

2.1 Teilprojekt 7

Thema

Quanten-Monte-Carlo-Simulationen

Leiter

Priv.-Doz. Dr. Michael Dzierzawa, Prof. Dr. Alejandro Muramatsu (ab 4/96 Universität Stuttgart)

Beteiligte Wissenschaftler

Dr. Rudolf Staudt

Zusammenfassung

Ziel dieses Teilprojekts war es, mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo(QMC)-Simulationen des dreidimensionalen Hubbardmodells zu untersuchen, welche Rolle elektronische Korrelationen für den den Metall-Isolator-Übergang in V_2O_3 und anderen Übergangsmetall-Chalkogeniden spielen. Weiterhin sollte ein Vergleich der – im Prinzip – exakten QMC-Resultate mit verschiedenen approximativen Methoden, insbesondere mit der Dynamischen Molekularfeldtheorie (DMFT), Aufschlüsse über die Zuverlässigkeit dieser Methoden erbringen.

Bereits in der ersten Förderperiode wurde mit Hilfe von QMC-Daten für die Spinkorrelationsfunktion für große Abstände das magnetische Phasendiagramm des dreidimensionalen Hubbardmodells mit einer Genauigkeit berechnet, die weit über diejenige früherer QMC-Simulationen hinausging. Es zeigte sich dabei, daß die in diesen Arbeiten berechneten Néeltemperaturen als bei weitem zu hoch angesehen werden muß, was hauptsächlich an den zu kleinen Systemen liegen dürfte, die in diesen Untersuchungen verwendet wurden.

In der zweiten Förderperiode ist es gelungen, die magnetische Phasengrenze unter Verwendung der spezifischen Wärme mit erheblich besserer Genauigkeit zu bestimmen. Die beiden Methoden – magnetischer Strukturfaktor zum einen und spezifische Wärme zum anderen – ergaben im Rahmen der numerischen Genauigkeit übereinstimmende Resultate und bestätigten sich somit gegenseitig. Darüber hinaus konnte auch der Metall-Isolator-Übergang in der paramagnetischen Phase oberhalb der Néel-Temperatur quantitativ untersucht werden. Hierbei haben wir uns auf die elektronische Kompressibilität gestützt, da sich die Berechnung der DC-Leitfähigkeit (mit der erforderlichen Genauigkeit) als zu aufwendig erwies.

Ergebnisse

Im Phasendiagramm von V_2O_3 finden sich oberhalb einer antiferromagnetisch geordneten Tieftemperaturphase sowohl eine metallische und als auch eine iso-

lierende paramagnetische Phase. Der Übergang zwischen diesen beiden Phasen wird allein durch äußeren Druck bewirkt, welcher zu einem größeren Überlapp der atomaren Orbitale benachbarter Atome und somit auch zu einem größeren Hüpfmatrixelement der Elektronen führt. Es liegt daher nahe, diesen Metall- Isolator-Übergang als klassischen Mott-Hubbard-Übergang zu interpretieren. Das Ziel des Teilprojekts war es, mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo-Simulationen das Phasendiagramm des dreidimensionalen Hubbard-Modells zu bestimmen, und zu untersuchen, inwieweit sich Parallelen zu dem experimentell beobachteten Phasendiagramm von V_2O_3 ergeben. Für die QMC-Simulationen wurde der von Hirsch entwickelte Determinanten-Algorithmus [1] verwendet, mit dem man beliebige Erwartungswerte, insbesondere statische und dynamische Korrelationsfunktionen bei endlichen Temperaturen berechnen kann. Die QMC-Simulationen waren sehr rechenzeitaufwendig, insbesondere für die großen Systeme von 8^3 und 10^3 Plätzen. Hier wurden typischerweise 1000 Warmup-Sweeps (ohne Messungen) und ca. 300 Messungen im Abstand von je 20 Sweeps durchgeführt. Eine einzige solche Simulation beanspruchte in etwa 600 Stunden CPU-Zeit auf dem 52-Knoten-Parallelrechner.

