

MOČNO KORELIRANI ELEKTRONI

("fringe subject" do odkritja Hc superprevodnikov leta 1986)
 V nekaterih primerih obravnava v okviru efektivnih modelirnih opisov povsem odpove. Gibanje vsakega elektrona je močno odvisno od podrobnega gibanja vseh ostalih elektronov. Teorija pasov in približek povprečnega polja nista adekvatna, uporabljajo se metode večdelne kvantne fizike in teorije polja. Osnovno stanje ni vedno adiabatsko povezano s Fermijevim plinom: sistem gre do vklapljanja interakcije lahko skozi kvantni fazni prehod v razne bolj ali manj eksotične faze. Emergenčni pojavi; nepričakovano kolektivno obnašanje na večjih skalah.

Pogosto je potrebna numerična obravnava, včasih kar brute-force simulacije (QMC). Pogosto obkroža več nizkoenergijstih stanj (bias!).

Pogosto ni jasno, ali je boljša obravnava v realnem ali v recipročnem prostoru, ker ima sistem značilnost tako valovnega kot korpuskularnega obnašanja (teknovanje med členi/procesi, ki favorizirajo delokalizacija ali lokalizacijo elektronov).
 $[H_{kin}, H_{pot}] \neq 0$

SEMINARSKA: sinetijske lastnosti Hubbardovega modela

1. HUBBARDOV MODEL IN MOTTOV PREHOD

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

$$U_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \quad U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{|\phi(\mathbf{r})|^2 |\phi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

4 stanja na vsakem mestu: $\emptyset, \uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow$.

Najbolj zanimivo pri polovični zasedenosti, $\langle n_i \rangle = 1$.

Limitna primera:

- atomski limita, $t=0$. En elektron na vsakem mestu.

Poljubna spinska konfiguracija, $\deg = 2^N$ (N število mest).
 C, LOČENI MOMENTI

Prvo vzburjeno stanje: eno prazno mesto + eno dvojno zasedeno.

$$\Delta E = U, \quad \deg = 2^{N-2} N(N-1)$$

To je izolater.



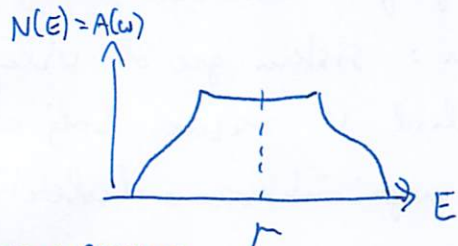
spektralna funkcija
 (posplošitev pojma gostote stanj)

- pasovna limita, $U=0$

$$\text{F.T.: } C_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}\sigma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Rightarrow H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}\sigma}$$

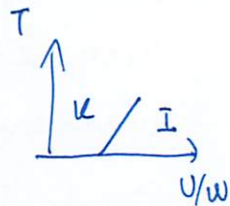
$$\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} = -t \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}+\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} = -2t (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad \text{za kubično mrežo}$$

To je kurina s pasovno širino $W=2D=12t$.



MOTTOV PREHOD

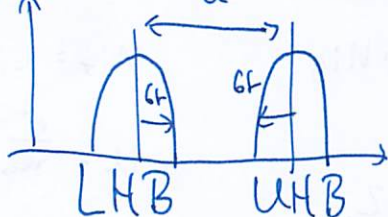
Med obema limitama pride do Mottovega prehoda med kovinsko in izolatorsko fazo. V eksperimentih lahko to dosežemo s spreminjanjem tlaka, ki vpliva na kinetično energijo (širino pasu). Ni preprosto definirane parametra u, ne gre za prehod med "mrežno" in "nemrežno" fazo. Kvantni fazni prehod.



IZOLATORSKO STANJE $t \ll U$

Če $t \neq 0$, sta prazno (holan) in dvojni zasedeno stanje (dublet) mobilni. $E_{\mathbf{k}, \uparrow\downarrow} = U + \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} > U - 12t$

$A(\omega)$ U Hubbardova pasova



V resnici sta pasova odširjena od D , kar premlajajoči holan in dublet spreminjata spinsko konfiguracijo ozadja, kar ima za $t \neq 0$ neko energijsko ceno. $\exp(\ln g \sum_i \hat{D}_i)$ Di je 0 ali 1

KOVINSKO STANJE

Gutzwillerjev približek. $|\psi\rangle = g^{\hat{D}} |FG\rangle = \prod_i [1 - (1-g)\hat{D}_i] |FG\rangle$

Gostote: 1 celotna
 $S_\uparrow$ 1x zasedenost, $\sigma = \uparrow$
 $S_\downarrow$ -1x, $\sigma = \downarrow$
 d dvojna zasedenost
 h nezasedena mesta

$$S_\uparrow = S_\downarrow = S/2$$

$$1 = S + 2d$$

$g=1 \rightarrow$ ni učinka

$g=0 \rightarrow$ dvojno zasedena stanja prepovedana

Ideja približna je, da so verjetnosti za skoke "nenormalizirane" zaradi elektonskih korelacij. (2.)

