

Thesis

**KAJIAN NUMERIK MODEL HUBBARD DUA DIMENSI
UNTUK FENOMENA TRANSISI LOGAM ISOLATOR**

*(NUMERICAL STUDY OF THE TWO DIMENSIONAL HUBBARD MODEL
FOR THE METAL INSULATOR TRANSITIONS PHENOMENA)*

**RAHMAT
H032181011**



**PROGRAM STUDI MAGISTER FISIKA
DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS HASANUDDIN
MAKASSAR 2022**

**KAJIAN NUMERIK MODEL HUBBARD DUA DIMENSI
UNTUK FENOMENA TRANSISI LOGAM ISOLATOR**

*(NUMERICAL STUDY OF THE TWO DIMENSIONAL HUBBARD MODEL
FOR THE METAL INSULATOR TRANSITIONS PHENOMENA)*

Tesis

Sebagai Salah Satu Syarat untuk Mencapai Gelar Magister

Program Studi

Fisika

Disusun dan Diajukan Oleh

RAHMAT

Kepada

**PROGRAM STUDI MAGISTER FISIKA
DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UN4ERSITAS HASANUDDIN
MAKASSAR 2022**

LEMBAR PENGESAHAN TESIS

**KAJIAN NUMERIK MODEL HUBBARD DUA DIMENSI UNTUK
FENOMENA TRANSISI LOGAM ISOLATOR**

Disusun dan diajukan oleh

**RAHMAT
H032181011**

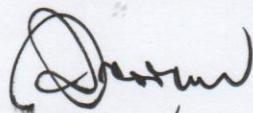
Telah dipertahankan di depan Panitia Ujian yang dibentuk dalam rangka penyelesaian studi program Magister Program Studi Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Hasanuddin

Pada tanggal 26 Desember 2022

Dan dinyatakan telah memenuhi syarat kelulusan

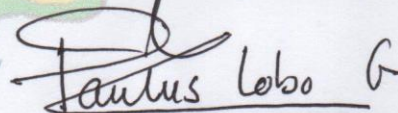
Menyetujui,

Pembimbing Utama,



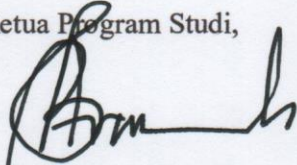
Prof. Dr. Tasrief Surungan, M.Sc
NIP. 19670222 199203 1 000

Pembimbing Pendamping,



Prof. Dr. Paulus Lobo Gareso, M.Sc
NIP. 19650305 1991031 000

Ketua Program Studi,



Dr. Ir. Bidayatul Armynah, MT.
NIP. 19630830 198903 2 001

Dekan Fakultas,



Dr. Eng. Amiruddin, M.Si.
NIP. 19720515 199702 1 002

PERNYATAAN KEASLIAN TESIS

Yang bertanda tangan di bawah ini

Nama : Rahmat

Nomor Mahasiswa : H032181011

Program Studi : Fisika

Menyatakan dengan sebenarnya bahwa tesis yang saya tulis ini benar-benar merupakan hasil karya saya sendiri, bukan merupakan pengambil alihan tulisan atau pemikiran orang lain. Apabila dikemudian hari terbukti atau dapat dibuktikan bahwa Sebagian atau keseluruhan tesis ini hasil karya orang lain, saya bersedia menerima sanksi atas perbuatan saya tersebut.

Makassar, 28 Desember 2022

Yang menyatakan


RAHMAT

PRAKATA

Assalamualaikum warahmatullahi wabarakatuh.

Puji syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah SWT karena atas rahmat dan berkah-Nya, penulis dapat menyelesaikan penulisan tesis program Magister ini dengan judul: “Kajian Numerik Model Hubbard Dua Dimensi untuk Fenomena Transisi Logam Isolator (Numerical Study Of The Two Dimensional Hubbard Model for The Metal Insulator Transitions Phenomena)” dan shalawat serta salam atas Nabi Muhammad shallallahu ‘alaihi wasallam.

Proses perjalanan studi dan penyelesaian tesis ini, penulis telah banyak dibantu oleh beberapa pihak, baik bantuan moril maupun material, pencerahan ilmu, penguatan hati dan mental, doa dan perhatian serta berbagai kemudahan fasilitas terkait dengan penyelesaian studi.

