

Efeitos de localização de Anderson
próximo à transição metal-isolante de Mott

Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG
Instituto de Ciências Exatas - ICEx
Programa de Pós-graduação em Física

Efeitos de localização de Anderson próximo à transição metal-isolante de Mott

Helena de Souza Bragança

Orientadora: Prof. Dra. Maria Carolina de Oliveira Aguiar

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação
em Física da Universidade Federal de Minas Gerais,
para obtenção do título de mestre em Física.

2014

Agradecimentos

Agradeço a Deus, fonte de tudo o que há.

À Carol, pelo exemplo nessa caminhada de fazer pesquisa em física. Pela atenção dedicada a cada detalhe, pela paciência e por todo o conhecimento transmitido;

Ao Jaks Vucicevic por ter cedido o código para a solução dos problemas de uma impureza, utilizado nos cálculos deste trabalho;

Aos professores Vladimir Dobrosavljević e Darko Tanaskovic pelas ideias e discussões relacionadas a esse projeto;

À minha mãe pelo carinho expresso no cuidado diário;

Ao meu pai, por tantas coisas, mas nesse momento especialmente por ter sido minha primeira referência na fome pelo conhecimento e interesse pela carreira acadêmica;

À Dani e ao André, por participarem da minha criação;

À minha irmã, amiga de todos os dias;

Aos meus irmãos, fontes de tantas alegrias;

Ao Patrick, grande companheiro, por ouvir, se interessar e participar de cada detalhe;

Aos amigos da física pela companhia nos estudos e almoços agradáveis;

Aos colaboradores do projeto de DMRG, por contribuírem para que esse tempo de mestrado fosse ainda mais dinâmico e interessante;

Aos amigos de Alvo, segunda família;

À Lorena e à Rafa, por fazerem meus dias na federal mais leves e alegres;

Aos professores e funcionários do departamento de física, que contribuíram de diferentes maneiras para este trabalho;

Ao CNPq pelo auxílio financeiro.

Resumo

A repulsão coulombiana entre elétrons altera consideravelmente as propriedades de certos materiais, que podem inclusive passar por uma transição metal-isolante, a transição de Mott, quando a energia dessa interação torna-se mais relevante do que a energia cinética do sistema. A presença de desordem também pode limitar a mobilidade eletrônica, gerando uma transição metal-isolante conhecida como transição de Anderson. Os dois mecanismos de localização se combinam, algumas vezes reforçando, outras vezes blindando os efeitos um do outro. Esta conjunção entre os mecanismos de localização é relevante em sistemas reais e pode ser observada em trabalhos experimentais, em compostos como óxidos de metais de transição e sais orgânicos, por exemplo, que possuem forte repulsão coulombiana. Dopantes são acrescentados experimentalmente a esses sistemas com o objetivo de aumentar a pressão química, reduzindo a razão entre a energia de interação elétron-elétron e a energia cinética; esse procedimento, porém, introduz desordem aos sistemas.

Grande avanço na descrição das transições de Mott e Anderson tem sido alcançado nas últimas décadas, pelo desenvolvimento de técnicas numéricas capazes de descrever sistemas interagentes e desordenados. A transição gerada por correlação pode ser descrita pela Teoria de Campo Médio Dinâmico, enquanto a Teoria do Meio Típico fornece um tratamento para a localização devido à desordem. O efeito conjunto de interação e desordem no processo de localização das funções de onda eletrônicas, no entanto, não é assunto bem estabelecido na literatura, e é o tema de investigação deste trabalho.

Utilizamos uma combinação da Teoria de Campo Médio Dinâmico com a Teoria do Meio Típico para estudar o modelo de Hubbard, que descreve a competição discutida acima entre energia de interação elétron-elétron e energia cinética. Acrescentamos desordem na energia local dos elétrons e realizamos o estudo a temperatura finita. Analisamos, dessa forma, diferentes regiões do diagrama de fase de sistemas correlacionados na presença de desordem. Abaixo de uma temperatura crítica T_c , a transição de Mott é de primeira ordem e apresenta uma região de coexistência metal-isolante. Nossos resultados demonstram que a localização de Anderson tem efeitos relevantes sobre o sistema próximo à transição de Mott, especialmente sobre a região de coexistência, mesmo no regime de desordem pequena a moderada. Observamos que a localização de Anderson reduz o valor da interação crítica para a qual ocorre a transição, além de tornar a região de coexistência mais estreita. Analisamos também os efeitos de desordem sobre T_c . Os dados numéricos obtidos neste trabalho sugerem que a temperatura crítica da transição de Mott vai a zero quando aumentamos a desordem do sistema, revelando o ponto crítico quântico da transição de Mott que, para desordens menores, é “escondido” pela região de coexistência. Nossos resultados para outros regimes do diagrama de fase confirmam conclusões presentes na literatura. Observamos, no limite de U pequeno, por exemplo, que a interação blinda os efeitos de desordem próximo à transição de Anderson. Além disso, vemos que tanto o mecanismo de Mott quanto o de Anderson são relevantes na localização das funções de onda eletrônicas no regime de desordem e interação grandes e comparáveis. Nesse caso, descrevemos um “crossover” entre um isolante de Mott desordenado e um isolante de Anderson correlacionado.

Abstract

The Coulomb repulsion between electrons strongly affects the properties of a class of materials, which can go through a metal-insulator phase transition - the so called Mott transition, when this interaction energy becomes more relevant than the system kinetic energy. The presence of disorder also limits the electron mobility and can drive the systems through the Anderson metal-insulator transition. These two mechanisms for localization combine themselves, sometimes enhancing, sometimes reducing the effects of each other. This interplay is important in real systems and is observed in experimental works performed on compounds such as transition metal oxides and organic salts, which show strong Coulomb repulsion. Experimentally, doping can be added to these systems with the goal of introducing chemical pressure, thus reducing the ratio between electron-electron interaction and kinetic energies; this procedure, however, adds disorder to the systems.

Considerable progress on the description of Mott and Anderson transitions has been achieved in the last few decades due to the development of numerical approaches that are able to describe correlated and disordered systems. The transition driven by interactions can be described by dynamical mean field theory, while typical medium theory provides a description of localization due to disorder. The combined effect of both interactions and disorder on the electronic wave functions, specially on their possible localization, is not well established in the literature, however, and is the subject of this work.

We use a combination of dynamical mean field theory and typical medium theory to study the Hubbard model, which describes the competition cited above between electron-electron interaction and kinetic energies. In our model, the electron local energy changes from site to site according to a disorder distribution. Our calculation is performed at finite temperature. We are able to analyze different regions of the phase diagram valid for correlated systems in the presence of disorder. Below a critical temperature T_c , the Mott transition is of first order and a metal-insulator coexistence region exists. According to our results, Anderson localization has important effects near the Mott transition, specially on the coexistence region, even in the limit of small to moderate disorder. In particular, we observe that Anderson localization effects decrease the critical interaction at which Mott transition occurs, as well as produce a narrower coexistence region in comparison with results obtained via standard-DMFT, which does not include Anderson localization effects. In addition, we analyze how disorder affects T_c . Our numerical data suggest that the critical temperature of the Mott transition goes to zero as we increase disorder, revealing the quantum critical point of this transition, which, for smaller disorder, is “hidden” by the coexistence region. Our results in other regimes of the phase diagram confirm conclusions known in the literature. In the limit of small U , near the Anderson transition, for example, we observe an effect of disorder screening due to interactions. Furthermore, we see that both Anderson and Mott routes to localization are relevant in the regime of strong, comparable values of interaction and disorder. In this case, we describe a direct crossover between Mott and Anderson insulators, with the absence of an intermediate metallic phase.

Lista de Figuras

1	Diagrama esquemático representando a transição de Mott.	2
2	Mapeamento e evolução temporal da Teoria de Campo Médio Dinâmico.	3
3	Densidade de estados em função da energia para U crescente.	3
4	Figura esquemática representando a transição de Anderson.	4
1.1	Diagrama de fase para o V_2O_3	7
1.2	Resistividade em função da pressão para o V_2O_3 dopado com Cr	8
1.3	Espectro de fotoemissão para a fase metálica do V_2O_3	8
1.4	Condutividade do V_2O_3 em função da pressão para diferentes temperaturas.	9
1.5	Microscopia de fotoemissão do $(V_{0.989}Cr_{0.011})_2O_3$	10
1.6	Medidas de resistividade e diagrama de fase para o composto orgânico $\kappa - Cl$	10
1.7	Resultado experimental para o peso espectral em função da frequência para o composto orgânico $\kappa - Cl$ dopado com Br	11
1.8	Resultados experimentais para a densidade de estados local para diferentes concentrações de Mn em $Ga_{1-x}Mn_xAs$	12
1.9	Resistividade do NiS_2 e diagrama de fase para o $NiS_{2-x}Se_x$	13
1.10	Medidas experimentais em redes óticas: desordem crítica em função da interação.	13
1.11	Medidas experimentais em redes óticas: fração de dupla ocupação em função da desordem.	14
1.12	Resistividade em função da temperatura para diferentes valores de desordem: comparação entre resultados experimentais e teóricos (TCMD).	16
1.13	Comportamento da região de coexistência metal-isolante de Mott em função da desordem para TCMD.	17
1.14	Diagrama de fase $W \times U$ a $T = 0$ obtido por TMT-TCMD.	17

1.15	Representação esquemática dos isolantes de Anderson, Mott e Mott-Anderson no limite atômico.	18
2.1	Rede de Bethe com conectividade $z = 3$	22
2.2	Diagrama de Feynman de segunda ordem na expansão perturbativa da função de Green do problema de uma impureza.	26
2.3	Linha de “crossover” próxima à transição metal-isolante de Mott.	29
3.1	Cálculo autoconsistente da TMT incorporada à TCMD.	40
4.1	Densidade de estados de problemas de uma impureza.	44
4.2	Diagrama esquemático $T \times U$ incluindo a região de coexistência e as linhas espinoidais.	45
4.3	Região de coexistência para os casos limpo ($W = 0$) e desordenado ($W = 0.8$) . .	47
4.4	Densidade de estados obtida via TCMD para $U = 1$ e $U = 3$ e diferentes valores de W - alargamento da banda devido à desordem	48
4.5	Densidade de estados típica e média em função da frequência para $U = 1.5$ e $U = 1.6$, com $W = 0.8$ e $T = 0.01$ - localização na borda das bandas	48
4.6	Curvas de histerese para a densidade de estados típica e média no nível de Fermi em função de U , para $T = 0.01$ e diferentes valores de W	49
4.7	Transição de Mott: densidade de estados e número de ocupação local por spin para $U = 1.4$ e $U = 1.6$, com $W = 0.8$ e $T = 0.01$	50
4.8	Análise da linha de “crossover” para um sistema desordenado ($W = 0.8$)	51
4.9	Densidades de estados típicas em torno da linha de “crossover” ($T = 0.03$) e da linha de transição de fase ($T = 0.017$) para $W = 0.8$	52
4.10	Linhas de “crossover” para diferentes valores de desordem. Comparação entre TMT-TCMD e TCMD.	53
4.11	TMT-TCMD e TCMD - Temperatura crítica em função da desordem.	54
4.12	DE típica para $W = 2$ e $T = 0.008$ obtidas para U crescente e decrescente.	55
4.13	Transição de Anderson: Densidades de estado para $U = 0.1$ e $U = 1.0$ e alguns valores de desordem; e densidade de estados típica integrada em função de W . Resultados para $T = 0.005$	56

4.14	Transição de Anderson: densidade de estados e número de ocupação local por spin para $W = 2.3$ e $W = 2.8$, com $U = 1.0$ e $T = 0.005$	57
4.15	Diagrama de fase de sistemas correlacionados e desordenados a $T = 0.008$	58
4.16	DE no nível de Fermi e DE integrada na frequência em função de U para diferentes valores de W . Resultados para $T = 0.008$	59
4.17	DE típica em função da frequência para alguns valores fixos de W e diferentes valores de U . Resultados para $T = 0.008$	60
4.18	Número de ocupação por spin em função da energia do sítio para transições de Mott. Resultados para $T = 0.008$	61
4.19	Número de ocupação por spin em função da energia do sítio para $W = 2.5$ e $T = 0.008$	61
4.20	Resultados para $U = 1.75$, $T = 0.008$, aumentando W	62
4.21	Transição entre isolante de Mott e isolante de Anderson: resultados para $U = 3$ e $T = 0.008$, aumentando W	62

Lista de siglas

CPA Aproximação do Potencial Coerente.

(Do inglês “Coherent Potential Approximation”);

DE Densidade de estados;

TCMD Teoria de Campo Médio Dinâmico;

TMT Teoria do Meio Típico;

IPT Teoria de perturbação iterativa.

(Do inglês “iterative perturbation theory”);

LWQ Linha de Widom quântica.

Sumário

Introdução	1
1 Motivações	7
1.1 Evidências experimentais	7
1.2 Trabalhos numéricos	15
2 Sistemas fortemente correlacionados	19
2.1 Teoria de Campo Médio Dinâmico	19
2.1.1 TCMD para o caso de uma rede de Bethe	22
2.2 Solução do problema de uma impureza: Teoria de Perturbação Modificada	23
2.3 Formulação alternativa da TCMD	27
2.4 Determinação de T_c a partir da região de “crossover”	28
3 Sistemas desordenados	33
3.1 Aproximação do Potencial Coerente	33
3.2 Localização de Anderson	35
3.3 Teoria do Meio Típico	37
3.4 Correlação e desordem: TCMD e TMT-TCMD	39
4 Resultados	43
4.1 Problema de uma impureza	43
4.2 Transição de Mott no modelo de Hubbard - caso limpo	44
4.3 Efeitos de localização de Anderson na transição de Mott - Regime de $U > W$	46
4.3.1 Efeitos de desordem sobre a região de coexistência	46
4.3.2 Temperatura crítica - uma análise a partir da região de “crossover”	50
4.4 Transição metal-isolante induzida por desordem - Regime de $W > U$	55
4.5 Diagrama de fase de sistemas correlacionados e desordenados, com ênfase no regime de $U \approx W$	57
Conclusão	63
Referências Bibliográficas	65

A	Segunda quantização para férmions	69
B	Funções de Green	71
B.1	Funções de Green de uma partícula - uma abordagem a partir de equações de Schroedinger	71
B.2	Funções de Green de uma partícula em sistemas de muitos corpos	73
B.3	Um exemplo: função de Green para férmions livres	73
C	Sistemas a temperatura finita	77
D	Transformada de Hilbert	79

Introdução

O contexto de investigação no qual o assunto desta dissertação está inserido pode ser resumido por meio do título do célebre artigo de Phil W. Anderson, “Mais é diferente” [1]. Sistemas de muitos corpos apresentam fenômenos emergentes que não podem ser entendidos através do estudo de cada uma das partículas separadamente. A interação elétron-elétron, por exemplo, pode alterar as propriedades de transporte de um material. Esse é o caso de sistemas que possuem orbitais d ou f semi-preenchidos, nos quais a competição entre a energia cinética e a energia de interação entre elétrons que ocupam esses orbitais pode levar a uma transição metal-isolante. Além disso, sistemas reais possuem dopantes ou impurezas, o que também pode alterar as características do sistema.

