

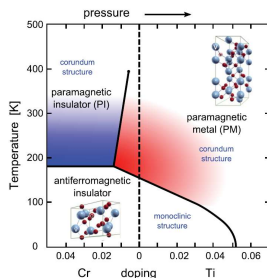
4. Plenum - Das fermionische Hubbardmodell in einer Dimension: Hubbardringe

Dipl.-Ing. Thomas Schäfer

22. Jänner 2015

Korrelierte Elektronen

Prototypisches Phänomen von korrelierten Elektronensystemen:
Mott-Hubbard-Übergang in V_2O_3 ¹



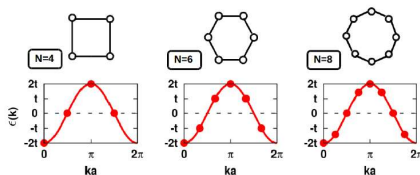
kein Bandisolator, wichtig ist vielmehr die Konkurrenz von
kinetischer und **potentieller** Energie von Elektronen

¹aus Phys. Status Solidi B. Doi: 10.1002 / pssb.201248476 (2013)

Hubbardmodell, einfachster Fall

- ▶ eindimensional, endlich mit periodischen Randbedingungen
- ▶ rein lokale Elektron-Elektron-Wechselwirkung

⇒ Hubbardringe²

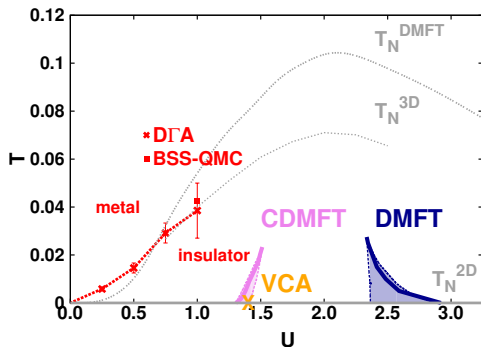


$$H = H_0 + H_1 = -t \sum_{j\sigma} (a_{j,\sigma}^\dagger a_{\text{mod}[j,M]+1,\sigma} + a_{\text{mod}[j,M]+1,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}) + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

²aus Angelo Valli, TS, GR, KH, AT et al., arXiv:1410.4733 (2014)

Einfaches Modell, aber schwierig zu lösen...

- ▶ ... für $U, t > 0$ und beliebige Dimensionen d
- ▶ mit dynamischer Molekularfeldtheorie (DMFT) und deren Erweiterungen (z.B. dynamischer Vertexapproximation (D Γ A)) sind Phasendiagramme ($T, U/t$) berechenbar



hier für 2D und halbe Füllung, aus TS, GR, KH, AT et al., arXiv:1405.7250

Plenum: Das fermionische Hubbardmodell
in einer Dimension

caj ein Elektron: um 1-Teilchenport von A ables (H_0)

$$H_0 = -t \sum_{j\sigma} (a_{j\sigma}^\dagger a_{\text{mod}(j+1, N)} + a_{\text{mod}(j+1, N)}^\dagger a_{j\sigma})$$

H_0 nicht diagonal in Ortsbasis, Diagonalisierung durch

Basis transformationen: $a_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_k}} \sum_k e^{ikj} c_{k\sigma}$

+ periodische Randbedingungen: 

$$\Rightarrow e^{ik4} = e^{ik0} = 1 \Rightarrow k = \frac{2\pi}{4} n, n \in \mathbb{Z}$$

erlaubte Werte für k in 1. Brillouinzone: $k \in \{-\pi/2, 0, \pi/2, \pi\}$

$$H_0 = -t \frac{1}{N_k} \sum_{j\sigma} \sum_{kk'} (e^{-ikj} e^{ik'(j+1)} + e^{-ik'(j+1)} e^{ikj}) c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} = \Rightarrow N_k = 4$$