Rasa hormat dan terimakasih sedalam-dalamnya penulis sampaikan kepada para komisi penasehat tesis: Bapak Prof. Dr. Tasrief Surungan, M.Sc. selaku Pembimbing Utama, Bapak Prof. Dr. Paulus Lobo Gareso, M.Sc. selaku Pembimbing Pendamping dengan dedikasi dan kesabarannya dalam mencurahkan segala pemikiran dan waktunya untuk membimbing dan mengarahkan bobot akademis dalam tesis ini.

Ucapan terimakasih dan penghargaan setinggi-tingginya penulis sampaikan kepada tim penguji Prof. Dr. Halmar Halide, M.Sc., Dr. Nurlaela Rauf, M.Sc., dan Prof. Dr. Wira Bahari Nurdin, M.Sc. yang telah menyediakan waktu dan pikirannya untuk memberikan banyak masukan serta arahan dalam menyempurnakan tesis ini sehingga memiliki makna yang berarti.

Ucapan terimakasih sedalam-dalamnya juga penulis sampaikan kepada Dosen Fisika FMIPA Unhas dalam proses transfer ilmu pengetahuan dan atas dedikasi yang luar biasa serta kepada staf administrasi yang banyak membantu dalam proses penyelesaian studi magister ini. Rasa hormat dan terimakasih yang tak terhingga saya dedikasikan kepada orang tua penulis ayahanda Hamzah dan ibunda Jumalia atas motivasi, didikan, dan doa yang senantiasa mengiringi perjalanan penulis. Ucapan terimakasih istimewa untuk istri (Dini Firdayanti) dan anak (Rumaisha Alkharizmi Rahmat) atas segala dukungan serta pengorbanan yang luar biasa selama penulis melaksanakan pendidikan di Unhas. Terima kasih juga diucapkan kepada Bapak Mertua Firdaus, Ibu Mertua Nurmiati dan Adik Ipar Fajar Islam atas semangat dan motivasi untuk menyelesaikan studi ini. Semoga Allah SWT senantiasa membalas tiap kebaikan yang telah diberikan.

Penulis menyadari sepenuhnya bahwa dalam tulisan ini banyak terdapat kekurangan, olehnya itu kepada para pembaca kiranya dapat mengoreksi dan memberikan masukan guna kesempurnaan dari penelitian ini dan penelitian-penelitian selanjutnya. Akhir kata, penulis berharap bahwa tesis ini bisa memberikan rangsangan akademik untuk melaksanakan penelitian lebih lanjut.

Makassar, 28 Desember 2022



Rahmat

ABSTRAK

Kajian numerik model Hubbard dua dimensi untuk fenomena transisi logam isolator telah diteliti dengan menggunakan metode Monte Carlo (MC) kuantum. Model Hubbard adalah suatu model yang menggambarkan interaksi elektron pada kisi kristal. Besaran fisis A dihitung melalui sangkutan $\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} e^{-\beta H} A}{Z}$ dimana $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$ menyatakan fungsi partisi. Metode MC kuantum digunakan untuk membangkitkan konfigurasi kuantum yang memperhitungkan interaksi elektron pada model Hubbard. Elektron-elektron dimodelkan menempati titik-titik kisi dengan konsentrasi hunian setengah (*half-filling*) bersesuaian dengan keberadaan fenomena transisi logam isolator yang dikenal sebagai Mott Transition. Selanjutnya divariasikan rasio hunian disekitar nilai $1/2$ dimana diamati keberadaan isolator murni untuk nilai $U/t \sim 0,75$. Batas suhu nol dari menunjukkan $S(\pi, \pi)/N$ versus $N^{-\frac{1}{2}}$ untuk $U=4t$ dimana terlihat bahwa keadaan dasar memiliki tatanan antiferromagnetik jarak jauh. Hal ini menunjukkan bahwa keadaan dasar model Hubbard 2D setengah terisi dengan t hopping dekat-tetangga akan memiliki orde antiferromagnetik jarak jauh untuk $U > 0$.