In der ersten Förderperiode wurde die Phasengrenze zwischen dem nichtmagnetischen Bereich oberhalb der Néel-Temperatur T_N und der antiferromagnetisch geordneten Phase durch Extrapolation des magnetischen Strukturformfaktors $S(\mathbf{Q})$ zu unendlich großen Systemen hin bestimmt. Dazu wurden Simulationen auf Gittern von $N = 4^3$ bis 12^3 Plätzen durchgeführt. Angesichts der Schwierigkeiten, welche mit der Finite-Size-Extrapolation des Strukturformfaktors verbunden waren, war es ratsam, die so bestimmte Phasengrenze mit Hilfe einer unabhängigen Größe zu überprüfen. Wir haben dazu die spezifische Wärme verwendet, welche wir aus den (extrem genauen) QMC-Daten für die Energie gemäß $c_V = \partial E / \partial T$ berechnet haben. Um die bei naivem numerischen Differenzieren auftretenden Fehler zu reduzieren, haben wir eine Maximum-Entropie-artige Methode verwendet, bei der a-priori-Informationen (z.B. daß die spezifische Wärme positiv ist) ausgenutzt werden. Aus dem bei endlichen Systemen auftretenden Maximum der spezifischen Wärme entwickelt sich im thermodynamischen Limes eine Singularität, welche den Phasenübergang kennzeichnet. Im Gegensatz zum magnetischen Strukturformfaktor erwiesen sich die Finite-Size-Korrekturen beim Maximum der spezifischen Wärme als relativ unproblematisch, wodurch die Genauigkeit bei der Bestimmung von T_N erheblich gesteigert werden konnte. Das aus diesen Daten gewonnene magnetische Phasendiagramm des dreidimensionalen Hubbardmodells ist in Abb. 7. 1 dargestellt. Zum Vergleich sind neben unseren Daten auch die Resultate aus früheren QMC-Simulationen, sowie einige Näherungen und Grenzfälle eingezeichnet.

Der eigentliche Mott-Hubbard-Übergang kann nur im Temperaturbereich oberhalb der antiferromagnetisch geordneten Phase untersucht werden. Wenn die Wechselwirkungsstärke U einen kritischen Wert übersteigt, erwartet man einen – sprunghaften oder kontinuierlichen – Übergang von einem paramagnetischen