Este documento tem como objetivo apresentar o estudo de sistemas fortemente correlacionados e desordenados no qual investigamos, mais especificamente, como efeitos de correlação e desordem se combinam no processo de localização das funções de onda eletrônicas e transições de fase metal-isolante. Descrevemos então, nesta introdução, os isolantes de Mott [2] e Anderson [3], gerados por interação e desordem, respectivamente.

É comum, no contexto de propriedades de transporte de sistemas em estado sólido, diferenciar um metal de um isolante por meio da teoria de bandas. Essa teoria descreve o comportamento de um conjunto de átomos agrupados na formação de um sólido. Os níveis atômicos de energia, que são discretos, se sobrepõem formando bandas, ou seja, regiões de energia permitidas. As regiões entre bandas, que não possuem energias permitidas, são chamadas de “gaps”. Segundo essa descrição, um material é considerado metálico quando o nível de Fermi encontra-se dentro da banda, o que faz com que essa seja parcialmente preenchida e haja um contínuo de energia disponível para excitações. Já nos isolantes, o nível de Fermi encontra-se entre as bandas. Isso restringe a mobilidade dos elétrons, que precisam transpor um “gap” para atingir novos estados permitidos de energia.

Essa teoria aplica-se a grande parte dos casos, mas falha ao determinar a condutividade de certos materiais. Alguns sistemas deveriam ser metálicos por uma descrição de teoria de bandas, mas apresentam resistividades características de um isolante. Isso ocorre porque o caráter itinerante dos elétrons pode ser limitado por outros mecanismos não considerados na teoria de bandas. A presença de forte interação entre os elétrons ou de desordem, por exemplo, são fatores que geram efeitos de localização das funções de onda eletrônicas, resultando em transições metal-isolante.

A figura 1 mostra esquematicamente os mecanismos responsáveis pela transição de Mott,

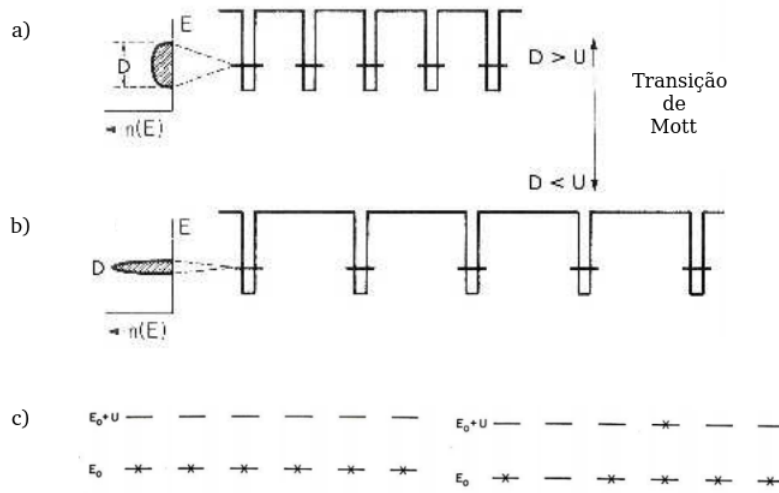


Figura 1: Diagrama esquemático representando a transição de Mott. Os átomos são representados como poços de potenciais. Comparando (a) e (b) vemos que a largura da banda diminui quando os átomos se afastam. Em (c) vemos que é preciso fornecer uma energia U para que um sítio seja duplamente ocupado. Itens (a) e (b) retirados de [4].

representando átomos como poços quânticos de potencial. Em uma análise inicial negligenciamos a interação Coulombiana entre elétrons no mesmo sítio e consideramos que os níveis de energia dos poços são degenerados, e podem estar vazios, ocupados com um único elétron ou duplamente ocupados (com elétrons de spins opostos). Essa consideração é uma boa aproximação quando a energia de interação elétron-elétron U é pequena em relação à energia cinética do sistema. Mas, conforme visto em (a) e (b), à medida que a distância interatômica aumenta, a sobreposição entre as funções de onda de elétrons em diferentes sítios diminui. Isso reduz a energia cinética do sistema e, conseqüentemente, reduz a largura D da banda. A partir do momento em que a energia cinética diminui e torna-se comparável a U , devemos considerar um sítio duplamente ocupado como dois níveis, um com energia ϵ e outro com energia $\epsilon + U$ (como visto em (c)). Quando a energia U necessária para que um sítio seja duplamente ocupado torna-se relevante na escala de energia do sistema, este torna-se um isolante de Mott.

Sistemas de muitos corpos não possuem solução trivial, devido ao termo de interação elétron-elétron. Em especial, a transição de Mott não pode ser tratada no limite de teoria de perturbação, pois há vários mecanismos físicos competindo, mesmo nos modelos mais simples. A Teoria de Campo Médio Dinâmico (TCMD) [5] apresenta uma solução para esses problemas, incluindo uma boa descrição da transição de Mott. Nessa teoria, mapeamos o problema de uma rede em um modelo de uma impureza envolvida por um banho de elétrons livres, determinado de forma autoconsistente (veja figura 2). O problema de uma impureza já foi muito estudado e encontramos na literatura diferentes métodos para sua solução. Alguns exemplos são Hartree-Fock, bósons escravos, Monte Carlo quântico e teoria de perturbação.

O mapeamento da TCMD torna-se exato no limite de dimensão infinita, ou mais especifica-

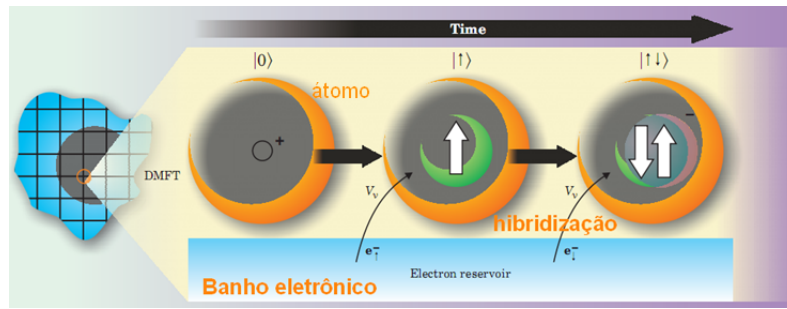


Figura 2: Mapeamento e evolução temporal da TCMD. Olhamos para um único sítio, que pode ser visto como um átomo ou uma impureza, enquanto os demais sítios formam um banho de elétrons livres que interage com o átomo, podendo ganhar ou ceder elétrons. A interação elétron-elétron está presente quando dois elétrons ocupam a impureza. Figura retirada de [6].

mente no limite em que a coordenação da rede z vai a infinito (note que z pode ser considerável mesmo em redes simples; por exemplo, no caso de uma rede cúbica de face centrada cada sítio conecta-se a $z = 12$ primeiros vizinhos). A denominação “Teoria de Campo Médio Dinâmico” deve-se ao fato de se tratar de uma aproximação local, que não leva em consideração flutuações espaciais, porém mantém a dependência com a energia, ou seja, leva em consideração flutuações temporais. Tais flutuações são importantes porque os elétrons podem “pular” da impureza para o banho e voltar, conforme visto na figura 2.

O modelo mais simples que considera a competição entre energia cinética e energia de interação elétron-elétron é o modelo de Hubbard, que é discutido com mais detalhes no capítulo 2. Um resultado numérico para a transição de Mott, obtido por TCMD para esse modelo, pode ser visto na figura 3, que apresenta a densidade de estados em função da energia. Inicialmente temos uma densidade de estados metálica, na qual o nível de Fermi se encontra no centro da banda. À medida que aumentamos a interação U , surge um “gap” no nível de Fermi, indicando que o material foi da fase metálica para a fase isolante.

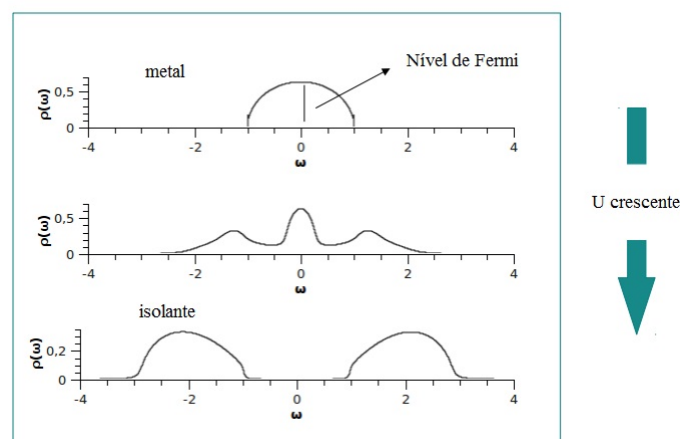


Figura 3: Densidade de estados em função da energia para U crescente.

Assim como no caso do isolante de Mott, o isolante de Anderson também tem uma origem física diferente da do isolante de banda. A transição delocalização \rightarrow localização ocorre devido à desordem dos níveis de energia, como pode ser visto na figura 4. Quando acrescentamos desordem, cada nível fica deslocado por uma energia aleatória ϵ_i ($-\frac{W}{2} < \epsilon_i < \frac{W}{2}$, sendo W a largura da distribuição $P(\epsilon)$ da desordem). Se $W < D$ os elétrons se movem com relativa facilidade de um sítio para outro, o que não ocorre no caso $W \gg D$. Assim, as funções de onda eletrônicas se tornam localizadas quando aumentamos W . A localização começa pelas bordas das bandas, pois os elétrons com tais energias já possuem menor mobilidade, uma vez que há um menor número de vizinhos com energias próximas. O limite entre estados localizados e estado estendidos, conhecido como *borda de mobilidade*, se move para o centro da banda à medida que aumentamos W . Anderson mostrou que, no limite $W \gg D$, todos os elétrons na banda tornam-se localizados [7] e o material torna-se um isolante, apesar de não apresentar um “gap”.

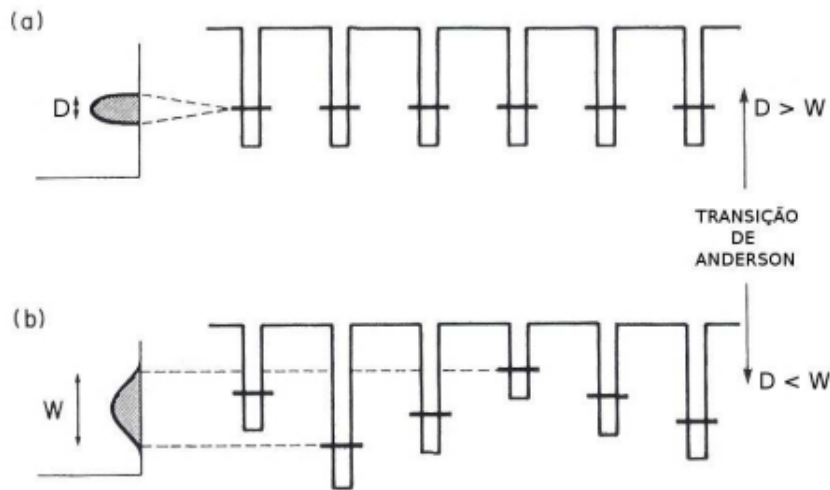


Figura 4: Figura esquemática representando a transição de Anderson. Com a desordem, os níveis de energia ficam organizados de forma aleatória. Figura retirada de [4].

Quando incluímos desordem, as características do sistema variam de sítio para sítio, de forma que uma média aritmética pode não representar bem o comportamento do sistema como um todo. O valor mais provável (típico), por outro lado, fornece um bom indicativo do estado do sistema. A localização devido à desordem pode ser descrita, então, pela Teoria do Meio Típico (TMT), na qual a densidade de estados típica, determinada de forma autoconsistente, corresponde a um parâmetro de ordem para a localização de Anderson. A TMT tem como base o trabalho de V. Dobrosavljevic, A. A. Pastor e Branislav K. Nikolic de 2003 [8], e é descrita no capítulo 3.

Como tanto a correlação quanto a desordem levam a efeitos de localização, e muitas vezes em escalas de energia comparáveis, é interessante estudar a forma como esses mecanismos se combinam em diferentes regiões do diagrama de fase de sistemas interagentes e desordenados. Estamos interessados em observar, por exemplo, os efeitos de localização de Anderson sobre a

região de coexistência metal-isolante presente na transição de Mott¹. Essa análise é apresentada na presente dissertação. Usamos uma combinação de TCMD com TMT para descrever os sistemas fortemente correlacionados e desordenados de nosso interesse.

Esse documento está organizado da seguinte forma:

- No capítulo 1 apresentamos uma revisão da literatura, incluindo motivações experimentais relacionadas a sistemas correlacionados e desordenados, bem como trabalhos teóricos sobre o mesmo tema.
- No capítulo 2 descrevemos o tratamento de sistemas fortemente correlacionados via TCMD. Além disso, discutimos uma formulação alternativa para TCMD, baseada no funcional de energia livre de Landau.
- O capítulo 3 contém a descrição de dois tratamentos para sistemas desordenados, a Aproximação de Potencial Coerente e a Teoria do Meio Típico, sendo que a primeira oferece uma descrição satisfatória para desordem pequena a moderada e a segunda é capaz de descrever sistemas muito desordenados, incluindo efeitos de localização de Anderson. Discutimos ainda como incluir correlação e desordem em um mesmo tratamento.
- O capítulo 4 é dedicado à apresentação dos nossos resultados.

¹A temperatura finita, a transição de Mott é de primeira ordem. Assim, próximo do U crítico para o qual ocorre a transição e abaixo de uma temperatura T_c , observamos uma região de coexistência metal-isolante. Essa região é descrita com mais detalhes ao longo deste trabalho. No capítulo 1, por exemplo, apresentamos resultados experimentais para a região de coexistência presentes na literatura.

Capítulo 1

Motivações

Apresentamos, neste capítulo, uma revisão da literatura relacionada a sistemas fortemente correlacionados e/ou desordenados, incluindo tanto trabalhos experimentais quanto teóricos que serviram de motivação para o estudo realizado nesta dissertação.