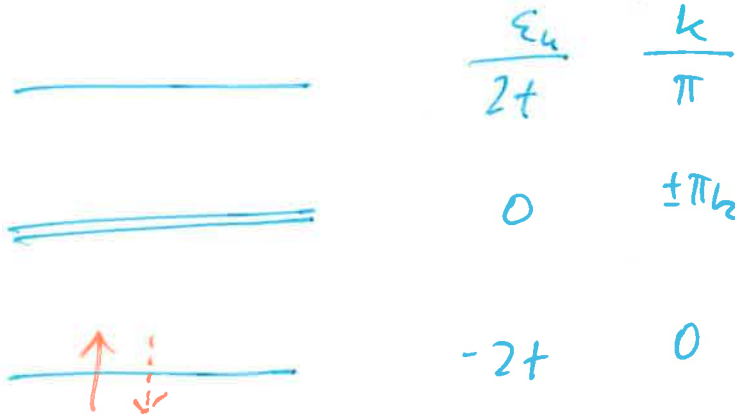
$$= -t \sum_{\sigma} \sum_{kk'} (e^{ik'} c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} \underbrace{\frac{1}{N_k} \sum_j e^{i(k'-k)j}}_{\delta_{k'k}} + \text{h.c.}) =$$

$$= -t \sum_{k\sigma} (e^{ik} + e^{-ik}) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} = -2t \sum_{k\sigma} \cos(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$$

\Rightarrow Dispersionsrelation

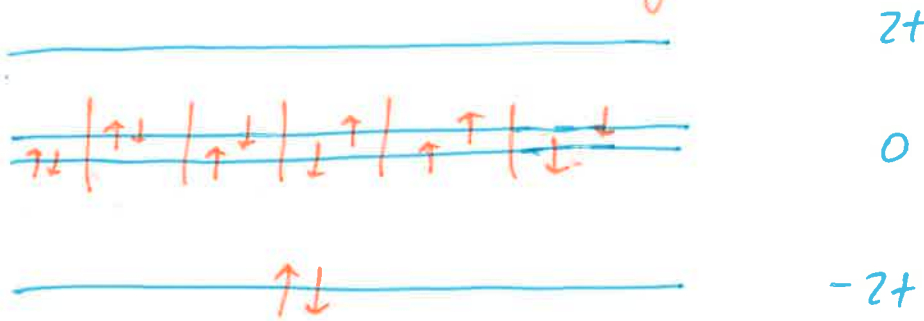
$\epsilon_k = -2t \cos(k), k \in \{-\pi/2, 0, \pi/2, \pi\}$

⇒ Einzelteilchen wie aus: füllung mit $1e^-$



⇒ Grundzustandsenergie $E_0 = -2t$, zweifach entartet

b) unkorreliertes System: füllung mit $4e^-$



⇒ Grundzustandsenergie $E_0 = -4t$, sechsfach entartet

c) absonner lines: um Zweiteilchen wechselwirkend aktiv

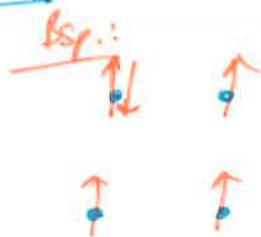
→ $H_1 = U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$, $U > 0 \Rightarrow$ Doppelbesetzung soll vermieden werden

i) $4e^-$



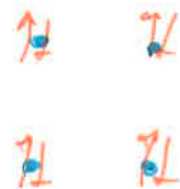
$E_0 = 0$, 2^4 -fach entartet

ii) $5e^-$



$E_0 = U$, $4 \cdot 2^3$ -fach entartet

iii) $8e^-$



$E_0 = 4U$, nicht entartet 2/4

cd, $u_d = \frac{1}{4} \sum_j u_{jT} u_{j\downarrow}$

für ca: nur 1 Teilchen \Rightarrow keine Doppelbesetzung möglich

$\Rightarrow \langle u_d \rangle = 0$

für cb: unkommutierendes System:

