

Theoretical study of occupancy fluctuation effect on hubbard model at quarter filling within dynamical Mean-Field Theory (DMFT)= Studi efek fluktuasi okupansi elektron terhadap model hubbard pada quarter filling dalam kerangka dynamical Mean-Field Theory (DMFT)

Nur Atikah Tadjuddin, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20491318&lokasi=lokal>

Abstrak

Studi materi pada sistem yang berkorelasi kuat adalah topik penting karena interaksi material yang kuat antar-partikel dapat menghasilkan berbagai sifat fisik dan fenomena khusus. Beberapa metode komputasi telah dikembangkan untuk menemukan sifat sistem secara akurat menggunakan model Hubbard, tetapi banyak di antaranya membutuhkan biaya komputasi yang besar untuk mendapatkan hasil yang baik. Di Dalam penelitian ini kami mengusulkan pendekatan baru dalam kerangka kerja Dynamical Mean framework Theory (DMFT) yang melibatkan algoritma yang lebih sederhana dan diharapkan menghabiskan biaya komputasi lebih sedikit dibandingkan dengan metode sebelumnya. Algoritma ini diimplementasikan dengan membangun elemen matriks energi mandiri lokal yang bergantung pada fluktuasi hunian. Kemudian diintegrasikan ke semua konfigurasi hunian yang dimungkinkan untuk mendapatkan interaksi fungsi hijau. Matriks fungsi Hijau yang diperoleh kemudian digunakan untuk menghitung kepadatan negara (DOS) dan jumlah fisik lainnya. Kasus ini meninjau kondisi pengisian kuartal. Hasil komputasi yang dilakukan menunjukkan hasil kesenjangan ketika tolakan Coulomb cukup tinggi dan menunjukkan tren pseudogap akan semakin menghilang seiring dengan meningkatnya suhu. Sistem mempertahankan karakter paramagnetik untuk semua kondisi yang dipelajari.

.....Material studies on strongly correlated systems are important topics because of interactions strong inter-particle constituent material can produce various physical properties and phenomena special. Several computational methods have been developed to find the nature of the system accurately using the Hubbard model, but many of them are requires large computing costs to get good results. In this research we propose a new approach within the Dynamical Mean framework Field Theory (DMFT) which involves a simpler and expected algorithm spend less computing costs compared to the method previous. This algorithm is implemented by constructing matrix elements local self-energy that depends on occupancy fluctuations. Then integrated to all occupancy configurations that are possible to get the Green function interaction. The Green function matrix obtained is then used to calculate state density (DOS) and other physical quantities. This case reviews the conditions for quarter filling. The computational results carried out show the result of a gap when the Coulomb repulsion is high enough and shows pseudogap trends will increasingly disappear along with increasing temperature. System retain paramagnetic character for all conditions studied.