1.1 Evidências experimentais

Conforme dito na introdução, materiais com orbitais d ou f semi-preenchidos, tais como terras raras, actinídeos, metais de transição e seus óxidos, possuem bandas estreitas; assim, os elétrons encontram-se espacialmente confinados dentro desses orbitais, apresentando forte repulsão coulombiana. Observações experimentais demonstram que a correlação eletrônica tem

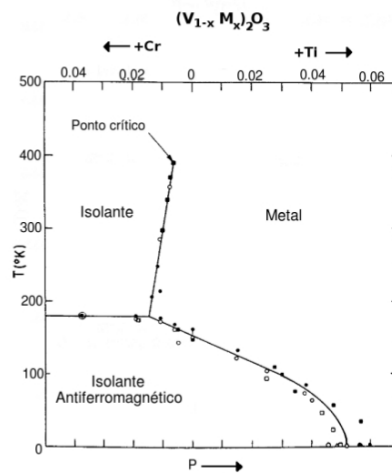


Figura 1.1: Diagrama de fase para o V_2O_3 em função da pressão e da dopagem com Cr e Ti . Figura retirada de [9].

consequências relevantes sobre as propriedades desses materiais, que se tornam muito sensíveis às variações de parâmetros externos, tais como presença de impurezas e variações de temperatura e pressão. Um exemplo pode ser visto por meio do diagrama de fase do V_2O_3 , apresentado

na figura 1.1. A transição metal-isolante de Mott pode ser observada no diagrama em função da dopagem ou da pressão. Diminuir a pressão, externa ou química (devido à dopagem), leva a uma redução da energia cinética, o que equivale a aumentar a energia de interação elétron-elétron U . Quando U torna-se superior à energia cinética, o sistema vai da fase metálica para a fase isolante, como pode ser visto na figura 1.1 para temperaturas acima de ≈ 200 K.

O V_2O_3 foi um dos primeiros compostos no qual observou-se a transição de Mott. Medidas de resistividade mostram que o aumento da pressão induz o sistema a uma transição isolante-metal, representada pela diminuição abrupta da resistividade, como apresentado na figura 1.2. O diagrama da figura 1.1 foi obtido a partir de várias medidas como a da figura 1.2.

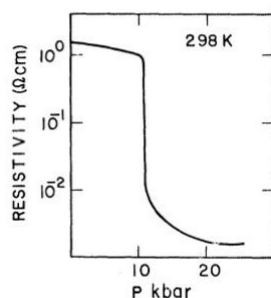


Figura 1.2: Medida experimental para a resistividade em função da pressão para V_2O_3 dopado com Cr ($(V_{0.96}Cr_{0.04})_2O_3$) a temperatura ambiente. Figura retirada de [10].

Vimos que a TCMD é capaz de descrever a transição de Mott, fornecendo-nos a densidade de estados $\rho(\omega)$ do sistema. No caso do modelo de Hubbard, $\rho(\omega)$ é caracterizada por duas bandas de Hubbard, originadas por excitações locais e alargadas pelo “hopping”, e um pico de quase-partícula próximo ao nível de Fermi, que desaparece na fase isolante. Experimentalmente a existência do pico de quase-partícula pode ser observada por espectroscopia de fotoemissão, conforme apresentado na figura 1.3 para a fase metálica do V_2O_3 .

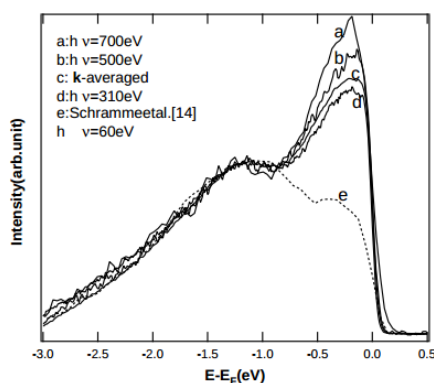


Figura 1.3: Espectro de fotoemissão para o V_2O_3 próximo à transição. O experimento comprova a existência de um pico de quase-partícula próximo ao nível de Fermi. Figura retirada de [11].

Outro aspecto descrito pela TCMD e observado experimentalmente é a presença de uma região de coexistência metal-isolante na transição de Mott. Uma comprovação experimental pode ser vista na figura 1.4, que apresenta uma análise da transição de Mott realizada por Limelette *et al.* em 2003 [12].

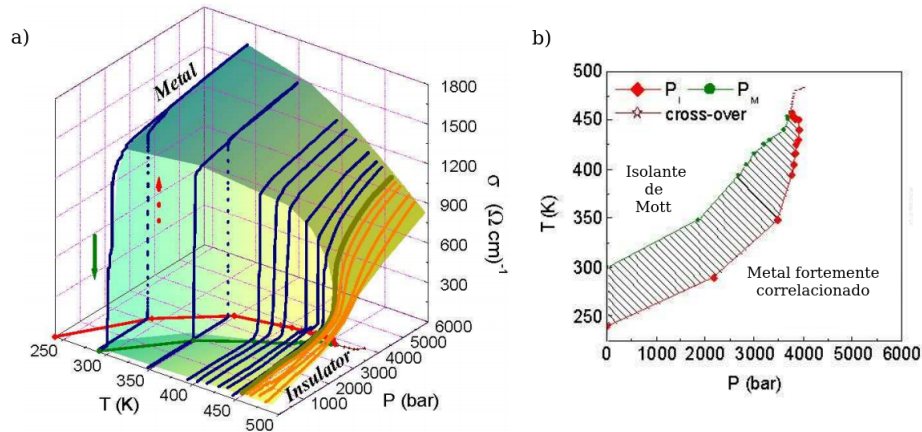


Figura 1.4: (a) Condutividade do V_2O_3 em função da pressão para diferentes temperaturas na região entre $290 \text{ K} < T < 485 \text{ K}$. (b) Diagrama de fase do V_2O_3 , com destaque para as linhas espinoidais que delimitam a região de coexistência. Figura retirada de [12].

Na figura citada acima, vemos medidas de condutividade em um cristal de $(V_{0.989}Cr_{0.011})_2O_3$ em função da pressão para diferentes temperaturas no intervalo entre $290 \text{ K} < T < 485 \text{ K}$. Para determinar o ponto crítico, investigar a natureza de primeira ordem da transição e mapear a região de coexistência, Limelette *et al.* utilizam experimentos de histerese nos quais a condutividade é medida para pressão crescente e decrescente. Para temperaturas abaixo da temperatura crítica $T_c \simeq 457.5 \text{ K}$, a transição metal-isolante é descontínua, com um salto na condutividade, enquanto acima de T_c a transição é contínua, como pode ser visto em 1.4(a). Das diferentes medidas de condutividade nesses dois caminhos, é possível definir duas curvas de pressões características em função da temperatura, $P_M(T)$ e $P_I(T)$, que correspondem à menor pressão na qual pode-se encontrar o estado metálico enquanto a pressão é reduzida e à maior pressão na qual pode-se encontrar um isolante enquanto aumenta-se a pressão, respectivamente. As duas curvas definem linhas espinoidais que se fecham no ponto crítico de segunda ordem, conforme visto na figura 1.4(b).¹

Uma visão microscópica da região de coexistência pode ser observada na figura 1.5, que apresenta resultados de medidas de microscopia de fotoemissão em compostos de $(V_{0.989}Cr_{0.011})_2O_3$ realizadas por S. Lupi *et al.* em 2010 [13]. A $T = 220 \text{ K}$ o sistema está na região de coexistência e domínios metálicos (em vermelho) coexistem com regiões isolantes (em azul). À medida que aumentamos a temperatura o sistema se torna isolante. Reduzindo novamente a temperatura, os domínios metálicos voltam a parecer.

Mais recentemente a transição de Mott foi observada também em compostos orgânicos da

¹O estudo desta região de coexistência é um dos principais objetivos desta dissertação.

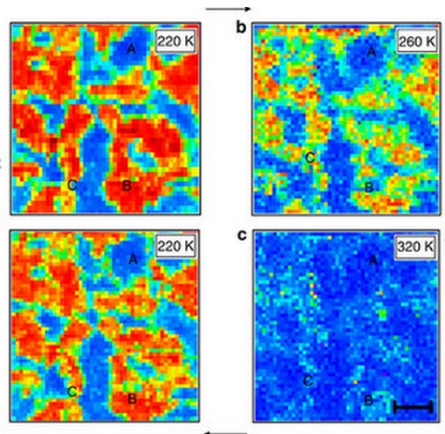


Figura 1.5: Resultados experimentais de microscopia de fotoemissão em $(V_{0.989}Cr_{0.011})_2O_3$ coletados a diferentes temperaturas em amostras de $50 \times 50 \mu m$ de área. O contraste entre regiões metálicas e isolantes foi obtido pela intensidade de fotoemissão no nível de Fermi. Regiões em vermelho correspondem a domínios metálicos e em azul a domínios isolantes. Figura retirada de [13].

família $\kappa - (BEDT - TTF)_2X$, onde X é um monômio. Um exemplo pode ser visto na figura 1.6, que apresenta resultados para $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu[N(CN)_2]Cl$ obtidos por P. Limelette *et al.* [14]. Na figura 1.6(a), vemos curvas de histerese para a condutividade obtidas a temperaturas fixas, para pressão crescente (P_{inc}) e decrescente (P_{dec}). A partir desses resultados Limelette *et al.* construíram o diagrama de fase apresentado na figura 1.6(b), no qual podemos ver a região de coexistência entre as duas linhas espinoidais $P_1^c(T)$ e $P_2^c(T)$, obtidas a partir de medidas a pressão crescente e decrescente, respectivamente.

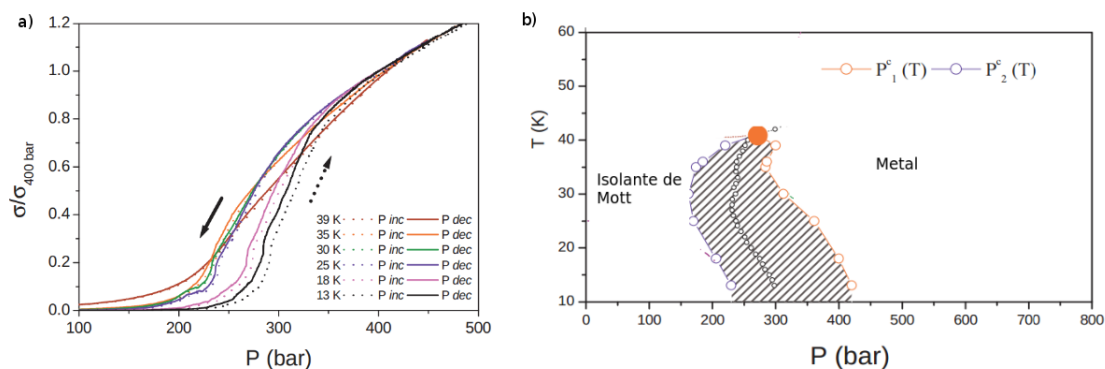


Figura 1.6: (a) Medidas de resistividade em $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu[N(CN)_2]Cl$ para diferentes temperaturas a pressão crescente (P_{inc}) e decrescente (P_{dec}) e (b) diagrama de fase incluindo as duas linhas espinoidais e a região de coexistência metal-isolante. Figura adaptada de [14].

Outro exemplo de transição de Mott em compostos orgânicos, porém induzida por pressão química ao invés de pressão externa, é apresentado na referência [15]. Neste trabalho, os autores

observam a transição entre um isolante e um metal pela substituição gradual de Cl por Br em $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu[N - (CN)_2]Br_xCl_{1-x}$. Na figura 1.7, vemos que, para $x = 0$, não há peso espectral na região de baixas frequências (próximo ao nível de Fermi), caracterizando um isolante de Mott. À medida que a concentração de Br aumenta, passa a haver peso espectral preenchendo o “gap” e o material torna-se metálico. Isso ocorre porque um acréscimo de pressão química leva a um aumento da energia cinética.

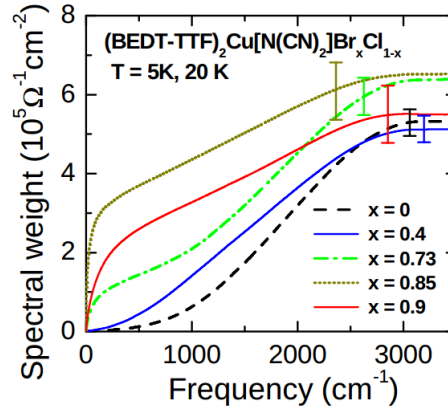


Figura 1.7: Resultado experimental para o peso espectral em função da frequência para diferentes concentrações de Br no composto orgânico $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu[N - (CN)_2]Br_xCl_{1-x}$. O peso espectral foi obtido por integração da condutividade. As medidas foram realizadas a baixas temperaturas: $T = 5$ K para concentrações $x = 0$ e $x = 0.4$ e $T = 20$ K para as demais concentrações. Figura retirada de [15].

A localização de Anderson também pode ser observada em trabalhos experimentais. O comportamento da densidade de estados (DE) local na presença de desordem, por exemplo, pode ser visto na figura 1.8 para diferentes concentrações de Mn em $Ga_{1-x}Mn_xAs$. Para desordem fraca, há estados estendidos no sistema e a DE local varia pouco de sítio para sítio, enquanto que, à medida a concentração de impurezas aumenta, os estados vão se tornando localizados e a DE local passa a variar muito de um sítio para o outro.² Os autores deste trabalho ressaltam ainda que o mecanismo responsável pela transição delocalização \rightarrow localização nesses semicondutores dopados não é completamente compreendido, pois, além de efeitos de desordem, há influência de interação elétron-elétron sobre os sistemas.

Há também motivações experimentais para estudarmos os efeitos de desordem sobre a transição metal-isolante de Mott. É uma prática comum em montagens experimentais substituir a pressão física por pressão química (como visto por exemplo nas figuras 1.1 e 1.7), pois a variação de ânions gera uma mudança na largura da banda de forma semelhante à aplicação de pressão externa. A pressão química, no entanto, provoca não só uma variação na razão entre energia de interação elétron-elétron e energia cinética, U/t , mas também acrescenta desordem ao sistema. Algumas vezes esses efeitos se combinam de maneiras não triviais.

²O valor mais provável desta DE local pode ser considerado um parâmetro de ordem para a localização de Anderson. Essa ideia é empregada na Teoria do Meio Típico, que utilizamos em nosso trabalho numérico.

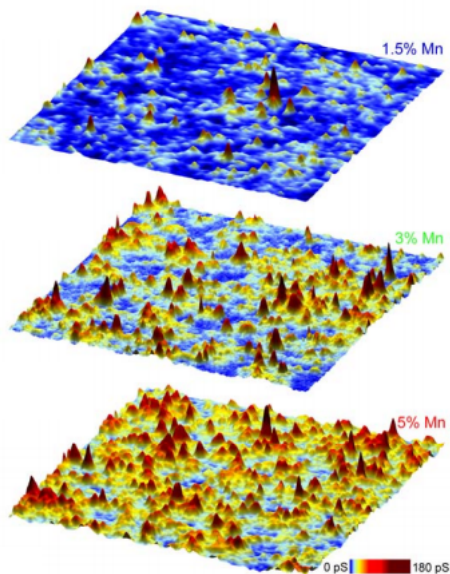


Figura 1.8: Densidade de estados local próximo ao nível de Fermi para diferentes concentrações de Mn em $Ga_{1-x}Mn_xAs$. Medidas realizadas por microscopia de varredura por tunelamento (STM, do inglês “Scanning Tunneling Microscopy”) em amostras de 700 \AA por 700 \AA de área. Figura retirada de [16].

