University of Groningen

Metal-insulator transitions and strong electron correlations

Michielsen, Kristel Francine Lucia

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

1993

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Michielsen, K. F. L. (1993). *Metal-insulator transitions and strong electron correlations*. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

Samenvatting

Vaste stoffen bevatten veel elektronen. Deze elektronen bewegen niet onafhankelijk van elkaar maar gecorreleerd. Het bestuderen van effecten veroorzaakt door correlaties tussen elektronen vormt een grote uitdaging in de vaste stof fysica.

Om de correlaties tussen elektronen in materialen te beschrijven wordt een model opgesteld waarbij zoveel mogelijk details over de materialen worden vermeden. Van dit model wordt verlangd dat het de belangrijkste materiaaleigenschappen weergeeft waarvoor correlaties tussen elektronen belangrijk zijn. Enkele voorbeelden van deze eigenschappen zijn het magnetisch, het supergeleidend en het al dan niet elektrisch geleidend karakter van het materiaal.

Het Hubbard model is een van de eenvoudigste modellen dat de correlaties tussen elektronen in rekening brengt. Dit model beschrijft de beweging van elektronen op een rooster. De roosterplaatsen stellen de posities voor van de atomen in de vaste stof die verondersteld wordt opgebouwd te zijn uit identieke atomen. De elektronen kunnen springen naar de naburige roosterplaatsen. De energie die hiermee gepaard gaat wordt de kinetische energie genoemd. Alleen wanneer twee elektronen (met tegengestelde spin) op eenzelfde roosterplaats zitten interageren ze met elkaar via de Coulomb potentiaal. De competitie tussen de kinetische en Coulomb energie geeft aanleiding tot sterke elektron-elektron correlaties. Ondanks het bestaan van een exacte oplossing voor het één dimensionale Hubbard model en een hele verzameling aan perturbatieve, variationele en numerieke berekeningen voor het één- en hoger dimensionale Hubbard model zijn de fysische gevolgen van deze competitie nog steeds niet volledig begrepen. De verkregen resultaten kunnen als volgt worden samengevat: Met het standaard Hubbard model kan magnetisme tengevolge van de ordening van elektronen niet beschreven worden. In het Hubbard model worden namelijk alleen antiferromagnetische correlaties over een grote afstand waargenomen als er gemiddeld één elektron per roosterplaats zit en het systeem een isolator is. Vele magneten zijn echter ferromagnetisch en elektrisch geleidend. Verder kan er niet aan de verwachting voldaan worden dat het Hubbard model in de grondtoestand een metaal-isolator overgang zou vertonen wanneer de repulsieve interactie tussen de elektronen toeneemt. Na de ontdekking van de hoge temperatuur supergeleiders werd gedacht dat het Hubbard model deze materialen zou kunnen beschrijven. Ook dit is niet het geval omdat alleen supergeleiding in het model optreedt voor een attractieve interactie tussen de elektronen. Alhoewel niet aan de bovenstaande verwachtingen kan voldaan worden, blijft het Hubbard model een zeer belangrijk model in het beschrijven van systemen van elektronen met sterke correlaties. Het model is waarschijnlijk te eenvoudig om de hoger genoemde collectieve effecten te kunnen beschrijven en misschien moeten nog andere interacties, dan de Coulomb interactie tussen twee elektronen die op dezelfde plaats zitten, worden toegevoegd.

Onlangs hebben Montorsi en Rasetti een uitbreiding op het Hubbard model voorgesteld. Net zoals het Hubbard model, beschrijft het Montorsi-Rasetti model

een systeem van elektronen die naar naburige roosterplaatsen kunnen springen en gekoppeld zijn door een Coulomb interactie wanneer twee elektronen met tegengestelde spin eenzelfde roosterplaats bezetten. Het verschil met het Hubbard model is dat in een eerste interpretatie van het Montorsi-Rasetti model, elektronen hun spin kunnen omkeren als ze van de ene roosterplaats naar de andere springen en dat de waarschijnlijkheid om een bepaalde plaats in te nemen afhangt van de bezetting van deze plaats. In een tweede interpretatie van het Montorsi-Rasetti model kunnen enkel elektronen met welbepaalde spin van de ene plaats naar de andere springen (zonder hun spin om te keren) waarbij de waarschijnlijkheid om een plaats in te nemen weer afhangt van de bezetting van deze plaats. De elektronen met tegengestelde spin kunnen zich nu echter niet verplaatsen.