$i \rightarrow j$, $s \vee \emptyset$ Gledamo procese, pri katerih se d ne spremeni.

$$P(\uparrow 0) + P(\downarrow 0) = g_f [P_0(\uparrow 0) + P_0(\downarrow 0)]$$

$\uparrow$ za nekoreliran sistem

$$P(\uparrow 0) + P(\downarrow 0) = s_h = s_d = d(1-2d)$$

$$P_0(\uparrow 0) = u_{ir}(1-u_{ir})(1-u_{jr})(1-u_{jd}) = 1/16$$

$$g_f = 8d(1-2d)$$

$$t \rightarrow g_f t$$

Elektrone potem smatramo kot proste, vendar z renormiranim $g_f t$.

$$E(d) = g_f \epsilon_{\text{fin}} + U_d = 8d(1-2d) \epsilon_{\text{fin}} + U_d \quad \epsilon_{\text{fin}} = \frac{1}{N} \int_{-D}^0 d\epsilon \epsilon N(\epsilon)$$

$$\frac{\partial E}{\partial d} = 0 \Rightarrow d = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{U}{U_c} \right) \quad g_f = 1 - \left(\frac{U}{U_c} \right)^2 \quad U_c = 8|\epsilon_{\text{fin}}| \approx 25t \sim 4D$$

Pri $U > U_c$ ni več dvojne zasedenosti, elektroni postanejo lokalizirani. To je "Brinkman-Riceov scenarij". g_f predstavlja tudi residuum Z v F.L., velja tudi $m^*/m = Z^{-1}$.

KOVINE vs. IZOLATORJI

Razlika shogo definirana samo v limiti $T \rightarrow 0$. "Kovina prevaja, izolator ne prevaja" (Mott!).

$$j(\vec{q}, \omega) = \sigma(\vec{q}, \omega) E(\vec{q}, \omega)$$

$$\sigma^{DC}(T=0) = \lim_{T \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \text{Re} \{ \sigma(\vec{q}, \omega) \}$$

Prevodnost σ se računa s formalizmom linearnega odziva (Lubova formula za odziv toč-toč). Računamo dvoelctone lastnosti, propagacijo para elektron-vrzel, pri fiksnem celotnem številu elektronov. Sistem je prevoden, če:

- 1) obstajajo vzklidne elektron-vrzel pri energiji: hč nad energijo osnovnega stanja (zaradi limite $\omega \rightarrow 0$),
- 2) vzklidne so delokalizirane preko celotnega vzorca.

Očitajno to želimo reducirati na vprašanje modelčnih lastnosti (gostoto stanj). To je možno samo, če ni korelacij med delci in vrzelmi. Tedaj je edini pogoj drstoj energijske reže v splošnem modelčnih vzledikev (gostoti stanj).

Včasih to ne deluje. Primer: superprevodnik ima gap, ampak ni izdator, temveč idealen prevodnik! To je posledica parske sklopitve med elektroni.

Definiramo:

$$\mu^+ = E_0(N+1) - E_0(N)$$

$$\mu^- = E_0(N) - E_0(N-1)$$

$$\Delta_d = \mu^+ - \mu^- \quad \text{nabojna energijska reža}$$

V izdatorjih pričakujemo dnošanje $P\{\sigma(k, T \ll \Delta_d)\} \sim e^{-\frac{\Delta_d}{2k_B T}}$.
Tako lahko zaznamo izdatorsko stanje pri zadostni vižli T , čeprav shogo definirano samo za $T=0$.

Pasovni izdator: $\mu^- = \epsilon_F$, $\mu^+ = \epsilon_F + \Delta$ $\Rightarrow \Delta_d = \Delta$

Kalina: $\mu^- = \epsilon_F$, $\mu^+ = \epsilon_F$ $\Rightarrow \Delta = 0$

Andersonova lokalizacija: $N(\epsilon_F) \neq 0$, vendar $\sigma^{DC}(T=0)$ zaradi lokalizacije modelčnih stanj v naključnem potencialu.