O efeito da desordem sobre a região de coexistência e sua influência sobre a temperatura crítica, na qual as duas linhas espinoidais do diagrama de fase se encontram, podem ser observados experimentalmente. Na figura 1.9(a) vemos que a transição metal-isolante em um cristal de NiS_2 submetido a uma pressão externa $P = 3.0 \text{ GPa}$ ocorre a temperatura $T = 150 \text{ K}$ e é de primeira ordem (descontínua). M. Matsuura *et al.* [18], no entanto, realizaram medidas em $NiS_{2-x}Se_x$ e observaram que, para uma concentração de Se de $x = 0.6$ (que pode ser convertido em $P \approx 3 \text{ GPa}$), a transição metal-isolante é de primeira ordem apenas até $T \approx 100 \text{ K}$, conforme visto no diagrama de fase da figura 1.9(b). Na referência [18], os autores observam que, considerando-se a aplicação de pressão externa equivalente a trocar S por Se , os dois resultados são contraditórios. Isso representa um indício de que a substituição de S por Se gera efeitos de desordem, que tendem a diminuir a temperatura crítica na qual acaba a região de coexistência.

Em um outro contexto, o de redes óticas, S. S. Kondov *et al.* [19] estudam o efeito de desordem sobre sistemas fortemente correlacionados, simulando experimentalmente um modelo de Hubbard desordenado. Nesse experimento, átomos fermiônicos de ^{40}K resfriados abaixo da temperatura de Fermi T_F e confinados em uma rede ótica cúbica - produzida por três pares de feixes de lasers emitidos em sentidos opostos - fazem o papel de elétrons em um sólido. Uma mistura aproximadamente igual de 2 estados atômicos hiperfinos é usada para reproduzir os spins. Na rede, os átomos podem tunelar entre sítios adjacentes e dois átomos ocupando o mesmo sítio (em dois estados hiperfinos diferentes) interagem por meio de colisões de baixa energia. Essa

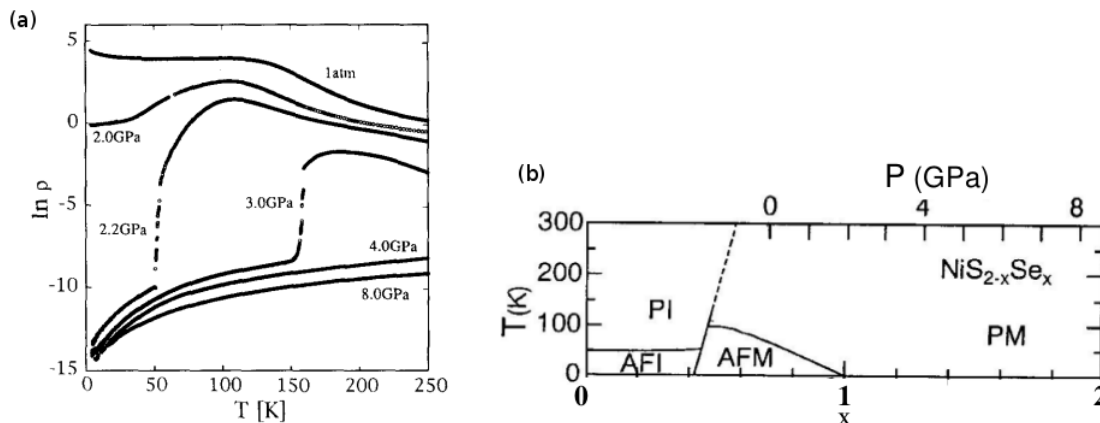


Figura 1.9: (a) Medidas de resistividade de um cristal de NiS_2 em função da temperatura para diferentes pressões. Podemos ver que para uma pressão $P = 3$ GPa a transição é de primeira ordem e ocorre a $T \approx 150$ K. Figura retirada de [17]. (b) Diagrama de fase para o $NiS_{2-x}Se_x$ obtido por microscopia de fotoemissão. Figura retirada de [18]

interação é controlada ajustando-se a potência de um laser da rede (de comprimento de onda $\lambda = 782.2$ nm), que determina a profundidade s dos poços de potencial. A desordem é produzida passando-se um laser de 532 nm por um difusor holográfico, e então incidindo-o sobre a rede ótica, de forma que o potencial dos átomos varia aleatoriamente no espaço. A magnitude da desordem Δ pode ser continuamente ajustada pela potência desse laser. As energias são medidas em unidades da energia de recuo atômico, dada por $E_R = h^2/8md^2 = 390k_B nK$, sendo $d = \lambda/2$ o espaçamento atômico, m a massa do átomo e h e k_B as constantes de Planck e Boltzmann.

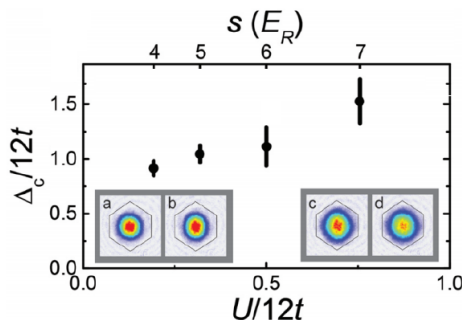


Figura 1.10: Desordem crítica $\Delta_c/12t$ em função da interação $U/12t$ (controlada pela profundidade s do poço de potencial). As barras mostram a incerteza experimental ao determinar a desordem crítica a partir das medidas de transporte. No “inset” vemos medidas de distribuição de quase-momento em fatias 2D para $s = 4 E_R$ e dois valores diferentes de Δ , $\Delta = 0 E_R$ em (a) e $\Delta = 1.46 E_R$ em (b), e também $s = 7 E_R$, com $\Delta = 0 E_R$ em (c) e $\Delta = 1.46 E_R$ em (d). Esses resultados mostram que a interação alarga a distribuição. Figura retirada de [19].

Medidas de transporte são realizadas como a resposta da distribuição de quase-momento atômico $n(q)$ a um impulso aplicado. Na fase metálica, a aplicação de uma força externa

induz uma velocidade no centro de massa de $n(q)$, que se manifesta como uma assimetria nessa distribuição. Os autores observam que, para todas as profundidades do poço de potencial, um aumento da desordem Δ produz uma redução dessa velocidade. Para identificar uma transição metal-solante induzida por desordem, eles definem Δ_c para o qual a velocidade do centro de massa vai a zero dentro da resolução experimental $v_{res} = 0.05\text{mm/sec}$. Na figura 1.10 vemos que um aumento de U (correspondente a um aumento na profundidade dos poços) aumenta Δ_c , ou seja, estabiliza a fase metálica. Isso ocorre porque a interação U transfere população para estados mais energéticos (como é mostrado nos “insets” da figura 1.10 para $s = 4E_R$ e $s = 7E_R$), o que faz com que mais desordem seja necessária para localizar todos os estados.

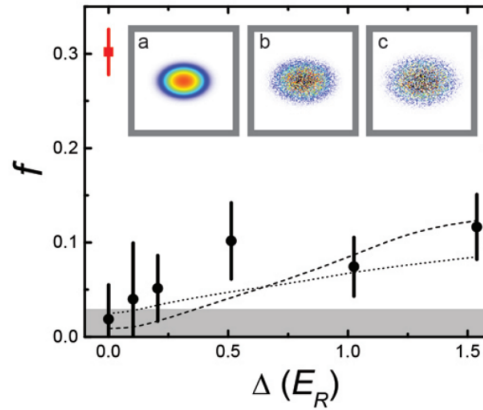


Figura 1.11: Fração de dupla ocupação f em função da desordem Δ . Os círculos pretos representam medidas realizadas para $s = 10 E_R$. f aumenta à medida que aumentamos Δ ; porém, por maior que seja a desordem, f não atinge valores característicos da fase metálica (como o apresentado pelo quadrado vermelho, obtido a $s = 4 E_R$). As linhas tracejadas e pontilhadas representam previsões no limite atômico nos casos de baixa e alta temperaturas, respectivamente, enquanto a faixa em cinza corresponde à incerteza média de f para um gás de spins polarizados, modelo no qual não é permitida dupla ocupação. No “inset” vemos perfis espaciais de DE obtidas por meio de cálculos para o modelo de Hubbard no limite atômico para $\Delta = 0, 0.5$ e $1E_R$ [(a), (b) e (c), respectivamente]. Estados vazios são apresentados em branco, enquanto estados ocupados com apenas um férmion aparecem em vermelho e aqueles com ocupação maior do que um, em preto. Figura retirada de [19].

Nesse experimento, S. S. Kondov *et al.* também medem a fração de dupla ocupação à medida que Δ varia para $s = 10E_R$ fixo (correspondente a $U/12t = 2.25$), determinando assim os efeitos da desordem sobre a fase isolante de Mott. Eles observam um aumento na dupla ocupação f à medida que desordem é adicionada ao caso limpo, conforme apresentado na figura 1.11. $f \approx 0.02$ para $\Delta = 0.0E_R$ e satura em $f \approx 0.13$ a partir de $\Delta \approx 0.5 E_R$. Essa escala na qual f aumenta é aproximadamente igual a U , o que sugere que, quando Δ é comparável a U , a barreira energética para dupla ocupação é removida. Para checar quantitativamente essas interpretações, os autores comparam os resultados com previsões para o modelo de Hubbard desordenado no limite atômico. Resultados para esse limite são representados pelas linhas tracejada (baixa tempera-

tura) e pontilhada (alta temperatura) e concordam bem com os resultados experimentais. Eles observam ainda que, apesar da desordem aumentar a dupla ocupação, não é possível atingir o caso metálico (quadrado vermelho) aumentando Δ , provavelmente porque a desordem faz com que alguns estados antes ocupados passem a ficar vazios, além de permitir estados duplamente ocupados, conforme observado no “inset” da figura 1.11.

1.2 Trabalhos numéricos

A transição de Mott em óxidos de metais de transição já era observada na década de 60 [10, 20], porém a descrição teórica desses compostos não acompanhava as observações experimentais, devido à dificuldade de se tratar inclusive os Hamiltonianos mais simples que incluem interação elétron-elétron. Nesse época apenas sistemas unidimensionais podiam ser descritos de forma satisfatória. Com o aumento do poder computacional, sistemas bi ou tridimensionais passaram a ser descritos com diagonalização exata ou Monte Carlo quântico, mas o primeiro método é restrito a sistemas pequenos e o segundo a temperaturas elevadas [21]. Com o tempo foi-se desenvolvendo tratamentos perturbativos de sistemas de muitos corpos, que descrevem bem alguns limites, mas não a transição metal-isolante de Mott, que encontra-se entre dois extremos, com a energia de interação aproximadamente igual à energia cinética do sistema.

Muito progresso no tratamento de sistemas fortemente correlacionados foi alcançado por meio da Teoria de Campo Médio Dinâmico (TCMD), descrita brevemente na introdução e tratada com detalhes no próximo capítulo. Em 1989 W. Metzner e D. Vollhardt [22] observaram que, no limite em que a coordenação da rede vai a infinito, a autoenergia é local. Com base nessa ideia, A. Georges e G. Kotliar identificaram, em 1992, uma teoria de campo médio para o modelo de Hubbard, análoga a uma teoria de campo médio clássica [5]. Esse método foi então aplicado inúmeras vezes à transição de Mott descrita pelo modelo de Hubbard sem desordem (alguns exemplos podem ser encontrados na referência [23]). O desenvolvimento da TCMD permitiu ainda um tratamento numérico de sistemas fortemente correlacionados e também desordenados.

Por exemplo, motivados pela observação experimental de que a condutividade de sais orgânicos aumenta com o tempo de exposição ao raio-X (o que equivale a acrescentar desordem ao sistema), M. M. Radonjić *et. al.* [24] utilizam TCMD para calcular o efeito da desordem sobre a resistividade no modelo de Hubbard com desordem na energia local. Os autores encontram grande concordância com as observações experimentais, conforme visto na figura 1.12, e mostram que mesmo uma desordem fraca reduz significativamente a resistividade dos sistemas.

M. C. O. Aguiar *et. al.* [26] também resolvem o modelo de Hubbard desordenado por TCMD, com foco para a região de coexistência metal-isolante. Os efeitos da desordem sobre essa região podem ser vistos na figura 1.13, na qual observamos que a desordem W move a transição de Mott para um U maior, além de “encolher” a região na qual há coexistência de fases. Estes resultados concordam com as observações experimentais apresentadas na figura 1.9. Os autores ressaltam que a desordem reduz a temperatura crítica T_c (temperatura na qual as duas linhas espinoidais se encontram), porém esta temperatura permanece finita por maior que seja W .

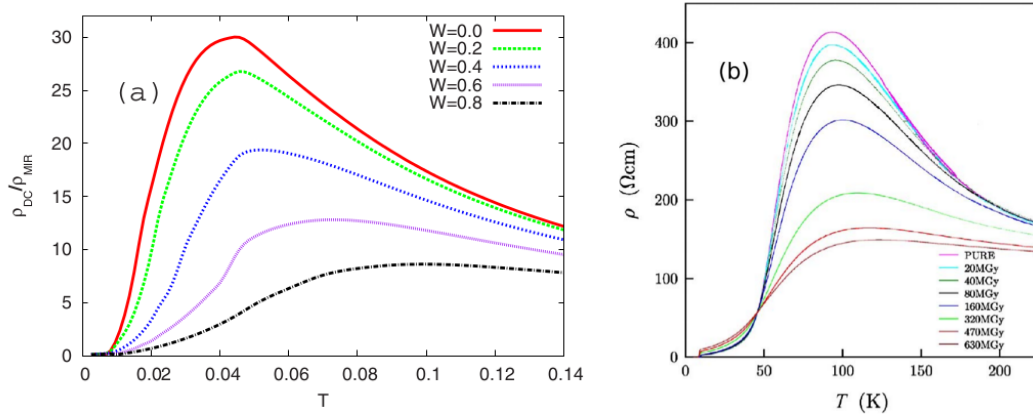


Figura 1.12: (a) Resultados para a resistividade ρ em função da temperatura para diferentes valores de desordem W , obtidos via TCMD para o modelo de Hubbard desordenado. ρ é dada em unidades de ρ_{MIR} , a resistividade no limite de Mott-Ioffe-Regel (MIR), que corresponde à resistividade máxima que pode ser atingida por um metal segundo a teoria semiclássica de Boltzmann; T e W são dados em unidades da meia largura da banda. Figura retirada de [24]. (b) Resultado experimental para o composto orgânico $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu(SCN)_2$. A resistividade foi medida em função da temperatura para diferentes taxas de exposição ao raio-x. Figura apresentada em [24] e retirada de [25].