Kata kunci: model Hubbard, Monte Carlo, Mott Insulator

ABSTRACT

Numerical study of the two-dimensional Hubbard model for the insulator metal transition phenomenon has been investigated using the quantum Monte Carlo (MC) method. The Hubbard model is a model that describes the interaction of electrons in a crystal lattice. The physical quantity A is calculated through the connection $\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} e^{-\beta H A}}{Z}$ where $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$ represents the partition function. The quantum MC method is used to generate quantum configurations that take into account electron interactions in the Hubbard model. The electrons are modeled to occupy lattice points with half-filling concentration corresponding to the existence of an insulator metal transition phenomenon known as Mott Transition. Furthermore, the occupancy ratio was varied around the value of $1/2$ where it was observed the presence of a pure insulator for the value of $U/t \sim 0,75$. The zero temperature limit of denotes $S(\pi, \pi)/N$ versus $N^{-1/2}$ for $U=4t$ where it appears that the ground state has a long-range antiferromagnetic order. This indicates that the ground state of the half-filled 2D Hubbard model with a near-neighbor t -hopping will have a long-range antiferromagnetic order for $U > 0$.

Keyword: *Hubbard model, Monte Carlo, Mott Insulator*

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii
LEMBAR PENGESAHAN TESIS	iii
PERNYATAAN KEASLIAN TESIS	iv
PRAKATA	v
ABSTRAK	vii
ABSTRACT	viii
DAFTAR ISI	ix
BAB I PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan Penelitian	2
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	
2.1 Operator Kreasi dan Anihilasi.....	3
2.2 Hamiltonian Hubbard.....	5
2.3 Teori Pita untuk Logam dan Isolator	7
2.4 Isolator Mott.....	8
2.5 Model Hubbard untuk Transisi Logam Isolator.....	9
BAB III METODE PENELITIAN	
3.1 Alat dan Bahan.....	12
3.2 Metode Monte Carlo	12
3.3 Algoritma Monte Carlo Kuantum Determinan	13
3.4 Pendekatan Kluster Dinamis	18
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	
4.1 Fase Anti Ferromagnetik.....	22
4.2 Pasangan $d_{x^2-y^2}$	25

BAB V PENUTUP

A. Kesimpulan	34
B. Saran.....	35
DAFTAR PUSTAKA	xi
LAMPIRAN	xvi

1 **BAB I**
2 **PENDAHULUAN**

3 **I.1 Latar Belakang**

4 Model Hubbard adalah penggambaran secara sederhana yang interaksi elektron
5 pada kisi kristal. Model ini menawarkan cara memahami mekanisme interaksi
6 antara elektron dalam material sehingga dapat bersifat isolator, magnet atau bahkan
7 superkonduktor. Penelitian tentang model Hubbard dimulai pada awal dekade 1960-
8 an sebagai upaya memahami perilaku logam transisi monoksida (FeO, NiO, CoO),
9 senyawa yang merupakan isolator antiferromagnetik, dengan metode yang
10 meninjau electron-elektron yang berinteraksi kuat. Selain itu, juga menawarkan
11 pengetahuan tidak hanya struktur matematik yang mendasari banyak sistem tetapi
12 menyediakan eksperimen tentang sistem elektron Dagotto dkk[1-4].

13 Hingga kini, model Hubbard telah diterapkan untuk memahami banyak sistem, dari
14 sistem 'fermion berat' pada dekade 1980-an, hingga superkonduktor suhu tinggi
15 pada dekade 1990-an. Model ini meskipun sederhana tetapi mampu menjelaskan
16 banyak sifat dan ciri khas bahan mampat (*condensed matter*). Model Hubbard telah
17 dikaji dengan berbagai teknik analitik yang dikembangkan oleh fisikawan teoretik
18 bahan mampat, mulai dari teori medan rata-rata (*mean field theory*) hingga teori
19 medan kuantum (*quantum field theory*). Model ini juga telah dikaji secara ekstensif
20 melalui metode numerik seperti metode diagonalisasi exak dan metode Monte
21 Carlo [5]; Interaksi elektron pada model Hubbard dikuantifikasi oleh dua parameter
22 eksplisit yaitu rasio (U/t) antara gaya tolakan Coulomb dan energi kinetik elektron
23 j dan hunian (ρ) pita elektron j dan salah satu parameter implisit struktur dasar kisi.