$\langle u_d \rangle = \frac{1}{4} \sum_j \langle u_{jT} u_{j\downarrow} \rangle = \frac{1}{4} \sum_j \langle u_{jT} \rangle \langle u_{j\downarrow} \rangle$

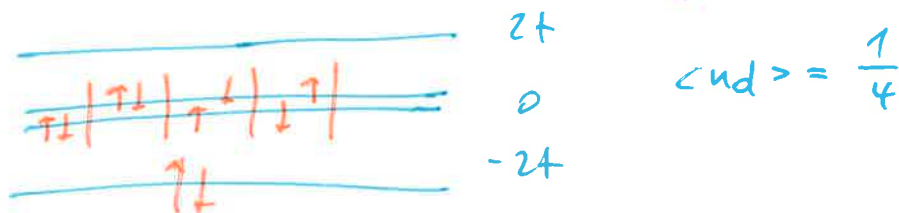
translation invariant:

$\langle u_d \rangle = \frac{1}{4} [\langle u_{1T} \rangle \langle u_{1\downarrow} \rangle + \langle u_{2T} \rangle \langle u_{2\downarrow} \rangle + \langle u_{3T} \rangle \langle u_{3\downarrow} \rangle + \langle u_{4T} \rangle \langle u_{4\downarrow} \rangle] =$

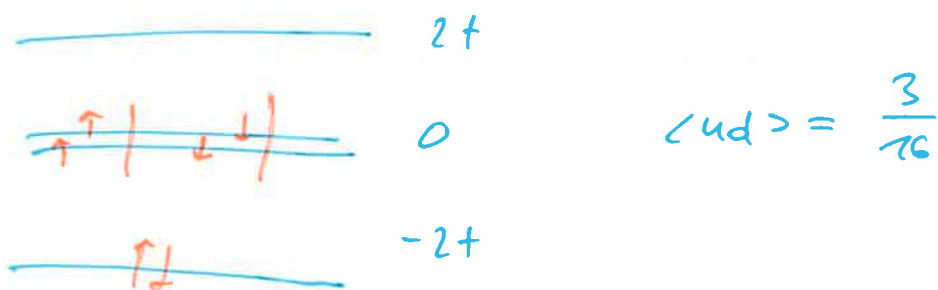
$= \langle u_{jT} \rangle \langle u_{j\downarrow} \rangle = \frac{\langle N_T \rangle}{M} \frac{\langle N_{\downarrow} \rangle}{M} = \frac{1}{16} \langle N_T \rangle \langle N_{\downarrow} \rangle$

Gesamtanzahl an ↑-Spins
im System

\Rightarrow für die Grundzustandskonfigurationen



für



für ϵ_1 : Operator diagonal in Ortsbasis

$4e^-$: $\begin{array}{cc} \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow \end{array} \Rightarrow \langle ud \rangle = 0$

$5e^-$: $\begin{array}{cc} \uparrow\downarrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow \end{array} \Rightarrow \langle ud \rangle = \frac{1}{4}$

$8e^-$: $\begin{array}{cc} \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow \\ \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow \end{array} \Rightarrow \langle ud \rangle = \frac{4}{4} = 1$

e, bei a_1 : keine Ändg (nur 1. Teilchen)

bei b_1 : keine Ändg (nur Ho. dktio)

bei ϵ_1 : Paarbildung energetisch günstiger

$4e^-$

$5e^-$

$8e^-$



$\rightarrow E_0 = -2|U|$

$E_0 = -2|U|$

$E_0 = -4|U|$

6-fach entartet

24-fach entartet

11-fach entartet

bei cd_1 : analog zu ϵ_1

$4e^-$

$5e^-$

$8e^-$

$\langle ud \rangle = \frac{1}{2}$

$\langle ud \rangle = \frac{1}{2}$

$\langle ud \rangle = 1$