Note que nos trabalhos citados acima os sistemas foram descritos por TCMD “tradicional”, que não captura efeitos de localização devido à desordem. Em 2003 V. Dobrosavljevic *et.al.* propuseram uma teoria autoconsistente para a localização de Anderson, a Teoria do Meio Típico (TMT) [8], descrita no capítulo 3. Esse método é facilmente incorporado à TCMD, permitindo uma descrição de sistemas fortemente correlacionados e desordenados, incluindo localização devido à desordem. Ao incluir efeitos de localização de Anderson, os resultados podem mudar quantitativamente e, em alguns casos, inclusive qualitativamente, como exemplificado abaixo.

Em 2005 K. Byczuk, W. Hofstetter e D. Vollhardt [27] realizaram um estudo de TMT-TCMD para o modelo de Hubbard desordenado e obtiveram um diagrama de fase $W \times U$ a $T = 0$. O diagrama, reproduzido na figura 1.14, apresenta diferentes linhas de transições de fase. No regime de U pequeno, observamos a transição entre um metal e um isolante de Anderson para W crescente (de acordo com o resultado experimental da figura 1.10). Para W pequeno e U crescente, observamos a transição entre um metal e um isolante de Mott, passando pela região de coexistência. No regime de U e W grandes, vemos ainda uma linha de transição entre os dois tipos de isolantes, sem a presença de uma região metálica intermediária. Provavelmente este terceiro regime corresponde ao que é observado experimentalmente na figura 1.11, na qual vemos que, partindo de um isolante de Mott, um aumento da desordem provoca um aumento da dupla-ocupação, mas sem nunca atingir valores característicos da fase metálica.

Estudos mais detalhados dessas transições, também utilizando TMT-TCMD, foram realizados por M. C. O. Aguiar *et.al.* [28, 29]. Os autores mostram que, para desordem suficientemente grande, a transição de Anderson (no caso interagente também chamada de Mott-Anderson) é

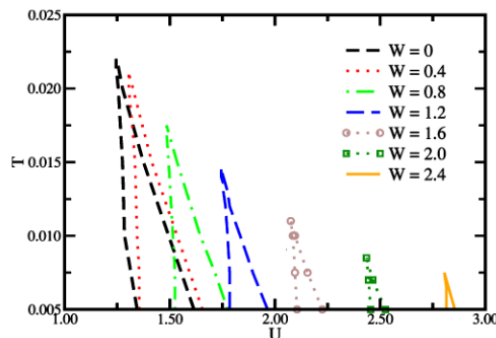


Figura 1.13: Espinoidais que definem a região de coexistência metal-isolante próxima à transição de Mott para diferentes valores da largura da distribuição da desordem W . Resultado retirado de [26], obtido via TCMD para o modelo de Hubbard desordenado.

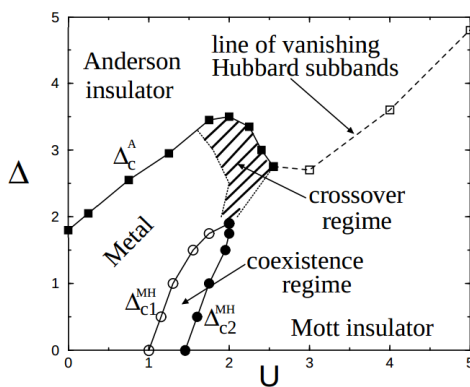


Figura 1.14: Diagrama de fase $W \times U$ a $T = 0$ obtido por TMT-TCMD para o modelo de Hubbard desordenado, sendo os problemas de uma impureza tratados por grupo de renormalização numérico. Figura retirada de [27].

caracterizada por um comportamento de dois fluidos, no qual apenas uma fração de elétrons torna-se localizada devido a efeitos de localização de Anderson, enquanto as partículas restantes passam por uma transição de Mott. Uma representação esquemática, no limite atômico (limite fortemente localizado), para os isolantes de Mott, Anderson e Mott-Anderson é apresentada na figura 1.15. Na ausência de desordem, cada sítio tem dois níveis de energia $\varepsilon_0 = 0$ e $\varepsilon_1 = U$. No caso de semi-preenchimento, cada sítio é ocupado com um único elétron e os níveis ε_1 estão vazios (isolante de Mott, representado à direita na figura 1.15). Quando acrescentamos desordem, cada um dos níveis de energia fica alterado por um valor aleatório $-W/2 < \varepsilon_i < W/2$. Quando $W > U$, os sítios com $\varepsilon_i > U/2$ passam a ter energia $\varepsilon'_0(i) = 0 + \varepsilon_i$ maior que o potencial químico (no caso de semi-preenchimento o potencial químico é dado por $\mu = U/2$) e ficam vazios, enquanto sítios com $\varepsilon_i < -U/2$ passam a ter energia $\varepsilon'_1(i) = U + \varepsilon_i < \mu$ e ficam duplamente ocupados. Dessa forma, uma fração dos sítios é duplamente ocupada (como no isolante de Anderson), enquanto outra parcela de sítios permanece ocupada com um único

elétron (como no isolante de Mott), caracterizando um comportamento de dois fluidos para o isolante de Mott-Anderson.

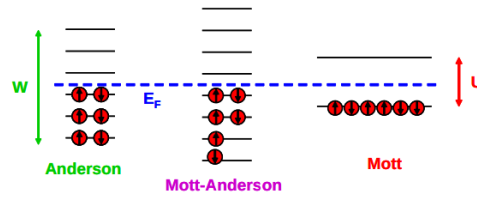


Figura 1.15: Representação esquemática da ocupação dos níveis de energia no limite atômico. Os isolantes de Anderson e Mott estão representados nos extremos esquerdo e direito, respectivamente. No isolante de Mott-Anderson (figura do centro) a largura da desordem W é comparável à energia de interação U , resultando em um comportamento de dois fluidos. Nesse isolante, uma parcela dos estados localizados é duplamente ocupada, como no isolante de Anderson, enquanto a fração restante é ocupada com um único elétron, como um isolante de Mott. A linha pontilhada representa o potencial químico. Figura retirada de [29].

No nosso trabalho, acrescentamos efeitos de temperatura aos sistemas estudados nas referências [27], [28] e [29]. Utilizamos, como nessas referências, a TMT-TCMD para resolver o modelo, descrevendo assim efeitos de localização devido à desordem. Nosso objetivo principal é estudar esses efeitos na região de coexistência metal-isolante, vista experimentalmente nas referências 1.4, 1.5 e 1.6 e teoricamente na figura 1.13 (que não considera efeitos de localização de Anderson).

Capítulo 2

Sistemas fortemente correlacionados

Este capítulo é destinado a uma descrição da Teoria de Campo Médio Dinâmico, utilizada para o tratamento de sistemas fortemente correlacionados. Apresentamos a TCMD para o modelo de Hubbard, particularizamos as equações para a rede de Bethe, caso estudado neste trabalho, e descrevemos o cálculo numérico iterativo. Descrevemos também a teoria de perturbação modificada, método utilizado para a solução do problema de uma impureza, na qual o modelo da rede é mapeado. Apresentamos ainda uma formulação alternativa da TCMD, baseada na teoria de Landau de transições de fase.

2.1 Teoria de Campo Médio Dinâmico

Na presente seção, partimos da teoria de campo médio clássica para então apresentar as equações de sua extensão quântica, a Teoria de Campo Médio Dinâmico. Para isso usamos o modelo de Hubbard e seguimos principalmente as referências [21] e [30].

Em uma teoria de campo médio, reduzimos os graus de liberdade da rede, mapeando o problema em um único sítio embebido em um banho efetivo determinado de forma autoconsistente.

Um exemplo simples de aplicação da teoria de campo médio clássica é sua solução para o modelo de Ising,

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (2.1)$$

que representa um sistema de spins S_i , com interação ferromagnética $J_{ij} > 0$ entre primeiros vizinhos e campo externo h . O termo de interação dificulta a resolução do modelo. A função de partição Z do Hamiltoniano não pode ser escrita, a princípio, como um produto de funções de partição de partículas independentes.

Para encontrar a magnetização $m_i = \langle S_i \rangle$, que corresponde a um parâmetro de ordem para o modelo, podemos olhar para um único sítio e tratar os demais como um campo médio. Assumindo simetria translacional ($J_{ij} = J$ e $\langle S_i \rangle = m_i = m$), podemos aproximar o Hamiltoniano de Ising na forma

$$H \approx H_{ef} = -h_{ef} \sum_i S_i, \quad (2.2)$$

sendo $h_{ef} = -h + zJm$ o campo efetivo, onde z é o número de primeiros vizinhos. Nessa construção, a função de partição Z_{ef} pode ser representada como um produto de funções de partição de partículas independentes. O cálculo da magnetização a partir de Z_{ef} fornece-nos então a equação autoconsistência do problema,

$$m = \langle S_i \rangle = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial \ln Z_{ef}}{\partial h} = \tanh(\beta h_{ef}), \quad (2.3)$$

uma vez que h_{ef} depende de m . A solução dessa equação pode ser obtida de modo gráfico ou através de um cálculo numérico iterativo [31].

Neste exemplo, é intuitivo perceber que a aproximação de campo médio torna-se mais precisa à medida que aumentamos z . Isto porque, aumentando o número de vizinhos, reduzimos as flutuações espaciais.

A extensão desse tratamento para um sistema quântico de muitos corpos pode ser exemplificada para o Hamiltoniano de Hubbard (sem desordem), que representa o modelo mais simples capaz de descrever a competição entre a energia cinética e a energia potencial de interação elétron-elétron:

$$H = - \sum_{ij\sigma} (t + \mu\delta_{ij})(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \varepsilon_0 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}. \quad (2.4)$$

O Hamiltoniano acima descreve uma rede periódica com orbitais posicionados em \vec{R}_i , que se sobrepõem, permitindo a troca de férmions livres. O primeiro termo representa o “hopping” dos elétrons de um sítio para outro: t é a amplitude do “hopping” para primeiros vizinhos, μ é o potencial químico e $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação¹ de um elétron com spin σ no sítio i . Já o termo proporcional a U representa a interação entre dois elétrons que ocupam o mesmo sítio e, por isso, têm spins opostos. $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador número, que conta os elétrons com spin σ no sítio i , e U é a energia de interação elétron-elétron (interação coulombiana). O último termo, por sua vez, representa a energia local dos elétrons de condução.

Esse modelo pode ser representado pela função de Green² $G_{ij}(\tau - \tau') = -\langle T c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle$, cuja transformada de Fourier é dada por

$$G(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu + \varepsilon_0 - \varepsilon_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n)}, \quad (2.5)$$

sendo ω_n as frequências de Matsubara,³ $\varepsilon_{\vec{k}} = \sum_{ij} t_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}$ a transformada de Fourier do “hopping” e $\Sigma(\vec{k}, i\omega_n)$ a autoenergia, que é proporcional a U e representa a presença de interação elétron-elétron no sistema.

Para encontrar o termo de autoenergia $\Sigma(\vec{k}, i\omega_n)$, recorreremos à TCMD, proposta por A.

¹Uma descrição da notação de segunda quantização, incluindo os operadores de criação e aniquilação, pode ser encontrada no apêndice A.

²Um resumo sobre funções de Green pode ser encontrado no apêndice B.

³Um resumo de como tratar sistemas a temperatura finita no eixo imaginário, incluindo uma definição das frequências de Matsubara, pode ser encontrada no apêndice C.

Georges e G. Kotliar [5] em 1992 e baseada na descoberta de W. Metzner e D. Vollhardt [22] de que, para redes de número de coordenação $z \rightarrow \infty$, a autoenergia não depende do vetor de onda \vec{k} , mas apenas da frequência $i\omega_n$. Isso significa que, nesse limite, a autoenergia pode ser considerada local, o que nos permite mapear o problema da rede (no nosso exemplo dada pela equação 2.4) em um problema de uma impureza embebida em um banho de elétrons de condução (modelo de Anderson de uma impureza), como ilustrado na figura 2 da Introdução. O mapeamento é realizado concentrando-se em um único sítio (impureza) e integrando os graus de liberdade dos demais sítios.

O problema auxiliar de uma impureza, no qual o problema da rede é mapeado via TCMD, consiste em elétrons interagentes localizados em um sítio da rede, hibridizados com elétrons não interagentes, delocalizados. O Hamiltoniano deste problema auxiliar pode ser escrito como

$$H_{imp} = H_{átomo} + H_{banho} + H_{hibridização} \quad (2.6)$$

sendo

$$H_{átomo} = U n_{\uparrow}^d n_{\downarrow}^d + \varepsilon_0 (n_{\uparrow}^d + n_{\downarrow}^d), \quad (2.7)$$

onde n_{σ}^d representa o número de elétrons localizados (ou seja, no sítio da impureza) com spin σ , o primeiro termo representa a energia de interação elétron-elétron e o segundo, a energia dos elétrons no sítio da impureza;

$$H_{banho} = \sum_{l\sigma} \tilde{\varepsilon}_l c_{l\sigma}^{\dagger} c_{l\sigma}, \quad (2.8)$$

que representa a soma das energias de todos os elétrons delocalizados (definidos pelos operadores $c_{l\sigma}^{\dagger}$ e $c_{l\sigma}$) e

$$H_{hibridização} = \sum_{l\sigma} V_l (c_{l\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{\dagger} c_{l\sigma}), \quad (2.9)$$

que representa o termo de hibridização entre elétrons delocalizados e os elétrons localizados na impureza (dados pelos operadores d_{σ} e d_{σ}^{\dagger}).

Nesta representação, os elétrons não interagentes, dados pelos operadores $c_{l\sigma}$ e $c_{l\sigma}^{\dagger}$, representam o banho que a impureza vê. Os parâmetros V_l e $\tilde{\varepsilon}_l$ definem a função banho $\Delta(i\omega_n) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_l}$ e são escolhidos de forma que as condições de equivalência (discutidas a seguir) entre o modelo da rede e o modelo de uma impureza sejam satisfeitas.

A função de Green da impureza satisfaz a equação de Dyson⁴

$$G_{imp}(i\omega_n) = \frac{1}{\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - \Sigma_{imp}(i\omega_n)}, \quad (2.10)$$

sendo $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$ a autoenergia e $\mathcal{G}_0(i\omega_n) = [i\omega_n + \mu - \varepsilon_0 - \Delta(i\omega_n)]^{-1}$ a função de Green “não

⁴Por meio da soma de diagramas de Feynman, Freeman Dyson forneceu relações gerais entre funções de Green [32].

interagente” do problema auxiliar de uma impureza, que contém informação sobre todos os outros sítios da rede.