24 Parameter ini mampu menyingkap transisi dari logam ke isolator dan dari
25 magnetisme ke superkonduktivitas. Hamiltonian model Hubbard terdiri atas dua
26 suku, masing-masing bersesuaian dengan energi kinetik yang diparametrisasi oleh
27 tetapan hopping t dan energi interaksi Coulomb U . Sajian lengkap dari Hamiltonian
28 ini disajikan dalam Bab II.

29 **I.2 Rumusan Masalah**

30 Rumusan masalah pada penelitian ini adalah sebagai berikut:

- 31 1. Bagaimana memperoleh sifat elektronik dari model untuk sejumlah nilai rasio
32 parameter U dan t ?
- 33 2. Bagaimana perubahan fase isolator-konduktor untuk sejumlah nilai rasio U dan
34 t ?

35 **I.3 Tujuan Penelitian**

36 Tujuan penelitian ini adalah sebagai berikut:

- 37 1. Untuk memperoleh sifat elektronik dari model untuk sejumlah nilai rasio
38 parameter U dan t .
- 39 2. Menelusuri kemungkinan adanya perubahan fase isolator-konduktor untuk
40 sejumlah nilai rasio U dan t .

41

42

43

44

45

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

46

47 2.1 Operator Kreasi dan Anihilasi

48 Operator kreasi (a^\dagger) dan anihilasi (a) telah diperkenalkan pada mekanika kuantum
49 pada saat meninjau osilator harmonik yang didefinisikan sebagai kombinasi dari
50 operator posisi dan momentum.

$$51 \quad \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p} \text{ dan } \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p} \quad (2.1)$$

52 Oleh karena komutator $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$, maka operator ini mematuhi hubungan
53 komutasi sebagai berikut:

$$54 \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (2.2)$$

55 Dengan demikian Hamiltonian dari osilator harmonik dapat didefinisikan sebagai
56 berikut:

$$57 \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (2.3)$$

58 Dari sini dapat didefinisikan operator bilangan yaitu $\hat{n} = \hat{a}^\dagger a$ sehingga $\hat{H} =$
59 $\hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right)$. Keadaan dasar osilator kuantum ditulis sebagai $|0\rangle$ dan memiliki sifat

$$60 \quad \hat{a}|0\rangle = 0 \text{ dan } \hat{H}|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} |0\rangle \quad (2.4)$$

61 Keadaan tereksetitasi dibangun dengan menerapkan operator kreasi berulang kali
62 ke keadaan dasar yaitu

63
$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (2.5)$$

64 Dan mematuhi persamaan

65
$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle. \quad (2.6)$$

66 Model Hubbard memiliki operator kreasi dan anihilasi yang dibedakan oleh indeks
 67 situs (titik kisi) \mathbf{j} dan indeks spin σ . Dengan demikian operator kreasi ($\hat{c}_{j\sigma}^\dagger$) dan
 68 anihilasi ($\hat{c}_{j\sigma}$) beroperasi pada fermion dengan spin σ di situs \mathbf{j} . Sehingga,
 69 keadaannya tidak lagi dicirikan oleh angka tunggal n , seperti osilator harmonik
 70 tunggal, melainkan kumpulan angka $n_{j\sigma}$, sehingga dapat dituliskan sebagai
 71 $|n_{1\uparrow} n_{2\uparrow} n_{3\uparrow} n_{1\downarrow} n_{2\downarrow} n_{3\downarrow} \dots\rangle$.