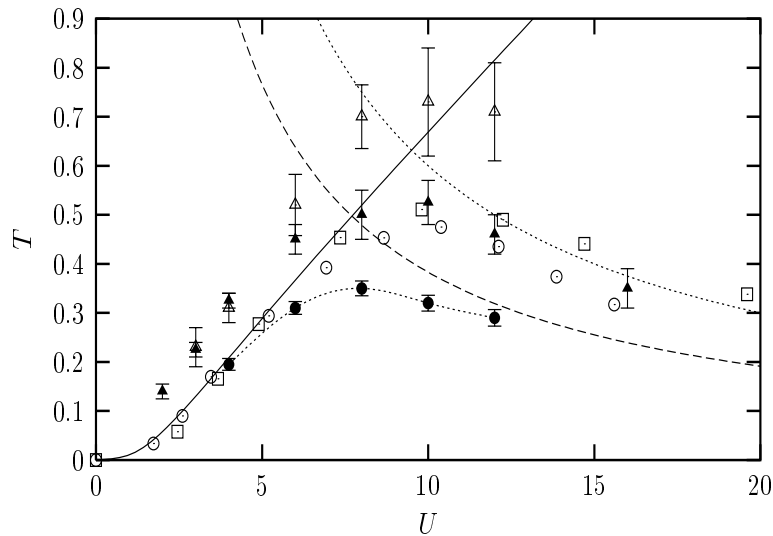


Abbildung 7. 1: Magnetisches Phasendiagramm des halbgefüllten Hubbardmodells: eigene QMC-Resultate (schwarze Kreise), QMC [1] (weiße Dreiecke), QMC [2] (schwarze Dreiecke), DMFT [3] (weiße Kreise), DMFT [4] (weiße Quadrate), modifizierte Hartree-Fock-Theorie [5] (durchgezogene Kurve), Heisenberglimites, $T_N = 3.83t^2/U$ (gestrichelte Kurve), Weiss'sche Molekularfeldtheorie, $T_N^{mf} = 6t^2/U$ (gepunktete Kurve).

Leiter zu einem paramagnetischen Isolator [6]. Die Berechnung der Leitfähigkeit mittels QMC-Simulationen erfordert nicht nur die Berechnung von dynamischen Strom-Strom-Korrelationsfunktionen, sondern auch deren analytische Fortsetzung hin zu reellen Frequenzen (mit der Maximum-Entropie-Methode) sowie Sorgfalt bei den Grenzübergängen $\omega \rightarrow 0$ und $L \rightarrow \infty$. Um diesen Schwierigkeiten aus dem Weg zu gehen, haben wir uns bei der Untersuchung des Mott-Hubbard-Übergangs auf die elektronische Kompressibilität $\kappa = \partial n / \partial \mu$ gestützt. Dies ist insofern zulässig und sinnvoll, als bei einem korrelationsgetriebenen Metall-Isolator-Übergang – anders als etwa beim unordnungsinduzierten Anderson-Übergang – eine Ladungsanregungslücke auftritt, welche nicht nur zu einem Verschwinden der Leitfähigkeit sondern auch der elektronischen Kompressibilität führt. Glücklicherweise kann die Teilchendichte $n(\mu)$ und somit κ mittels QMC-Simulationen sehr präzise berechnet werden, vorausgesetzt man bleibt nahe genug bei halber Bandfüllung, um das Minuszeichenproblem zu vermeiden. Abb. 7. 2 zeigt die Teilchendichte in Abhängigkeit von μ für einige Werte von U . Aus diesen Daten ist die Kompressibilität berechnet, die in Abb. 7. 3 als Funktion der Wechselwirkungsstärke U dargestellt ist.

Man sieht, daß der Metall-Isolator-Übergang etwa im Bereich $U \simeq 9 - 11$ stattfindet. Es gibt keine Anzeichen für einen scharfen oder gar sprunghaften Übergang, es handelt sich eher um eine Art cross-over, wie er auch im Rahmen

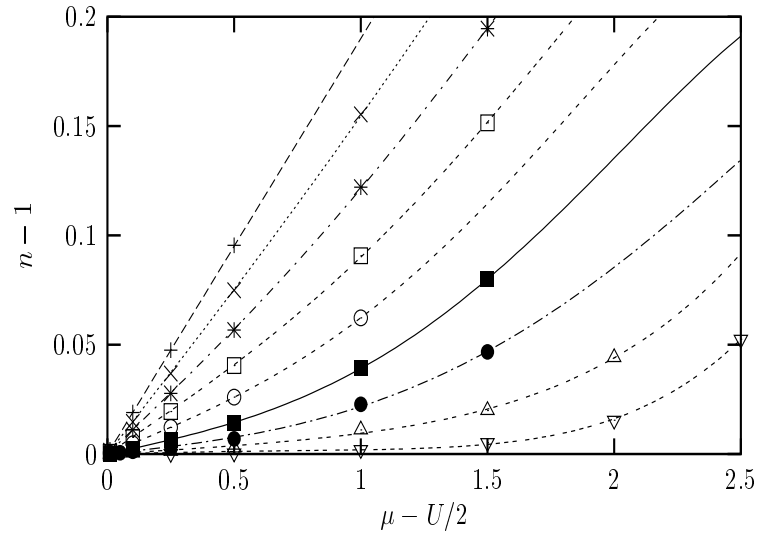


Abbildung 7. 2: Teilchendichte n als Funktion des chemischen Potentials μ für $U = 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12$ (von oben nach unten), $T = 0.45$ und $L = 4$.