A TCMD exige que a autoenergia da rede seja local (com base nos resultados de [22], como dito acima) e igual à autoenergia do problema auxiliar de uma impureza, o que, no espaço real, pode ser representado por

$$\Sigma_{i \neq j} = 0 \quad \Sigma_{ii} = \Sigma_{imp}. \quad (2.11)$$

Além disso, a TCMD exige que a função de Green local do modelo da rede, resultante do somatório em \vec{k} da função dada na equação 2.5, coincida com a função de Green interagente do problema auxiliar, apresentada na equação 2.10, ou seja

$$G_{imp}(i\omega_n) = \sum_{\vec{k}} G(\vec{k}, i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\rho_0(\varepsilon)}{i\omega_n + \mu + \varepsilon_0 - \varepsilon - \Sigma_{imp}(i\omega_n)}, \quad (2.12)$$

onde $\rho_0(\varepsilon)$ é a densidade de estados para o problema descrito por 2.4 fazendo $U = 0$.

A TCMD representa assim uma descrição de campo médio do modelo da rede. Partindo de um valor inicial para $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$, resolvemos o problema de uma impureza (conforme descrito na seção 2.2), encontrando sua autoenergia. Resolvendo a integral da equação 2.12, obtemos $G(i\omega_n)$, e, a partir da equação 2.10, encontramos um novo $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$. O problema é resolvido, então, por um processo iterativo, até que haja convergência, isto é, até que $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ não mais varie.

Nesse tratamento, $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ (ou o banho $\Delta(i\omega_n)$) representa o análogo quântico do campo médio clássico h_{ef} ; note porém que o primeiro é uma função, enquanto o segundo é um número. Além disso, é a densidade de estados $\rho_0(\varepsilon)$ que carrega informações sobre a natureza da rede do problema.

2.1.1 TCMD para o caso de uma rede de Bethe

Como vimos na seção anterior, dentro da TCMD, a natureza da rede aparece apenas através da densidade de estados $\rho_0(\varepsilon)$. Vamos considerar aqui o caso de uma *rede de Bethe*, na qual o caminho para cada sítio é único, como visto na figura 2.1 para $z = 3$ primeiros vizinhos.

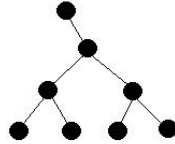


Figura 2.1: Rede de Bethe com conectividade $z = 3$.

Além disso, consideramos $z \rightarrow \infty$, limite em que a TCMD é exata. Nesse caso a densidade de estados é semicircular

$$\rho_0(\epsilon) = \begin{cases} \frac{2}{\pi D} \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon}{D}\right)^2} & |\epsilon| < D \\ 0 & |\epsilon| > D \end{cases}, \quad (2.13)$$

onde $D = 2t$ corresponde à metade da largura da banda.

Resolvendo a integral da equação 2.12 para essa densidade e utilizando o resultado na equação 2.10, encontramos

$$\mathcal{G}_0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu + \varepsilon_0 - t^2 G(i\omega_n)}. \quad (2.14)$$

Assim, pela TCMD, o modelo de Hubbard na rede de Bethe com $z \rightarrow \infty$ é mapeado em um problema auxiliar de uma impureza embebida em um banho de elétrons de condução, dado por

$$\Delta(i\omega_n) = t^2 G(i\omega_n). \quad (2.15)$$

Temos ainda que

$$G(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu + \varepsilon_0 - \Delta(i\omega_n) - \Sigma_{imp}(i\omega_n)}, \quad (2.16)$$

que é uma relação autoconsistente para $G(i\omega_n)$.

Implementação numérica

Partindo da relação de autoconsistência apresentada na equação 2.16, podemos resolver o modelo de Hubbard via TCMD por iteração.

Escolhemos um valor inicial para o banho $\Delta(i\omega_n)$ que a impureza vê. Em seguida, resolvemos o problema de uma impureza, encontrando assim o valor da autoenergia $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$. Tendo $\Delta(i\omega_n)$ e $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$, é possível encontrar a função de Green interagente pela equação 2.16 e, então, um novo valor para o banho pela equação 2.15. Essa sequência de operações é repetida até que o novo banho (ou a função de Green) coincida, dentro de uma margem de erro determinada, com o banho na iteração anterior.

No caso deste trabalho, o problema de uma impureza foi resolvido por um processo de teoria de perturbação modificada, apresentado na próxima seção.

2.2 Solução do problema de uma impureza: Teoria de Perturbação Modificada

Como vimos na seção anterior, o tratamento de sistemas fortemente correlacionados via TCMD consiste em mapear o problema da rede em um problema de uma impureza. O Hamiltoniano da impureza, apresentado nas equações 2.6 - 2.9, corresponde ao modelo de Anderson de uma impureza, que pode ser escrito como

$$H_{imp} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + V \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{i\sigma} \right) + \epsilon_d \sum_{\sigma} d_\sigma^\dagger d_\sigma + U d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow, \quad (2.17)$$

sendo que os elétrons tipo d são os elétrons localizados (elétrons no sítio da impureza) e os elétrons tipo c são os elétrons delocalizados (elétrons de condução). O primeiro termo corresponde à energia cinética dos elétrons de condução de um sítio para outro; o segundo representa a hibridização entre os dois tipos de estados, sendo V o potencial de hibridização; o terceiro representa a energia dos elétrons localizados e o último termo representa a interação coulombiana entre os elétrons tipo d .

O modelo de Anderson de uma impureza foi originalmente introduzido para descrever momentos magnéticos locais gerados por impurezas magnéticas em metais não magnéticos [3] e desde então foi extensivamente estudado na literatura. Alguns métodos utilizados para resolver esse problema são diagonalização exata, grupo de renormalização numérico, Hartree-Fock, Monte Carlo quântico e teoria de perturbação, sendo que esse último consiste em uma expansão até segunda ordem em torno da solução Hartree-Fock e, no contexto de TCMD, recebe o nome de teoria de perturbação iterativa (IPT, do inglês “iterative perturbation theory”).

IPT “tradicional” descreve muito bem o caso com simetria partícula-buraco [33], mas não o caso com preenchimento arbitrário. Um modelo de rede desordenada, no entanto, é mapeado, via TCMD, em um ensemble de problemas de uma impureza com preenchimentos arbitrários (como discutido no próximo capítulo). Nesse caso é preciso realizar modificações na IPT “tradicional” a fim de obter resultados corretos.

No presente trabalho, tratamos os problemas de uma impureza por um processo de teoria de perturbação modificada, método apropriado para tratar tanto sistemas com simetria partícula-buraco quanto sistemas assimétricos (preenchimento arbitrário). Tal modificação foi proposta por H. Kajueter e G. Kotliar [34] para o caso de $T = 0$ e posteriormente foi adaptada para sistemas a temperatura finita [35].

Na maior parte dos tratamentos de muitos corpos a temperatura finita, utiliza-se a formulação em frequências de Matsubara (eixo imaginário), que corresponde à notação que vínhamos utilizando neste documento. Em cálculos no eixo imaginário, no entanto, é preciso realizar uma continuação analítica para obtenção das densidades de estados e tal processo é numericamente instável. Para contornar esse inconveniente, realizamos o cálculo dos problemas de uma impureza diretamente no eixo real, conforme descrito a seguir.

Na teoria de perturbação modificada, a função de Green não perturbada $G_0(\omega)$ é definida, no eixo real, como

$$G_0(\omega) = \frac{1}{\omega + \tilde{\mu}_0 - \Delta(\omega)}, \quad (2.18)$$

sendo $\Delta(\omega) = \sum_{\vec{k}} \frac{V_{\vec{k}}^2}{\omega - \epsilon_{\vec{k}}}$ a função de hibridização. Além disso, introduzimos um potencial químico fictício $\tilde{\mu}_0$, que é calculado como descrito ao longo desta seção. A função de Green interagente $G_{imp}(\omega)$ é dada por

$$G_{imp}(\omega) = [G_0^{-1} - \tilde{\mu}_0 - \epsilon_d - \Sigma(\omega)]^{-1} = [\omega - \epsilon_d - \Delta(\omega) - \Sigma(\omega)]^{-1}. \quad (2.19)$$

Em um processo de teoria de perturbação com simetria partícula-buraco, a autoenergia $\Sigma(\omega)$ do problema de uma impureza é aproximada por sua contribuição até segunda ordem na forma

$$\Sigma(\omega) \approx Un + \Sigma_0^{(2)}(\omega), \quad (2.20)$$

sendo

$$n = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im}G_{imp}(\omega) n_F(\omega), \quad (2.21)$$

onde $n_F(\omega)$ é a distribuição de Fermi.

$\Sigma_0^{(2)}(\omega)$ pode ser encontrado com o auxílio de diagramas de Feynman, que fornecem uma representação diagramática de expansões em série dos propagadores (funções de Green). A correção de ordem n para a autoenergia, no eixo imaginário, pode ser obtida pela leitura dos diagramas. Para a interpretação do diagrama (como o da figura 2.2) é preciso entender que ele é constituído de n vértices, sendo que o símbolo \bullet representa a interação U . Além disso, há cinco regras que auxiliam a leitura:

1. associar uma frequência discreta ω_p a cada linha, observando que essa grandeza seja conservada em cada vértice;
2. associar a cada linha um fator $G_0(i\omega_p)$;
3. associar a cada interação um fator U ;
4. somar sobre as frequências internas;
5. multiplicar por $[-\beta]^{-n} (-1)^F$, onde F é o número de “loops” fermiônicos.

Por meio dos diagramas, é possível mostrar que as contribuições para n ímpar são todas nulas [33]. A figura 2.2 apresenta o diagrama de Feynman de segunda ordem na expansão perturbativa para a função de Green do problema de uma impureza.

Da leitura do diagrama acima, obtemos que a correção da autoenergia para segunda ordem, no eixo imaginário, é dada por

$$\Sigma_0^{(2)}(i\omega_n) = -\frac{U^2}{\beta^2} \sum_{\omega_1 \omega_2} G_0(i\omega_1) G_0(i\omega_2) G_0(i\omega_n - i\omega_1 + i\omega_2). \quad (2.22)$$

Usando a representação espectral $G_0(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\rho_0(\omega')}{i\omega_n - \omega'}$ (sendo $\rho_0(\omega) = -\text{Im}G_0(\omega)/\pi$) e realizando o somatório nas frequências de Matsubara ao longo da linha de continuação analítica trivial $i\omega_n \rightarrow \omega^+$, encontramos a expressão abaixo para a parte imaginária da autoenergia no eixo real [36]

$$\text{Im}\Sigma_0^{(2)}(\omega) = -\pi U^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \rho_0(-\omega') [n_F(\omega') \chi(\omega + \omega') + n_F(-\omega') \chi(-\omega - \omega')], \quad (2.23)$$

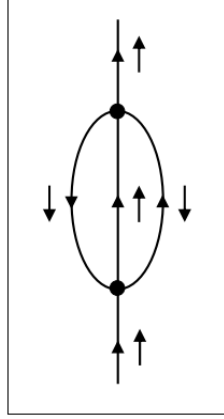


Figura 2.2: Diagrama de Feynman de segunda ordem na expansão perturbativa da função de Green do problema de uma impureza.

sendo

$$\chi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \rho_0(\omega + \omega') \rho_0(\omega') n_F(-\omega - \omega') n_F(\omega'). \quad (2.24)$$

A parte real da autoenergia pode ser obtida por uma transformada de Hilbert,⁵ ou seja,

$$\text{Re}\Sigma_0^{(2)}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Im}\Sigma_0^{(2)}(\omega')}{\omega - \omega'}. \quad (2.25)$$

No método de teoria de perturbação modificado [34], propõe-se uma definição heurística para a autoenergia

$$\Sigma(\omega) = Un + \frac{A\Sigma_0^{(2)}(\omega)}{1 - B\Sigma_0^{(2)}(\omega)}, \quad (2.26)$$

sendo que os parâmetros A e B são determinados de forma que $\Sigma(\omega)$ tenha comportamento exato no caso de altas frequências e no limite atômico, respectivamente. Nesses limites encontramos

$$A = \frac{n(1-n)}{n_0(1-n_0)}, \quad (2.27)$$

sendo $n_0 = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Im}G_0(\omega) n_F(\omega)$ e

$$B = \frac{(1-n)U + \epsilon_d + \tilde{\mu}_0}{n_0(1-n_0)U^2}. \quad (2.28)$$

Até este ponto $\tilde{\mu}_0$ é um parâmetro livre. Na proposta de H. Kajueter e G. Kotliar [34] para IPT modificada, o potencial químico fictício é determinado utilizando a regra de soma de Friedel, que equivale ao teorema de Luttinger e pode ser vista como uma condição para que a autoenergia tenha comportamento correto para baixas frequências. Essa condição, no entanto, restringe a solução a $T = 0$. A temperatura finita, podemos encontrar $\tilde{\mu}_0$ impondo $n = n_0$,

⁵Veja apêndice D.

conforme utilizado por W. Nolting *et. al.* [35] e primeiramente proposto por Martin-Rodero *et. al.* [37]. O método com a condição $n = n_0$ foi testado numericamente e fornece resultados satisfatórios.

No presente trabalho consideramos $n = n_0$ e, assim, temos sempre $A = 1$. Dados o banho $\Delta(\omega)$ e a energia do nível da impureza ϵ_d , podemos supor um valor inicial para o potencial químico fictício $\tilde{\mu}_0$ e determinar a função de Green do problema de uma impureza a partir de um cálculo iterativo em que se impõe a condição $n = n_0$. O código numérico utilizado neste trabalho foi escrito pelo nosso colaborador J. Vučičević (*Scientific Computing Laboratory, Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*).

2.3 Formulação alternativa da TCMD

As equações apresentadas na seção 2.1 podem ser obtidas a partir de uma abordagem alternativa, baseada na definição de um funcional de energia livre para o problema.

A equação de estado para um parâmetro de ordem pode ser obtida pelo mínimo funcional da energia livre de Landau, construída como uma expansão em potências inteiras do parâmetro de ordem e/ou em suas derivadas que seja consistente com as simetrias do problema. (Tal análise é possível pois nas proximidades do ponto crítico o parâmetro de ordem é pequeno.)

O funcional de Landau para o modelo de Hubbard na rede de Bethe é [38]

$$F_L[\Delta(i\omega_n)] = -T \frac{\sum_{n'} \Delta(i\omega_{n'})^2}{t^2} + F_{imp}[\Delta(i\omega_n)], \quad (2.29)$$

sendo o banho $\Delta(i\omega_n)$ o parâmetro de ordem, t o “hopping” e T a temperatura do sistema. O primeiro termo representa a energia necessária para se formar o banho em torno de um dado sítio. O segundo termo representa a energia de um elétron nesse sítio na presença do banho, ou seja, é dado pela energia livre do modelo de uma impureza, que pode ser representada como uma integral funcional

$$e^{-\beta F_{imp}} = \int df^\dagger df e^{-L_{loc}[f^\dagger, f] - \sum_{n, \sigma} f_\sigma^\dagger(i\omega_n) \Delta(i\omega_n) f_\sigma(i\omega_n)}, \quad (2.30)$$

onde L_{loc} é a ação de um nível local f , com a hibridização $\Delta(i\omega_n)$ igual a zero e f^\dagger e f são operadores de criação e aniquilação neste nível.