72 Operator ini menggambarkan fermion yang berbeda dengan persamaan (2) dan
 73 memiliki hubungan antikomutasi tertentu; (antikomutator dari dua operator) yaitu
 74 $\{\hat{A}, \hat{B}\} = (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$, dimana

75
$$\{\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}_{j\sigma}^\dagger\} = \delta_{j,1} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad \{\hat{c}_{j\sigma}^\dagger, \hat{c}_{1\sigma'}^\dagger\} = 0 \quad \{\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}_{1\sigma'}\} = 0 \quad (2.7)$$

76 Untuk kasus bosonik, $\hat{c}_{j\sigma}^\dagger |0\rangle = |1\rangle$ yang menghasilkan (menkreasi) sebuah fermion
 77 ketika bekerja pada ruang vakum. Namun, sebagai konsekuensi dari hubungan anti
 78 komutasi, maka $\hat{c}_{j\sigma}^\dagger |1\rangle = \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}^\dagger |0\rangle = 0$. Ini tentu saja memenuhi prinsip Larangan
 79 Pauli (*Pauli Exclusion Principle*). Nilai hunian maksimum dari suatu titik kisi untuk
 80 sebuah spin adalah 1. Selain prinsip Pauli, hubungan anti komutasi juga

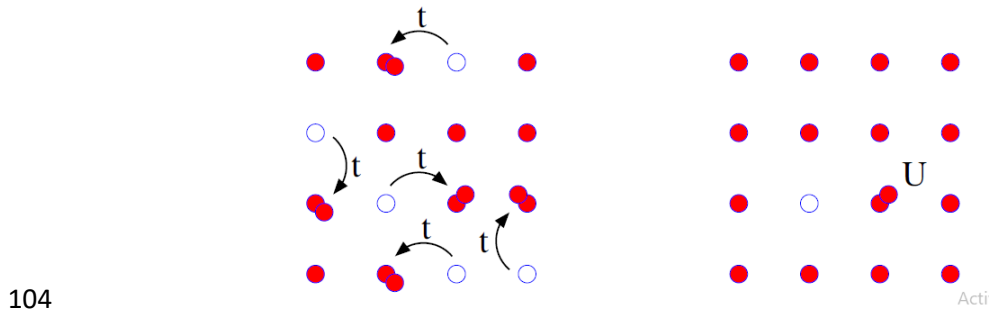
81 memastikan bahwa partikel adalah fermion, yaitu fungsi gelombangnya berubah
82 tanda ketika dua fermion dengan label berbeda dipertukarkan, $\hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{1\sigma}^\dagger = -\hat{c}_{1\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}^\dagger$.
83 Relasi anti komutasi ini mengharuskan untuk menetapkan konvensi untuk relasi
84 antara keadaan seperti $|10100 \dots\rangle$ dan keadaan vakum $|vac\rangle = |00000 \dots\rangle$.
85 Sebagai contoh dua kemungkinan, untuk keadaan $|10100 \dots\rangle$ yaitu $\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_3^\dagger |vac\rangle$ dan
86 $\hat{c}_3^\dagger \hat{c}_1^\dagger |vac\rangle$ namun dibedakan dengan tanda negatif Georges [5].

87 **2.2 Hamiltonian Hubbard**

88 Hamiltonian Hubbard muncul secara alami dengan menggambarkan gerakan dan
89 interaksi elektron dalam zat padat. Terdapat fakta bahwa susunan posisi inti yang
90 teratur dianggap dapat diperbaiki dengan memulainya pada kisi atom tempat
91 fermion bergerak. Oleh karena itu, satu atom nyata merupakan struktur yang sangat
92 kompleks dan memiliki banyak tingkat energi (orbital) yang berbeda. Hamiltonian
93 Hubbard menyederhanakan atom-atom dalam zat padat menjadi kumpulan titik kisi
94 dengan satu orbital. Penggambaran ini cocok untuk benda padat yang memiliki satu
95 pita energi pada permukaan Fermi sehingga hanya satu orbital yang relevan.

96 Hamiltonian Hubbard memiliki empat kemungkinan (dibatasi oleh prinsip Pauli)
97 yaitu: kosong ($|0\rangle$), satu fermion spin up ($|\uparrow\rangle$), satu fermion spin down ($|\downarrow\rangle$), dan
98 sepasang fermion atas dan bawah ($|\uparrow\downarrow\rangle$). Elektron dalam zat padat bergerak dan
99 berinteraksi melalui interaksi Coulomb. Interaksi elektron terbesar terdapat pada
100 dua elektron di situs yang sama. Hamiltonian Hubbard memodelkan interaksi
101 dengan nilai nol jika titik kisi kosong atau hanya memiliki satu fermion, tetapi

102 memiliki nilai U jika titik kisi tersebut ganda serta sesuai dengan prinsip Pauli yaitu
 103 (fermion dari spin yang berlawanan) yang dinyatakan oleh $U_{n_{j\uparrow}n_{j\downarrow}}$.



