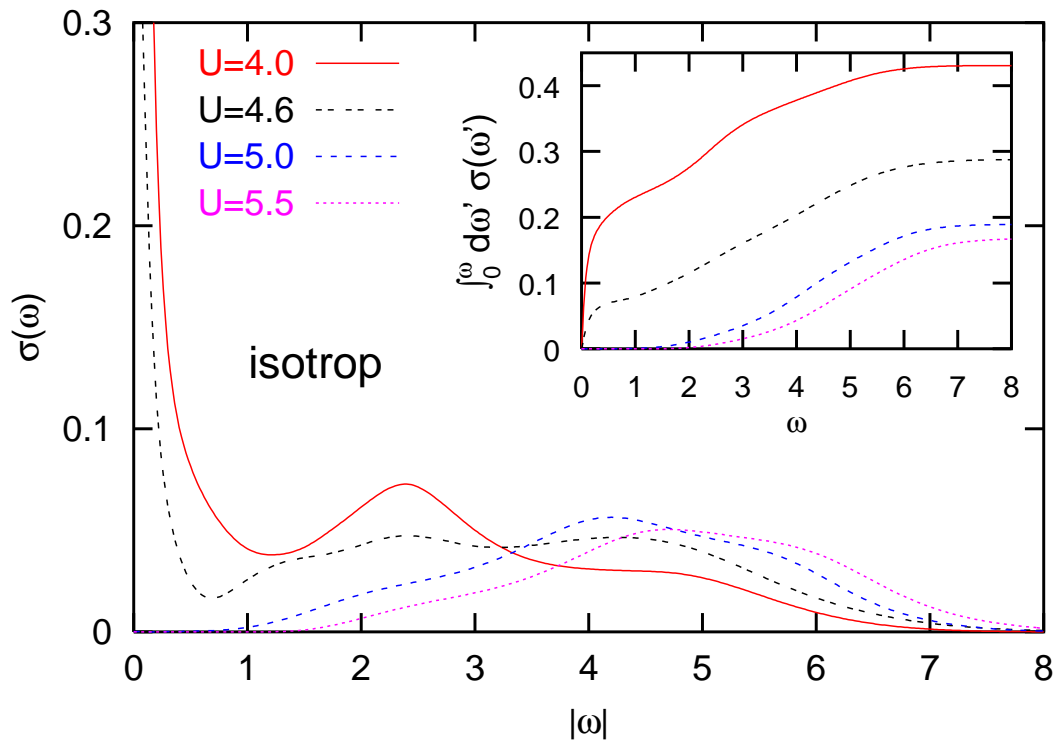


Luttinger Theorem für $U \lesssim 4.4$

Am Übergang verschwindet der Quasiteilchen-Peak, Gap öffnet sich

“Schultern” der Hubbard-Bänder bestätigt

Kaum spektrales Gewicht für $|\omega| > (U + W)/2$

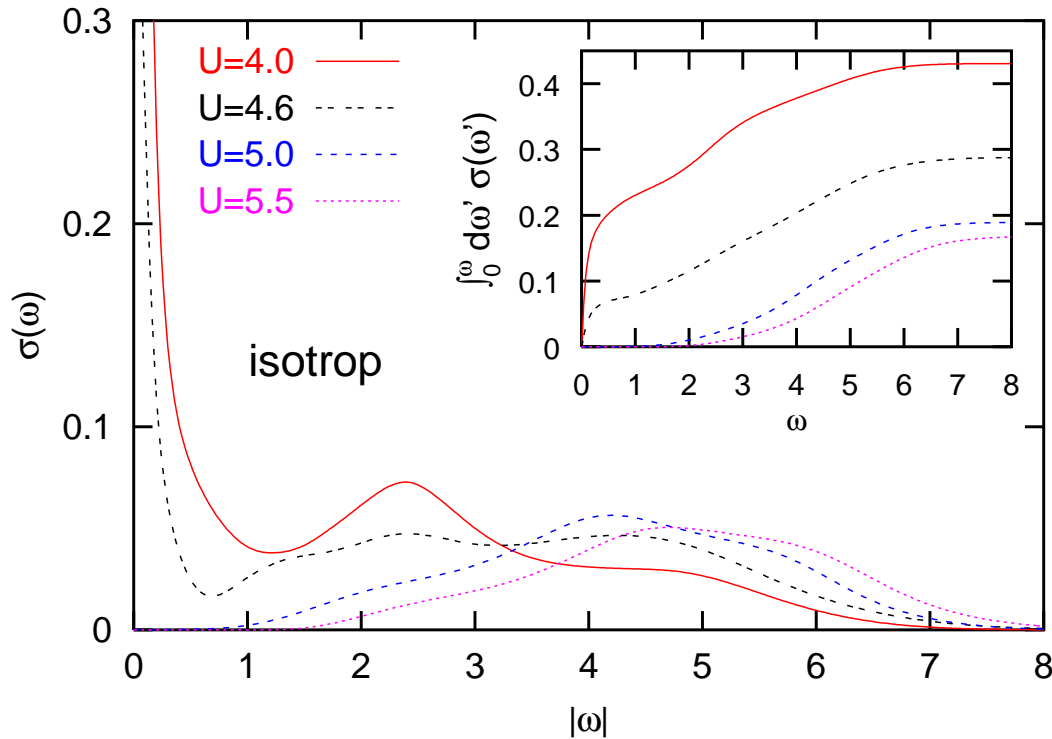


metallische Phase ($U = 4.0, U = 4.6$):