In dit werk is een grondige studie gemaakt van de eigenschappen van het Montorsi-Rasetti model. Het is niet de bedoeling geweest de resultaten te vergelijken met resultaten van experimenten op materialen, maar wel om te kijken welke elektron-elektron interacties in een model moeten worden opgenomen om bepaalde collectieve effecten tengevolge van correlaties tussen elektronen te kunnen verklaren. Het Montorsi-Rasetti model is het eerste roostermodel dat een metaal-isolator overgang als functie van de elektron-elektron interactie kan beschrijven. Deze metaal-isolator overgang wordt niet veroorzaakt doordat de elektronen hun spin kunnen omkeren tijdens het springen van de ene naar de andere plaats maar wel door de waarschijnlijkheid om een plaats in te nemen afhankelijk te maken van de bezetting van deze plaats. Als de grondtoestand elektrisch geleidend is, dan zijn er bovendien voor welbepaalde vullingen van het rooster met elektronen lange afstands correlaties in de verdeling van de ladingen waar te nemen. Gelijktijdig zijn er dan ook ferromagnetische correlaties in de x of z component van de spin operator (naargelang de interpretatie van de model-hamiltoniaan) over lange afstand aanwezig. Het Montorsi-Rasetti model vertoont echter geen magnetisme als het systeem niet elektrisch geleidend is. Bovendien zijn er geen antiferromagnetische correlaties. Er is geen neiging tot supergeleiding gevonden, noch voor attractieve noch voor repulsieve interactie tussen de elektronen. Al deze eigenschappen maken het fase-diagram voor de grondtoestand van het Montorsi-Rasetti model ongetwijfeld rijker dan dat van het Hubbard model. Bovendien vertoont het Montorsi-Rasetti model met gemiddeld één elektron per roosterplaats een faseovergang bij een eindige temperatuur als het systeem in de grondtoestand elektrisch geleidend was.

Het nut van het gebruik van approximatieve technieken voor het bestuderen van modellen voor systemen van elektronen met sterke correlaties is getest voor dit model. In het bijzonder is er aangetoond dat de Hartree-Fock benadering het kwalitatief gedrag van de meest elementaire fysische grootheden niet kan beschrijven.

Vanuit educatief standpunt gezien is het Montorsi-Rasetti model zeer geschikt om exacte en Quantum Monte Carlo technieken te leren gebruiken om systemen met sterke correlaties tussen de elektronen te onderzoeken en om theoretische concepten en ideeën te confronteren met feiten. Zo wordt bijvoorbeeld dikwijls het gemiddeld aantal elektronen uitgezet als functie van de chemische potentiaal om het al dan

niet geleidend karakter van het systeem te bepalen. Als er plateaus in de curve voorkomen zou het systeem een isolator moeten zijn, maar de praktijk wijst uit dat dit voor het Montorsi-Rasetti model, en dus ook mogelijk voor andere modellen, tot een verkeerde conclusie kan leiden.

Verschillende belangrijke vragen blijven nog onbeantwoord. Alle resultaten gepresenteerd in dit werk zijn verkregen voor systemen die symmetrisch zijn onder verwisseling van elektronen en gaten. Het is een open vraag hoe de nu verkregen fysische eigenschappen van het Montorsi-Rasetti model beïnvloed zullen worden wanneer deze symmetrie verbroken wordt. Bovendien zijn in dit werk de waarschijnlijkheden voor het springen van elektronen naar naburige roosterplaatsen zo gekozen dat het aantal elektronenparen behouden blijft. Ook het effect van het verbreken van deze behoudswet blijft een open vraag.

Na een korte inleiding in de eerste paragraaf, worden in paragraaf twee enkele modellen die correlaties tussen elektronen in rekening brengen, voorgesteld. De voorgestelde modellen zijn het Hubbard model, het Hirsch model en het Montorsi-Rasetti model. Er wordt een uitgebreid overzicht gegeven van de eigenschappen van het Hubbard model op basis van exacte en numerieke resultaten die in de literatuur te vinden zijn. In paragraaf drie wordt een discussie gevoerd over de Montorsi-Rasetti model-hamiltoniaan en zijn symmetrie eigenschappen. Paragrafen vier en vijf bevatten de afleiding van de expliciete analytische uitdrukkingen voor de verschillende statische en dynamische grootheden. De numerieke technieken die gebruikt worden om deze grootheden uit te rekenen worden behandeld in paragraaf zes. Paragraaf zeven is gewijd aan de presentatie van de resultaten en het fase diagram voor de grondtoestand van het Montorsi-Rasetti model. In paragraaf acht tenslotte, worden de conclusies nog eens samengevat.

Dit proefschrift wordt, afgezien van enkele wijzigingen, gepubliceerd als overzichtsartikel in *International Journal of Modern Physics B* Vol. 7 No. 14, June 1993.