As equações da TCMD podem ser obtidas minimizando-se o funcional de energia livre de Landau com relação ao parâmetro de ordem

$$\begin{aligned} \frac{\delta F_L[\Delta(i\omega_n)]}{\delta \Delta(i\omega_n)} &= -\frac{\delta(T \sum_{n'} \frac{\Delta(i\omega_{n'})^2}{t^2})}{\delta \Delta(i\omega_n)} + \frac{\delta F_{imp}}{\delta \Delta(i\omega_n)} \\ &= -\frac{2T \Delta(i\omega_n)}{t^2} + T \sum_{\sigma} \langle f_\sigma^\dagger(i\omega_n) f_\sigma(i\omega_n) \rangle \\ &= -\frac{2T \Delta(i\omega_n)}{t^2} + 2TG_{imp}(i\omega_n) = 0, \end{aligned} \quad (2.31)$$

o que equivale à relação autoconsistente para a rede de Bethe, dada pela equação 2.15.

2.4 Determinação de T_c a partir da região de “crossover”

Vimos que a transição de Mott a temperatura finita é de primeira ordem e apresenta uma região de coexistência metal-isolante, que termina em um ponto crítico de segunda ordem, caracterizado pela temperatura T_c . Essa temperatura crítica pode ser obtida por meio de uma abordagem que relaciona o funcional da energia livre de Landau para o modelo de Hubbard, descrito na seção anterior, à taxa de convergência do cálculo numérico da TCMD. Nesse procedimento trabalhamos na região de “crossover”, isto é, acima da região de coexistência, com $T > T_c$, o que fornece algumas vantagens numéricas. Essa abordagem, introduzida nas referências [39, 40] para o caso limpo (sem desordem) e testada nesta dissertação para o caso desordenado, é descrita nesta seção.

É resultado bem conhecido que não há observável capaz de distinguir entre um líquido e um gás em um fluido supercrítico (ou seja, acima da linha de transição de fase de primeira ordem). Há, no entanto, quantidades termodinâmicas com máximos que definem uma linha que emana do ponto crítico, denominada “linha de Widom”. Tal linha foi originalmente definida para representar a divergência do calor específico acima do ponto crítico, mas depois ela adquiriu novo significado, como a linha de “crossover”. Experimentos medindo a velocidade de ondas acústicas em fluidos de argônio supercrítico, por exemplo, apresentaram uma mudança considerável ao cruzar a linha de Widom, o que revela que, apesar de não haver uma transição de fase de primeira ordem, a região acima do ponto crítico é dividida em dois diferentes regimes [41].

J. Vucicevic, H. Terletska, D. Tanaskovic e V. Dobrosavljevic [39, 40] mostraram que é possível definir uma linha de Widom quântica (LWQ) próxima à transição de Mott. A linha de Widom representa uma continuação da linha de transição de primeira ordem, ou seja, ela começa em T_c , o ponto de encontro das duas linhas espinoidais que delimitam a região de coexistência, conforme visto na figura 2.3.

Nas referências [39, 40], os autores demonstram que é possível encontrar a LWQ pela curvatura do funcional da energia livre de Landau, determinada pelo menor autovalor λ da matriz flutuação, dada pela derivada segunda do funcional. Para cada temperatura T , encontramos curvas de λ em função da interação U , que é o parâmetro responsável pela transição (ver “inset” da figura 2.3). Através dessas curvas, encontramos U^* , correspondente ao valor de interação para o qual λ é mínimo para cada T . Repetindo o procedimento para vários valores de T , encontramos a curva $T \times U^*$, que corresponde à linha de “crossover”. Essa análise é válida porque a curvatura do funcional de Landau é finita e mínima ao longo dessa linha. Além disso, sabe-se que a curvatura é zero no ponto crítico, isto é, $\lambda = 0$ em $T = T_c$. Para cada $T > T_c$, é possível encontrar a curvatura mínima a partir do cálculo numérico da TCMD, analisando a taxa de convergência da função de Green ao longo dos passos iterativos, como demonstrado abaixo [42].

Vimos, na seção 2.3, que a energia livre de Landau para o modelo de Hubbard é dada por

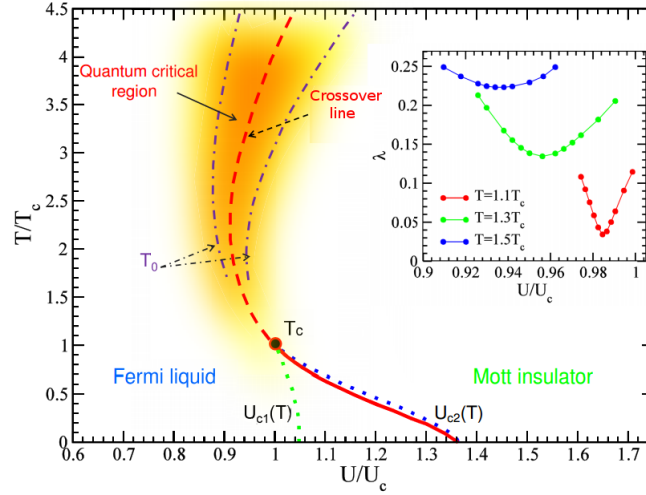


Figura 2.3: Diagrama de fase $T \times U$ para o modelo de Hubbard sem desordem, contendo a região de coexistência e a região de “crossver”. O diagrama apresenta as linhas espinoidais e a linha de Widom, ou linha de “crossover”, que representa uma continuação da linha de transição de primeira ordem, e começa em (U_c, T_c) . No “inset” vemos a curvatura do funcional da energia livre em função da interação U para diferentes temperaturas, acima de T_c . Figura retirada de [40].

$$F_L[G(i\omega_m)] = -Tt^2 \sum_m G^2(i\omega_m) + F_{imp}[G(i\omega_m)], \quad (2.32)$$

onde usamos $\Delta(i\omega_n) = t^2 G(i\omega_n)$ para a rede de Bethe.

Podemos expandir a expressão acima em torno de um extremo local $G_0(i\omega_m)$ (não confundir com a função de Green não interagente usada em outras seções) na forma

$$F_L(\vec{G}) = F_L(\vec{G}_0) + Tt^2 \sum_{m,p} \delta G(i\omega_p) M_{mp} \delta G(i\omega_m) + \dots \quad (2.33)$$

sendo que os vetores \vec{G} e \vec{G}_0 representam a dependência das funções de Green com a frequência, $\delta\vec{G} = \vec{G} - \vec{G}_0$ e

$$M_{mp} = \frac{1}{2Tt^2} \frac{\partial^2 F_L(\vec{G})}{\partial G(i\omega_p) \partial G(i\omega_m)} \Big|_{\vec{G}=\vec{G}_0} \quad (2.34)$$

é a matriz de flutuação.

O mínimo da energia livre é dado por $\vec{g}(\vec{G}) = 0$, sendo \vec{g} um funcional gradiente

$$\vec{g}(\vec{G}) \equiv \frac{1}{2Tt^2} \frac{\partial F_L(\vec{G})}{\partial \vec{G}} = M \delta\vec{G}. \quad (2.35)$$

Para determinar esse mínimo podemos definir um processo iterativo na forma

$$\delta\vec{G}^{(n+1)} = \delta\vec{G}^{(n)} - \vec{g}(\vec{G}^{(n)}), \quad (2.36)$$

sendo n o índice do passo iterativo. No caso da energia livre do modelo de Hubbard, o gradiente é dado por $\vec{g}(\vec{G}) = \vec{G}_{imp}(\vec{G}) - \vec{G}$. Portanto, o processo iterativo converge para uma função de Green que é solução autoconsistente do cálculo da TCMD.

Para obter a curvatura do funcional da energia livre, vamos expandir $\delta\vec{G}^{(n)}$ na base dos autoestados da matriz de flutuação M :

$$\delta\vec{G}^{(n)} = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{(n)} \vec{G}_{\alpha}, \quad (2.37)$$

onde $M\vec{G}_{\alpha} = \lambda_{\alpha}\vec{G}_{\alpha}$.

Substituindo (2.35) na relação iterativa (2.36), ficamos com

$$\delta\vec{G}^{(n)} = (1 - M)\delta\vec{G}^{(n-1)}, \quad (2.38)$$

e, por um processo recursivo, encontramos

$$\delta\vec{G}^{(n)} = (1 - M)^n \delta\vec{G}^{(0)}. \quad (2.39)$$

Finalmente, utilizando (2.37), temos

$$\begin{aligned} \delta\vec{G}^{(n)} &= \sum_{\alpha} (1 - M)^n a_{\alpha}^{(0)} \vec{G}_{\alpha} \\ &= \sum_{\alpha} (1 - \lambda_{\alpha})^n a_{\alpha}^{(0)} \vec{G}_{\alpha}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Para n grande, podemos substituir o somatório em α pelo termo dominante, dado pelo menor autovalor da matriz flutuação, identificado pelo índice α_0 :

$$\delta\vec{G}^{(n)} \approx (1 - \lambda_{\alpha_0})^n a_{\alpha_0}^{(0)} \vec{G}_{\alpha_0}, \quad (2.41)$$

que pode ser reescrito como

$$\ln \delta\vec{G}^{(n)} \approx -nB_{\alpha_0} + C, \quad (2.42)$$

sendo $B_{\alpha_0} = -\ln(1 - \lambda_{\alpha_0})$ e $C = \ln(a_{\alpha_0}^{(0)} \vec{G}_{\alpha_0})$ uma constante. Note ainda que $B_{\alpha_0} \approx -\ln 1 + \lambda_{\alpha_0} + \mathcal{O}(\lambda_{\alpha_0}^2)$; assim, para λ_{α_0} pequeno, $B_{\alpha_0} \approx \lambda_{\alpha_0}$. Isso implica em uma relação linear entre o logaritmo da taxa de convergência da função de Green e o menor autovalor da matriz flutuação (equação 2.34), que dá a curvatura da energia livre de Landau.

No cálculo autoconsistente da TCMD, podemos definir a taxa de convergência $\delta\vec{G}$ como $|\text{Im}[G(i\omega_0)^{(n)} - G(i\omega_0)^{(n-1)}]|$, sendo que ω_0 é a menor frequência. Dessa maneira é possível extrair o menor autovalor $\lambda_{\alpha_0} = \lambda$ da inclinação da curva $\ln|\text{Im}[G(i\omega_0)^{(n)} - G(i\omega_0)^{(n-1)}]|$ versus n . Para uma dada temperatura T , repetimos esse processo para diferentes valores da energia de interação elétron-elétron U (como no “inset” da figura 2.3), definindo assim $U^*(T)$ correspondente ao valor de interação para o qual λ é mínimo, a temperatura fixa. Variando-se agora a temperatura T , encontramos a linha de Widom, $T \times U^*$. Além disso, a partir da curva $\lambda_{min}(T)$,

que pode ser ajustada por uma aproximação quadrática em T , podemos obter T_c por meio de uma extrapolação, identificando a temperatura crítica com T na qual $\lambda_{min} = 0$.

Capítulo 3

Sistemas desordenados

Sistemas reais possuem dopantes ou impurezas, ou seja, são desordenados, e muitas vezes essa desordem gera efeitos que não devem ser desprezados. Neste capítulo discutimos duas teorias utilizadas no tratamento de sistemas desordenados: a Aproximação do Potencial Coerente (CPA, do inglês “Coherent Potential Approximation”) e a Teoria do Meio Típico (TMT). Por meio da TMT é possível descrever a localização das funções de onda eletrônicas gerada por desordem, conhecida como localização de Anderson, também discutida neste capítulo.

3.1 Aproximação do Potencial Coerente

Um sistema desordenado simples consiste em elétrons não interagentes na presença de um potencial aleatório, descrito pelo Hamiltoniano

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1 \\ H_1 &= -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \\ H_0 &= \sum_{i\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

H_1 representa a energia cinética do sistema: t é a amplitude do “hopping” entre primeiros vizinhos e $c_{i\sigma}$ ($c_{i\sigma}^\dagger$) é o operador que destrói (cria) um elétron de spin σ no sítio i . H_0 representa a desordem, sendo que o nível de energia ϵ_i varia de sítio para sítio, seguindo uma distribuição de probabilidade $P(\epsilon)$ de largura W .

Em CPA, o efeito da desordem (Hamiltoniano H_0) na função de Green média do sistema é deslocar a frequência de uma quantidade $\Sigma(i\omega_n)$ [43, 44, 45], ou seja,

$$\bar{G}(\vec{k}, i\omega_n) = G_0[\vec{k}, i\omega_n - \Sigma(i\omega_n)] = [i\omega_n - \epsilon_{\vec{k}} - \Sigma(i\omega_n)]^{-1}, \quad (3.2)$$

sendo $G_0(\vec{k}, i\omega_n) = [i\omega_n - \epsilon_{\vec{k}}]^{-1}$ a função de Green do sistema descrito por H_1 e $\epsilon_{\vec{k}}$ a dispersão da banda, dada pela transformada de Fourier do “hopping” t .

Fisicamente o sistema se comporta como se um potencial coerente $\Sigma(i\omega_n)$ dependente da frequência estivesse presente em cada um dos sítios da rede. Assim, o potencial randômico no sítio i passa a ser dado por $\tilde{\epsilon}_i = \epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)$.

Por definição, a matriz de espalhamento de um sistema é dada por $T = V + VGV + VGVGV + \dots = V(1 - GV)^{-1}$, sendo V um potencial [46]. Assim, para $\tilde{\epsilon}_i$ temos

$$T_i(i\omega_n) = \frac{\epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)}{1 - \bar{G}^l(i\omega_n)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)]}, \quad (3.3)$$

com $\bar{G}^l(i\omega_n) = \sum_{\vec{k}} \bar{G}(\vec{k}, i\omega_n)$, a função de Green local média.

Como o efeito do potencial aleatório já foi considerado na função de Green média (conforme equação 3.2), devemos impor que a matriz de espalhamento média seja nula, para evitar que esse efeito seja levado em conta duas vezes. Ou seja,

$$\langle T_i(i\omega_n) \rangle = \left\langle \frac{\epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)}{1 - \bar{G}^l(i\omega_n)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)]} \right\rangle = 0, \quad (3.4)$$

onde $\langle \rangle$ representa a média sobre $P(\epsilon)$. Essa relação pode ser manipulada e reescrita como se segue

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\bar{G}^l(i\omega_n)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)]}{1 - \bar{G}^l(i\omega_n)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)]} \right\rangle &= 0 \\ \left\langle \frac{\bar{G}^l(i\omega_n)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)]}{1 - \bar{G}^l(i\omega_n)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)]} + 1 \right\rangle &= 1 \\ \left\langle \frac{1}{1 - \bar{G}^l(i\omega_n)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)]} \right\rangle &= 1 \\ \left\langle \frac{\bar{G}^l(i\omega_n)}{1 - \bar{G}^l(i\omega_n)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)]} \right\rangle &= \bar{G}^l(i\omega_n) \\ \left\langle \frac{1}{[\bar{G}^l(i\omega_n)]^{-1} - [\epsilon_i - \Sigma(i\omega_n)]} \right\rangle &= \bar{G}^l(i\omega_n), \end{aligned} \quad (3.5)$$

que representa a equação que deve ser resolvida para determinarmos o potencial coerente $\Sigma(i\omega_n)$.