105 Gambar 2.1: Penggambaran suku-suku pada Hamiltonian Hubbard (Kiri: energi
 106 kinetik t . Kanan: Tolakan U .)

107 Energi kinetik diungkapkan sebagai penghancur fermion di salah satu situs dan
 108 menciptakannya di tetangga situs. Skala energi t yang mengatur 'loncatan'
 109 (*hopping*) ditentukan oleh tumpang tindih dua fungsi gelombang pada pasangan
 110 atom. Oleh karena fungsi gelombang hilang secara eksponensial dan
 111 memperbolehkan loncatan hanya di antara atom-atom terdekat dalam kisi.

112 Bentuk Hamiltonian Hubbard dituliskan sebagai berikut

113

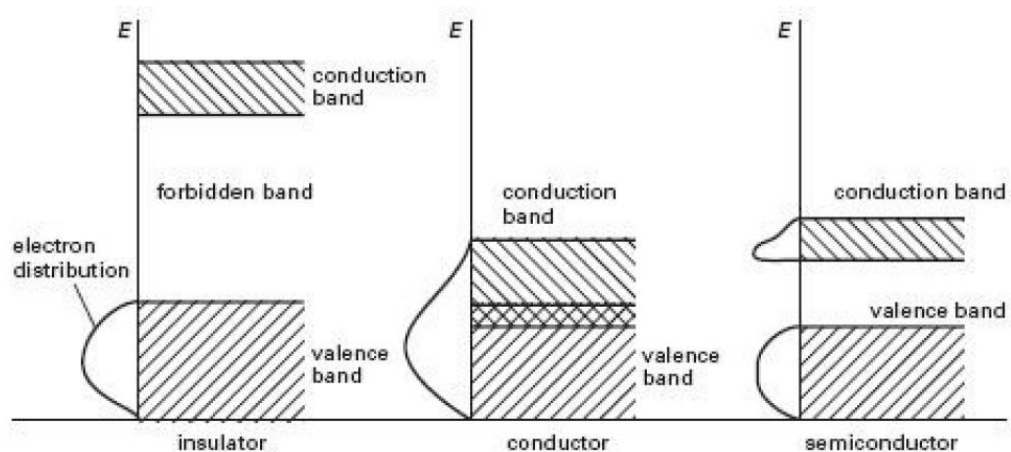
$$\widehat{H}_H = -t \sum_{\langle j, \mathbf{1} \rangle \sigma} (c_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{1}\sigma} + c_{\mathbf{1}\sigma}^\dagger c_{j\sigma}) + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} - \mu \sum_j n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} \quad (2.8)$$

114 Suku pertama adalah energi kinetik yang menggambarkan pemusnahan fermion
 115 spin σ di situs i dan penciptaannya di situs j (atau sebaliknya). Simbol $\langle j, \mathbf{1} \rangle$
 116 menekankan bahwa hopping hanya diperbolehkan antara dua situs yang berdekatan.
 117 Suku kedua adalah energi interaksi. Energi interaksi melewati semua situs dan

118 menambahkan energi U jika situs tersebut ditempati ganda. Suku terakhir adalah
 119 potensial kimia yang mengontrol pengisian. Situasi satu fermion per situs adalah
 120 'pengisian setengah (*half-filling*)' karena kisi berisi setengah fermion sebanyak
 121 jumlah maksimum adalah dua per situs. Studi Hamiltonian Hubbard berfokus pada
 122 kasus setengah terisi karena menunjukkan banyak fenomena menarik seperti
 123 perilaku isolator Mott, fase anti-ferromagnetik, dan lain-lain Georges [5].