Drude-Peak

“Mid-IR” Peak bei $\omega \approx U/2$

inkohärente Beiträge bei $\omega \approx U$



metallische Phase ($U = 4.0, U = 4.6$):
Drude-Peak

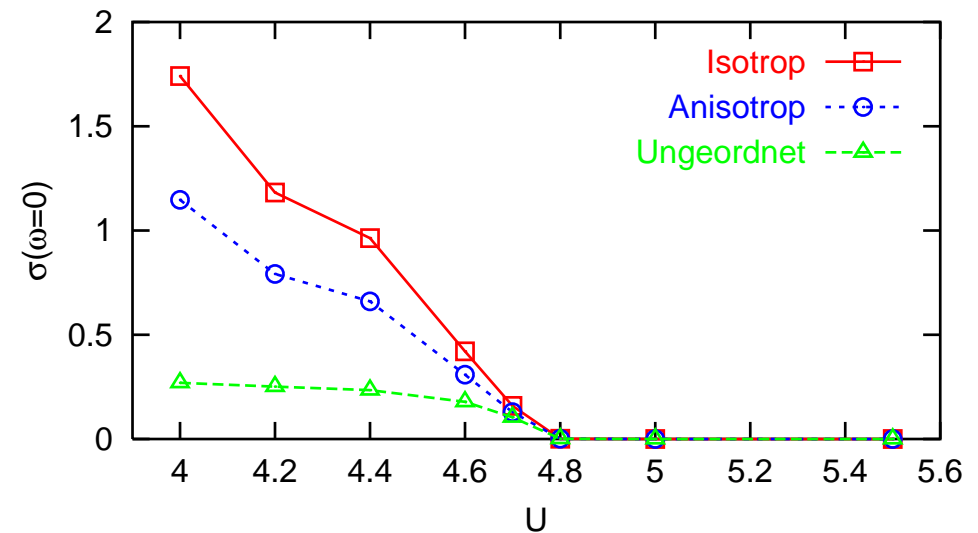
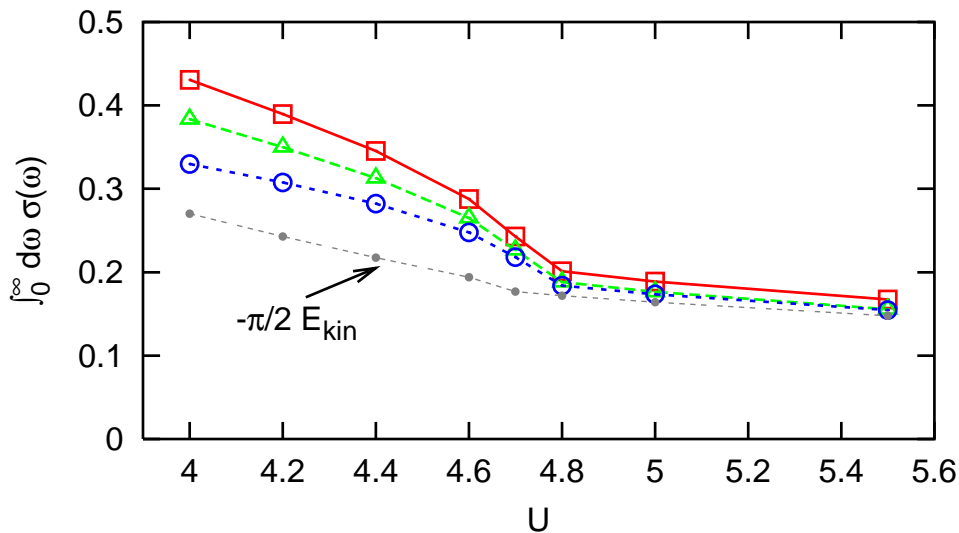
“Mid-IR” Peak bei $\omega \approx U/2$

inkohärente Beiträge bei $\omega \approx U$

Ergebnisse für $\sigma(\omega)$ definitionsabhängig

f -Summe nicht proportional zu E_{kin}

$\sigma(\omega = 0)$ scharfes Kriterium für MIÜ



Contents

1 Models and Methods

- 1.1 Hubbard Model
- 1.2 Dynamical Mean-Field Theory
- 1.3 Quantum Monte Carlo Algorithm
- 1.4 Maximum Entropy Method

2 Lattice and Density of States

- 2.1 Hypercubic Lattice and Extensions
- 2.2 Bethe Lattice, RPE, and Disorder
- 2.3 General Density of States in $d = \infty$
- 2.4 Redefinition of the Bethe Lattice
- 2.5 Conclusion

3 Mott Metal-Insulator Transition in the $d \rightarrow \infty$ Hubbard Model

- 3.1 Motivation
- 3.2 Characterization of Phase Transitions within the DMFT
- 3.3 Phase Diagram: Development until 1999
- 3.4 Discussion of QMC Algorithms
- 3.5 Results: Hysteresis Region
- 3.6 Results: Thermodynamic Phase Transition Line
- 3.7 Landau Theory and Criticality
- 3.8 Spectra
- 3.9 Conclusion

4 Optical Conductivity

- 4.1 Definition and General Properties of the Optical Conductivity
- 4.2 Kubo Formalism
- 4.3 Optical Conductivity in the Limit $d \rightarrow \infty$
- 4.4 Optical Conductivity for the Bethe Lattice
- 4.5 Generalizations
- 4.6 QMC Results for the Bethe Lattice
- 4.7 Conclusion

5 Realistic Modeling of Strongly Correlated Materials

- 5.1 $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{TiO}_3$
- 5.2 DFT and LSDA
- 5.3 LDA+DMFT
- 5.4 Results for $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{TiO}_3$
- 5.5 Conclusion

Summary

- A Additions to “Models and Methods”
- B Hyperdiamond Lattice
- C Fourier-Transforming Imaginary-Time Green Functions
- D Linear Response to Electromagnetic Fields