LIEBOV IZREK

Osnano stanje Hubbardovega modela na bipartitni mreži z enakim številom mest v obeh podmrežah je nedegeneriran singlet.

Torej ni kizanja vivojov pri nobeni vrednosti U . Adiabatska prežanost omarega stanja pri $U=0$ in velikem U .

Torej mora nujno priti do neke (magneke) kreditive v singletno stanje, pri kateri se odpravi degeneracija 2^N .

To obravnavamo v poglavju o magnetizmu.

MATERIALI, ki so MOTTOVI IZOLATORJI

- oksidi prehodnih kovin, VO_2 , V_2O_3 , Ti_2O_3 , CoO , NiO
- kuprati, YBCO ("parent compound")
- iodati: Sr_2IrO_4 , močan SOC, uari magnetni pojavi
- organski materiali: BEDT-TTF, Bedgandone soli

Kuprati H_{Tc} superprevodniki so degenerirani Mottovi izolatorji.

MOTTNESS

$$C_{i\sigma} = C_{i\sigma} (1 - n_{i\bar{\sigma}}) + C_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} = \{i\sigma + \eta_{i\sigma}$$

$\nwarrow$ anihilira e^- na 1x zasedenih mestih
 $\nearrow$ anihilira e^- na 2x zasedenih mestih

Velja $\hat{U}_{i\sigma}^2 = \hat{n}_{i\sigma}$. Zato $n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}^2 = C_{i\uparrow}^\dagger n_{i\downarrow}^2 C_{i\uparrow} = \eta_{i\uparrow}^\dagger \eta_{i\uparrow}$

Torej $H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\eta_{i\sigma}^\dagger \eta_{j\sigma} + \xi_{i\sigma}^\dagger \xi_{j\sigma} + \eta_{i\sigma}^\dagger \xi_{j\sigma} + \xi_{i\sigma}^\dagger \eta_{j\sigma}) + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} \eta_{i\sigma}^\dagger \eta_{i\sigma}$

Amper: $\{\eta_{i\alpha}, \xi_{j\beta}\} = \delta_{ij} C_{i\alpha} C_{j\alpha}$ vs $\{C_{i\alpha}, C_{j\beta}^\dagger\} = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}$

$$\{\eta_{i\alpha}, \eta_{j\beta}^\dagger\} = \delta_{ij} (n_{i\bar{\alpha}} \delta_{\alpha\beta} - C_{i\beta}^\dagger C_{i\alpha} \delta_{\alpha\bar{\beta}})$$

$$\{\xi_{i\alpha}, \xi_{j\beta}^\dagger\} = \delta_{ij} [(1 - n_{i\bar{\alpha}}) \delta_{\alpha\beta} + C_{i\beta}^\dagger C_{i\alpha} \delta_{\alpha\bar{\beta}}]$$

$$\{\eta_{i\alpha}, \eta_{j\beta}\} = \{\xi_{i\alpha}, \xi_{j\beta}\} = \{\xi_{i\alpha}, \eta_{j\beta}^\dagger\} = 0$$

Kinetični člen eksplicitno vsebuje delujočo in lokalno zasedeno seštevko.

Pozornost tudi v limiti $t=0$:

$$\langle \{C_{i\sigma}, C_{i\sigma}^\dagger\} \rangle = 1 \rightarrow \text{tako pustimo stanja v pasu}$$

$$N_{\text{HVB}} = \frac{1}{N} \sum_{i\sigma} \langle \{\xi_{i\sigma}, \xi_{i\sigma}^\dagger\} \rangle = 2 - n = 1 + x \quad u = 1 - x$$

$\uparrow$ št. vrzeli v

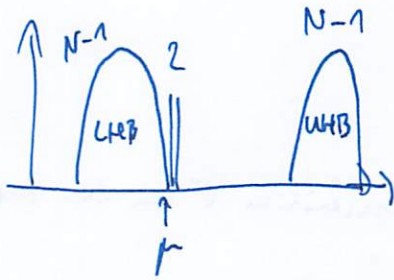
$$N_{\text{HVB}} = 2 - N_{\text{HVB}} = u = 1 - x$$

Število stanj v pasu je odvisno od zasedenosti pasu!

V pasovnih izolatorjih je št. stanj v pasu neodvisno od μ .