124 2.3 Teori Pita untuk Logam dan Isolator

125 Teori Sommerfeld adalah teori kuantum pertama tentang perilaku elektron pada zat
 126 padat dengan meninjau elektron sebagai elektron bebas dan tidak dapat dimasukkan
 127 kedalam medan ion dan interaksi elektron-elektron. Teori pita adalah kelanjutan
 128 dari teori Sommerfeld, yang memperhitungkan medan ion. Salah satu keberhasilan
 129 teori pita adalah kemampuannya menjelaskan keberadaan logam dan isolator. Isolator
 130 bersesuaian dengan pita pengisian penuh dan logam hanya pengisian sebagian



131

132 Gambar 2.2. Teori pita pada isolator, konduktor dan semikonduktor

133 Keberadaan logam dan isolator berkaitan dengan interaksi elektron-elektron dapat
134 menimbulkan masalah. Salah satu contohnya adalah NiO Tremblay[7], yang
135 seharusnya adalah logam menurut teori pita. Namun demikian, teori pita hanyalah
136 mekanika kuantum satu partikel, yang tidak memadai untuk menjelaskan sistem
137 bahan mampat yang kompleks Dagotto[8].

138 **2.4 Isolator Mott**

139 Penyebab Isolator Mott adalah interaksi elektron-elektron. Jika tidak ada interaksi
140 elektron-elektron dalam kristal padat, maka satu-satunya skala panjang hanyalah
141 jarak kisi d , (selain skala panjang medan ion) namun, jika diperkenalkan interaksi
142 antara elektron, maka akan memiliki skala panjang lain yang terkait dengan
143 interaksi elektron-elektron ini, yaitu jejari Bohr a_B untuk interaksi Coulomb.
144 Dengan demikian kriteria Mott adalah:

145 $d \gg a_B$ Isolator

146 $d \ll a_B$ Logam

147 yang mengharuskan ada nilai kritis $d = d_0$ dimana transisi logam isolator terjadi
148 pada suhu nol, yaitu $d < d_0$ untuk logam, $d > d_0$ untuk isolator.

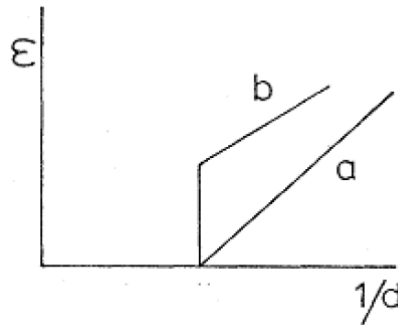
149 Mott memperkenalkan "parameter urutan" semu untuk hal ini [7]

$$150 \quad \epsilon = I - E \quad (2.9)$$

151 dimana I adalah energi ionisasi dan E afinitas elektron dari suatu atom di dalam
152 kristal.

153 Jika tidak terdapat interaksi elektron-elektron, maka $I = E$; $\epsilon = 0$; namun, untuk
154 kasus interaksi elektron-elektron, $I > E$; $\epsilon > 0$: Jelas, I, E akan berubah sesuai

155 dengan variasi jarak kisi d . Umumnya, ketika d lebih kecil maka I dan E juga akan
156 berkurang. Terdapat dua cara untuk perubahan seperti yang diusulkan oleh Mott:



157

158

Gambar 2.3. Kurva a dan b

159 Jika ϵ mengecil seperti kurva b maka akan menghasilkan transisi fase orde pertama
160 dan jika mengecil seperti kurva a maka akan dihasilkan transisi fase kontinu (orde
161 kedua).

162 Menurut Mott [9] kurva penurunan harus terputus (kurva b). Karena gaya tarik
163 Coulomb antara elektron dan hole (lubang) akan menyebabkan mereka membentuk
164 pasangan yang akan memiliki energi ikat diskrit, dan energi akt4asi dalam keadaan
165 isolasi tidak boleh kurang dari energi ikat ini, sehingga akan turun secara terputus
166 [8].