der DMFT für genügend hohe Temperaturen vorhergesagt wird [7]. Der Übergang erster Ordnung, den DMFT-Rechnungen für antiferromagnetisch frustrierte Systeme bei tiefen Temperaturen prognostizieren, ist offensichtlich beim einfachen kubischen Hubbardmodell durch die antiferromagnetische Tieftemperaturphase maskiert und würde erst durch Frustration derselben, etwa durch zusätzliches langreichweitiges Hüpfen, in Erscheinung treten.

Eine ausführliche Dokumentation der in diesem Teilprojekt durchgeführten Arbeiten unter besonderer Berücksichtigung von Details der Implementierung und numerischen Auswertung findet man in der Dissertation von Dr. R. Staudt [8]. Darüber hinaus wurden die Resultate in [9] und [10] veröffentlicht.

Kooperationen

Bei unseren Untersuchungen im Zusammenhang mit der DMFT haben wir sehr von der Zusammenarbeit mit den Mitarbeitern von Prof. D. Vollhardt am Lehrstuhl für Theoretische Physik III der Universität Augsburg profitiert.

Literaturhinweise

- [1] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **35**, 1851 (1987).
- [2] R. T. Scalettar, D. J. Scalapino, R. L. Sugar und D. Toussaint, Phys. Rev. B **39**, 4711 (1989).
- [3] M. Jarrell, Phys. Rev. Lett. **69**, 168 (1992).

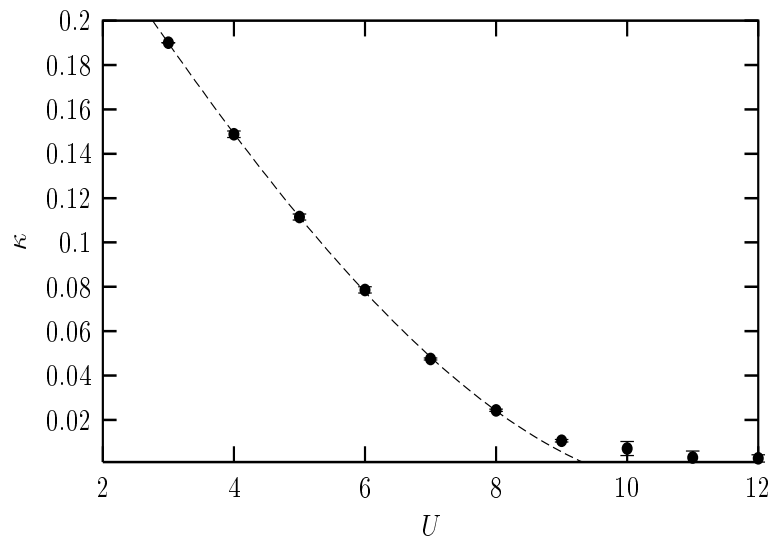


Abbildung 7. 3: Elektronische Kompressibilität κ in Abhängigkeit von U .

- [4] M. Ulmke, V. Janis und D. Vollhardt, Phys. Rev. B **51**, 10411 (1995).
- [5] P. G. J. van Dongen, Phys. Rev. Lett. **67**, 757 (1991); Phys. Rev. B **50**, 14016 (1994).
- [6] N. F. Mott, *Metal Insulator Transitions*, Taylor & Francis 1974.
- [7] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth und M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [8] R. Staudt, Dissertation, Univ. Augsburg (1999).
- [9] R. Staudt, M. Dzierzawa und A. Muramatsu, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, SI-249 (1999).
- [10] R. Staudt, M. Dzierzawa und A. Muramatsu, Eur. Phys. J. B **17**, 411 (2000).