V Hottanem problemu niti pri $t=0$ energijska neta ni definirana z modeliranskimi operatorji.

Ustvarimo eno vrzel. Potem je $N-1$ načinov, da odstranimo še en elektron, in $N-1$ načinov, da ustvarimo $2\times$ zasedeno stanje. Preostali dve stanji ustrezata dvema možnima spinoma za elektrona, ki ga lahko damo na prazno mesto. To ne stane nič energije, zato ti dve stanji hitro nad $N-1$ stanji spodnjega pasu.



2. NĚ-FERMIEVĚ TEKOČINĚ

Korinska stanja, lejer omare vzklnditve, ki prenašajo naboj, niso kvazidelci. ^{inverzni} Šipalni čas τ^{-1} gre proti 0 počameje kot $(\epsilon - \epsilon_F)^2$. ^{$z \rightarrow 0$} # Temperaturna odvisnost prevodnosti ni kvadratna.

Primeri: kuprati v normalni fazi, sistemi s kćkimi elektoni v blćžini kvantnih faznih prehodov.

Področje v razvoju. V zadnjem desetletju veliko raziskav v smeri povezav med većdelćnimi sistemi in gravitacijskimi teorijami: dualnost "gauge/gravity" ali AdS/CFT ali hologrfska dualnost. Teži većdelćni problemi se preslikajo na mrtane probleme klasićne gravitacije.

ĆUDNE KOVINE:

$\rho \propto T$ na zelo širokem temperaturnem obmoćju, vćasih do kalitća. Universalno v vseh kupratih. Najbolj izrazito v primerih z najvišjim T_c . Eksperiment kaže, da Fermijeva površina se vedno obstaja, vendar so vzklnditve veliko manj dolgožive.

Marginalna Fermijeva tekoćina:

$$G_R(\omega, \epsilon) = \frac{\hbar}{\omega - \epsilon \sqrt{\epsilon - \epsilon_F} + i\Gamma(\omega, \epsilon)}$$

$$\Sigma(\omega, \epsilon) \sim \begin{cases} \omega \log \omega & \text{d} \\ \omega & \text{c realni} \end{cases}$$

Tako kratkožive vzklnditve, da razpadajo še preden bi bil razviden njihov valovni znaćaj.

$$\tau \sim \frac{1}{\log(\epsilon - \epsilon_F)} \rightarrow \text{ni već choba v } \langle n_e \rangle, \text{ samo velika singularnost}$$

PLANCKOVĚ KOVINE: $\tau \sim \frac{\hbar}{k_B T}$ v škilnih ćudnih kovinah

Morda kaže na universalnost. To je najbližjša moćna disipacija, ki jo dopušća kvantna mehanika.

3. LIMITA MOTT-IOFFE-REGEL IN SLABE KOVINE

Kaj se zgodi, ko postane povprečna prosta pot $l = v_F \tau$ primerljiva s Fermijev valovno dolžino λ_F oz. z medatomsko razdaljo a ?
Koncept transporta s kvantiteta se spremeni. Pričakujemo spremembo električne prevodnosti. Temo rečemo Mott-Ioffe-Regelov limit.

Dimenzijska analiza: $\rho_Q = \frac{h}{e^2} [a_B]^{d-2}$ "kvantna enota za upornost"

$$\rho = \rho_Q R \quad R = R\left(\frac{l}{a}, \frac{T}{T_F}, \dots\right)$$

$R \rightarrow \infty$ izolator
 $R \rightarrow 0$ idealna kovina
 $R \sim 1$ običajne kovine

$$\rho_{2D} = 25,8 \text{ k}\Omega$$

$$\rho_{3D} = 136,6 \text{ }\mu\Omega\text{cm}$$

Slabe kovine so materiali, pri katerih $\rho \gg \rho_Q$. Pogosto $\rho \propto T$ v tem območju. Primer so legirani. Nezdrumljivo z obstojem kvantiteta.
Če ni nobenega znaka spremembe v temperaturni odvisnosti, potem tudi za $\rho < \rho_Q$ pričakujemo razlago, po kateri toka ne prenašajo kvantiteta.

Mottovi sistemi (Hubbardov model) so slabe kovine.

Pri zelo nizkih temperaturah Fermijeva telesčina.

Pri višjih temperaturah "trdoživi kvantiteta", ki niso Landauovega tipa. Vse do $\rho \sim \rho_Q$.

Pri najvišjih temperaturah posamezno kolektivno obnašanje.