

Theoretical study of the dependence of single impurity Anderson model on various parameters within distributional exact diagonalization method = Studi teoretik kebergantungan single impurity Anderson model terhadap berbagai parameter dengan metode distributional exact diagonalization

Lentara Pundi Syaina, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20456346&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRACT

One of the simple models to address quantum many body effects in materials with impurities is Anderson Impurity Model. It describes a system consisting of non interacting conduction electrons having hybridization with a localized orbital with strong electron electron interaction at a particular site. This model has been proven successful to explain the phenomenon of metal insulator transition through Anderson localization. Despite the well understood behaviors of the model, little has been explored theoretically on how the model properties gradually evolve as functions of hybridization parameter, impurity concentration, and temperature. Here, we propose to do a theoretical study on those aspects of a single impurity Anderson model using the distributional exact diagonalization method. We solve the model Hamiltonian by randomly generating sampling distribution of a few energy levels of conduction electrons with various number of occupying electrons, starting from zero to the maximum number allowed by the available single orbital states. The resulting energy eigenvalues and eigenstates are then used to define the local single particle Green function for each sampled electron energy distribution using Lehmann representation. Later, we extract the corresponding self energy of each distribution, then average over all the distributions to obtain the final self energy of the system and construct the local Green function of the system to calculate the density of states. We repeat this procedure for various values of hybridization parameters, impurity concentrations, and temperatures. We discuss our results in connection with the criteria of the occurrence of metal insulator transition in this system.

<hr>

ABSTRACT

Salah satu model sederhana yang menunjukkan efek kuantum sistem banyak partikel pada material yang memiliki impuritas adalah Anderson Impurity Model. Model tersebut mendeskripsikan sebuah sistem yang memiliki elektron konduksi yang tidak saling berinteraksi namun mengalami hibridisasi dengan orbital yang terlokalisasi, dimana terjadi interaksi yang cukup kuat antar elektron pada orbital tersebut. Model ini terbukti berhasil menjelaskan fenomena metal-insulator transition melalui Anderson localization. Meskipun secara umum model ini telah dipahami, masih sedikit penjelasan teoretis terkait bagaimana model impuritas ini bergantung terhadap parameter hibridisasi, konsentrasi impuritas, dan suhu. Pada penelitian ini, kami mengusulkan studi teoretik mengenai pengaruh aspek-aspek tersebut terhadap single impurity Anderson model dengan menggunakan metode distributional exact diagonalization. Kami mengkonstruksi Hamiltonian model ini dengan distribusi energi elektron konduksi yang acak dengan berbagai variasi jumlah elektron yang mengisi orbital sistem, berawal dari kondisi orbital kosong tidak terisi elektron sama sekali sampai jumlah maksimum yang diperbolehkan. Eigenvalue dan eigenvector yang dihasilkan dari setiap sampling

digunakan untuk mendefinisikan fungsi Green orbital impuritas melalui Lehmann representation. Kemudian kami mengekstrak self-energy untuk setiap distribusi dan merata-ratakannya. Self-energy rata-rata yang diperoleh inilah yang diperlukan untuk mengkonstruksi fungsi Green total bagi elektron konduksi maupun elektron impuritas, dimana masing-masing fungsi Green tersebut digunakan untuk menghitung densitas keadaan. Kami mengulangi prosedur ini untuk berbagai variasi nilai parameter hibridisasi, konsentrasi impuritas, dan suhu. Diskusi terkait hasil penelitian yang diperoleh mengacu pada kriteria terjadinya fenomena metal-insulator transition pada sistem ini.