167 **2.5 Model Hubbard untuk Transisi Logam Isolator**

168 Jika dimasukkan efek interaksi elektron, maka akan diperoleh kasus yang sangat
169 kompleks, dan secara umum tidak dapat diselesaikan, sehingga perlu
170 penyederhanaan masalah. Salah satu caranya adalah dengan memperkenalkan
171 model yang hanya memperhitungkan aspek fisika penting dan mengabaikan
172 detailnya. Model Hubbard untuk isolator Mott adalah:

173

$$H_H = H_t + H_u - \mu N \quad (2.10)$$

174 dimana H_t dan H_u masing-masing adalah

175
$$H_t = -t \sum (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) \quad (2.11)$$

176
$$H_u = U \sum \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.12)$$

177 dan $N = \sum n_{i\sigma}$, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$

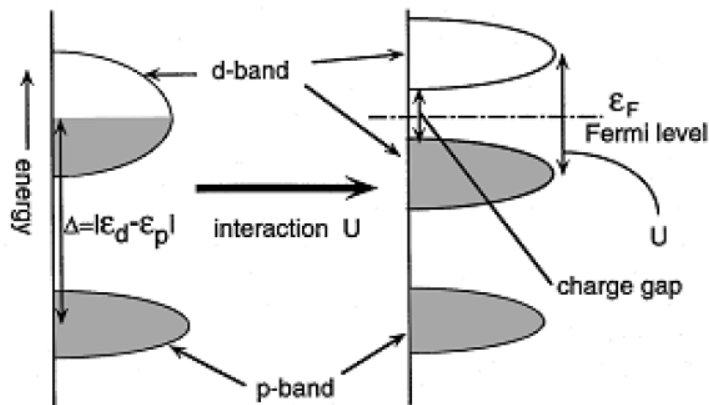
178 $c_{i\sigma}^\dagger$ adalah operator kreasi, H_t adalah Hamiltonian tetangga terdekat yang
 179 terdiagnosis dalam ruang momentum:

180
$$c_{k\sigma} = \sum_j e^{-ikr_j} c_{j\sigma} \quad (2.13)$$

181
$$H_t = \sum_j \epsilon_0(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2.14)$$

182 H_u mewakili interaksi Coulomb dari fermion yang bertetangga dekat. Dalam model
 183 ini fase isolator Mott akan muncul pada pengisian setengah $\langle n_{i\sigma} \rangle = \frac{1}{2}$

184



185

186 (Gambar 2.4. Interaksi U)

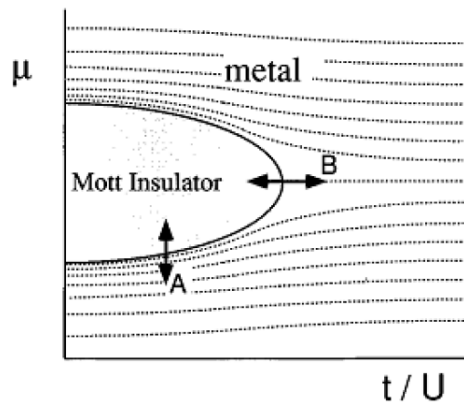
187 Pada gambar di atas, pita p tetap tidak berubah setelah memasukkan interaksi U ,
 188 namun pita d terbagi menjadi dua pita yang membuka celah muatan. Keadaan bahan
 189 yang sesuai adalah isolator. Jika interaksi $U \gg t$ sangat kuat maka teori ini dapat

190 diperluas dalam bentuk t/U , yang perilakunya seperti parameter kecil. Selain itu,
 191 teori gangguan orde kedua dalam hal t/U mengarah ke model $t - J$ [9]:

$$192 \quad H_{t-J} = - \sum P_d (t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) P_d + J \sum \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.15)$$

193 P_d adalah operator proyeksi untuk mengecualikan hunian ganda partikel di situs
 194 yang sama. Terdapat dua jenis transisi isolator logam pada model Hubbard
 195 memiliki yaitu transisi kontrol pengisian dan transisi kontrol pita. Transisi kontrol
 196 pengisian memvariasikan konsentrasi elektron atau potensial kimia μ/U . Transisi
 197 kontrol pita memvariasikan energi lompatan elektron atau lebar pita t/U . Berikut
 198 ini adalah diagram fase isolator logam dalam model Hubbard dan dua jenis transisi
 199 fase: (Perilaku penyekalaan dua tipe transisi fase ini berbeda)

200



201

202 (Gambar 2.5. Diagram fase isolator logam dalam model Hubbard)

203 Rute A menunjukkan transisi kontrol pengisian, sedangkan rute B adalah transisi
 204 kontrol pita. Kurva mengilustrasikan garis kontur kepadatan [9].

205

206