O tratamento descrito torna-se exato no limite de dimensão infinita [43, 44]. Podemos particulariza-lo para o caso da rede de Bethe nesse limite. Nesse caso, a densidade de estados é semicircular e

$$G_0^l(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - t^2 G_0^l(i\omega_n)}. \quad (3.6)$$

Usando esse resultado na equação (3.2), ficamos com

$$\begin{aligned} \bar{G}^l(i\omega_n) &= G_0^l(i\omega_n - \Sigma(i\omega_n)) \\ (\bar{G}^l(i\omega_n))^{-1} &= [G_0^l(i\omega_n - \Sigma(i\omega_n))]^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= i\omega_n - \Sigma(i\omega_n) - t^2 G_0^l(i\omega_n - \Sigma(i\omega_n)) \\
&= i\omega_n - \Sigma(i\omega_n) - t^2 \bar{G}_0^l(i\omega_n),
\end{aligned} \tag{3.7}$$

que, substituindo na equação (3.5), implica em

$$\bar{G}^l(i\omega_n) = \left\langle \frac{1}{i\omega_n - \bar{\Delta}(i\omega_n) - \epsilon_i} \right\rangle, \tag{3.8}$$

sendo $\bar{\Delta}(i\omega_n) = t^2 \bar{G}^l(i\omega_n)$. Temos assim uma relação autoconsistente para a função de Green local média na rede de Bethe, dada a distribuição $P(\epsilon)$.

Veremos, na próxima seção, que CPA não é apropriada para tratar sistemas com desordem grande, pois não descreve a transição metal-isolante induzida por desordem.

3.2 Localização de Anderson

P. W. Anderson mostrou que elétrons não interagentes possuem autoestados estendidos ou localizados dependendo do grau de desordem do sistema [3].

O Hamiltoniano do modelo de elétrons livres na presença de um potencial randômico, dado pela equação 3.1, pode ser tratado por teoria de perturbação. No limite em que o “hopping” é muito menor do que a largura da desordem ($t \ll W$), consideramos H_1 como a perturbação. A expansão é feita então em torno dos estados com energia ϵ_i , localizados nos sítios da rede. A função de Green local, no eixo real, é dada por

$$G_i(\omega + is) = \frac{1}{\omega + is - \epsilon_i - \Sigma_i(\omega + is)}, \tag{3.9}$$

onde $\Sigma_i(\omega + is)$ é a autoenergia devido ao termo H_1 do Hamiltoniano e $s \rightarrow 0$.

Na expansão perturbativa, a primeira correção não nula para a autoenergia $\Sigma_i(\omega + is)$ é a de segunda ordem [45]

$$\Sigma_i(\omega + is) = t^2 \sum_{j \neq i} \frac{1}{\omega + is - \epsilon_j}, \tag{3.10}$$

ou, separando a parte real e a parte imaginária,

$$\begin{aligned}
\Sigma_i(\omega + is) &= t^2 \sum_{j \neq i} \frac{\omega - is - \epsilon_j}{(\omega - \epsilon_j)^2 + s^2} \\
&= t^2 \sum_{j \neq i} \frac{\omega - \epsilon_j}{(\omega - \epsilon_j)^2 + s^2} - ist^2 \sum_{j \neq i} \frac{1}{(\omega - \epsilon_j)^2 + s^2}.
\end{aligned} \tag{3.11}$$

A parte real nos dá a correção da energia do estado não perturbado localizado no sítio i , enquanto a parte imaginária nos dá a taxa de decaimento desse estado localizado para os sítios vizinhos devido ao “hopping”. A parte imaginária só é significativa quando $|\epsilon_i - \epsilon_j| \ll t$, o que significa que a função de onda do estado com energia $\omega = \epsilon_i$ se estende apenas nas direções

nas quais essa condição é satisfeita. Como vimos na seção anterior, ϵ_j encontra-se distribuída segundo $P(\epsilon)$ de largura W . Assim, quanto maior W , menos expressiva é essa contribuição. Concluimos então que, partindo de t finito e indo para o limite $W \gg t$, as funções de onda dos elétrons se localizam.

Para uma dada desordem abaixo do valor crítico para o qual ocorre localização, alguns estados do sistema são localizados e outros estendidos. Assim, a densidade de estados do sistema tem regiões de energia correspondentes a estados localizados e regiões correspondentes a estados estendidos. O limite entre os dois tipos de estados é conhecido como “borda de mobilidade” [47]. Os primeiros estados a se localizarem são aqueles que se encontram nas bordas das bandas. À medida que a desordem aumenta, mais estados se localizam e as bordas de mobilidade se movem para o centro da banda, até que todos os estados tornam-se localizados. O sistema passa assim por uma transição de fase metal-isolante de Anderson, induzida pela desordem.

Devemos avaliar $\text{Im}\Sigma_i(\omega + is)$ para descobrir se o estado é estendido ou localizado. Se $P(\epsilon)$ é uniforme e centrada em $\omega = 0$ ($P(\epsilon) = \frac{1}{W}$), a média de $\text{Im}\Sigma_i(\omega + is)$ sobre a distribuição é

$$\begin{aligned} \langle \text{Im}\Sigma_i(0 + is) \rangle &= -szt^2 \int_{-W/2}^{W/2} d\epsilon \frac{P(\epsilon)}{\epsilon^2 + s^2} \\ &= -\frac{szt^2}{W} \int_{-W/2}^{W/2} d\epsilon \frac{1}{\epsilon^2 + s^2} \\ &= \frac{-2szt^2}{sW} \text{arctg} \left(\frac{W}{2s} \right), \end{aligned} \quad (3.12)$$

que é finita no limite $s \rightarrow 0$,

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} \langle \text{Im}\Sigma_i(0 + is) \rangle = -\frac{\pi z t^2}{W}, \quad (3.13)$$

sendo z o número de coordenação da rede.

O fato do valor médio de $\text{Im}\Sigma_i(0)$ ser finito deveria significar que o sistema se encontra em um estado estendido. No entanto, a probabilidade de que, para um sítio i , $\text{Im}\Sigma_i(0)$ assumira esse valor médio é muito pequena, pois a distribuição dessa grandeza é singular [45] (o valor médio pode ser bem diferente do valor mais provável, se a distribuição não é simétrica).

Para determinar, de forma mais precisa, se o sistema se encontra em um estado estendido ou localizado, podemos considerar as condições necessárias para que os elétrons se movam através da rede e calcular a probabilidade de que isso ocorra. Tais condições são: t deve ser não nulo e $\omega \sim \epsilon_j$, o que equivale a exigir que $\text{Im} \frac{\Sigma_i(\omega + is)}{s} = \sum_{j \neq i} \frac{t^2}{(\omega - \epsilon_j)^2 + s^2}$ tenha um valor considerável [47]. Devemos então procurar a probabilidade de que $|\omega - \epsilon_j| < s$ e $t > s$. Tem sentido físico supormos que t decaia exponencialmente na forma $t(r) = t_0 e^{-\frac{r}{r_0}}$, e, nesse caso, $t > s$ corresponde a $r < r_0 \ln \frac{s}{t_0}$. Além disso, em um intervalo de energia de tamanho s , haverá $\frac{ns}{W}$ energias ϵ_j por unidade de volume (n é a densidade de sítios por volume). Logo, podemos construir essa probabilidade na forma

$$P(t > s, |\omega - \epsilon| < s) = n \frac{4\pi(r_0)^3}{3} \left(\frac{s}{W}\right) \left(\ln \frac{s}{t_0}\right)^3, \quad (3.14)$$

que vai para zero quando $s \rightarrow 0$.¹

Assim, embora o valor médio de $\lim_{s \rightarrow 0^+} \langle \text{Im}\Sigma_i(0 + is) \rangle$ seja finito, a probabilidade dos elétrons se moverem pela rede tende a zero. Fica claro então que o valor médio não é um bom indicativo do estado do sistema. Temos aqui uma grande contribuição de Anderson: na presença de desordem no sistema, devemos lidar com distribuições das grandezas de interesse, não com suas médias. Sistemas desordenados não devem ser tratados como uma distorção de um sistema regular, mas sim de forma fundamentalmente diferente.

Isso justifica o fato de CPA, que leva em conta a média das DE locais, não descrever bem a localização de Anderson. Veremos na próxima seção um método que considera o valor típico da DE local como parâmetro de ordem e, assim, descreve a transição metal-isolante induzida por desordem.

3.3 Teoria do Meio Típico

Como vimos na seção anterior, o processo básico envolvido na transição metal-isolante induzida por desordem é a localização da função de onda. Na Teoria do Meio Típico um parâmetro de ordem local pode ser definido e calculado de forma autoconsistente, produzindo uma descrição de campo médio da localização de Anderson [8]. Essa teoria é facilmente incorporada à TCMD, de forma que podemos tratar sistemas desordenados e fortemente correlacionados ao mesmo tempo.

O ponto de partida da TMT é motivado pela formulação original de Anderson - adotar um ponto de vista local. Devemos considerar a DE local $\rho_i(\omega) = \sum_n \delta(\omega - \omega_n) |\psi_n(i)|^2$ ($\psi_n(i)$ é a função de onda do elétron no estado n), não seu valor médio, pois é a primeira que muda qualitativamente e apresenta comportamento crítico na transição de Anderson. Isso pode ser explicado pelo fato da DE local descrever a amplitude local da função de onda eletrônica. Quando o elétron se localiza, o espectro local vai de contínuo a discreto e o valor típico da DE local vai para zero. Por sua vez, do lado metálico, mas muito perto da transição, os picos da função delta tornam-se estados de ressonância com tempo de vida longo e então adquirem uma probabilidade de transição finita para um dado sítio.

Uma comprovação experimental do comportamento espacial da DE local na presença de desordem pode ser vista na figura 1.8, na qual observamos as DE locais no nível de Fermi para diferentes concentrações de Mn em $Ga_{1-x}Mn_xAs$. Para desordem fraca, há estados estendidos no sistema; à medida a concentração de impurezas aumenta, os estados vão se tornando localizados.

Sabemos, pela regra de ouro de Fermi, que a taxa de transição de um estado i para um

¹Nas análises realizadas aqui usamos a expansão em segunda ordem para a autoenergia $\Sigma(\omega)$. Essa análise é suficiente, pois é possível mostrar que $\text{Im}\Sigma(\omega)$ converge e que sua distribuição de probabilidade tem, qualitativamente, a mesma forma da distribuição da correção de segunda ordem [47].

estado f é dada por $\tau^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle i|H_p|f\rangle|^2 \rho_f$, sendo H_p a perturbação responsável pela transição e ρ_f a DE final. No nosso caso, $|\langle i|H_p|f\rangle|$ corresponde ao termo de “hopping” t , daí $\tau^{-1} \sim t^2 \rho$. Assim, a taxa de transição típica, ou mais provável, é determinada pela DE local típica (DE típica). Em outras palavras, a DE típica determina diretamente a condutividade dos elétrons, sendo, portanto, um parâmetro de ordem adequado para a descrição da localização de Anderson.

O valor típico da densidade de estados pode ser aproximado pela média geométrica, que, para uma rede de m sítios, é dada por

$$\rho_{tip}(\omega) = [\rho(\omega, \epsilon_1)\rho(\omega, \epsilon_2)\rho(\omega, \epsilon_3)\dots\rho(\omega, \epsilon_m)]^{1/m}, \quad (3.15)$$

e pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \ln \rho_{tip}(\omega) &= \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \ln \rho(\omega, \epsilon_i) = \langle \ln \rho(\omega, \epsilon_i) \rangle, \\ \rho_{tip}(\omega) &= \exp\left[\int d\epsilon P(\epsilon) \ln \rho(\omega, \epsilon)\right]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Para determinar uma teoria autoconsistente capaz de descrever o parâmetro de ordem definido acima (DE típica) usa-se uma teoria de cavidade semelhante à usada na TCMD: nessa aproximação um sítio é visto como sendo embebido em um meio efetivo caracterizado pela função banho $\Delta(\omega)$.

Por simplicidade, consideramos um modelo sem interação elétron-elétron, como o da equação (3.1). Para esse sistema a função de Green local é descrita pela expressão

$$G(\omega, \epsilon_i) = [\omega - \epsilon_i - \Delta(\omega)]^{-1} \quad (3.17)$$

e a DE local pode ser calculada por

$$\rho(\omega, \epsilon_i) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\omega, \epsilon_i). \quad (3.18)$$

Como em CPA, consideramos que o banho efetivo na presença de desordem é dado por

$$\Delta(\omega) = \Delta_0[\omega - \Sigma(\omega)], \quad (3.19)$$

sendo que $\Sigma(\omega)$ é a autoenergia e $\Delta_0(\omega)$ é o banho efetivo no limite sem desordem, que pode ser escrito em termos da função de Green do caso limpo na forma

$$\Delta_0(\omega) = \omega - [G_0(\omega)]^{-1}. \quad (3.20)$$

A função de Green da equação acima, para o caso sem desordem, é obtida pela transformada

de Hilbert² da DE despida (correspondente a $W = 0$) $D(\omega)$, ou seja,

$$G_0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{D(\omega')}{\omega - \omega'}. \quad (3.21)$$

Analogamente, a função de Green correspondente à DE típica também é dada pela transformada de Hilbert

$$G_{tip}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\rho_{tip}(\omega')}{\omega - \omega'} \quad (3.22)$$

com $\rho_{tip}(\omega)$ calculada por (3.16).

Finalmente, a relação de autoconsistência é fechada pela condição

$$G_{meio\ efetivo}(\omega) = G_0[\omega - \Sigma(\omega)] = G_{tip}(\omega). \quad (3.23)$$

Nessa formulação, assim como na TCMD, toda a informação sobre a estrutura eletrônica está contida na escolha da DE despida $D(\omega)$. Para o caso da rede de Bethe, as equações acima implicam que a função banho é dada por

$$\Delta(\omega) = t^2 G_{tip}(\omega), \quad (3.24)$$

que é análoga ao caso de CPA (3.8), porém usando a função de Green típica ao invés da média.

Uma descrição da implementação numérica da TMT é apresentada na próxima seção, na qual descrevemos o cálculo TMT-TCMD, usado neste trabalho para descrever sistemas interagentes e desordenados.

3.4 Correlação e desordem: TCMD e TMT-TCMD

Tanto a interação elétron-elétron quanto a presença de desordem levam a transições metal-insolante devido à localização das funções de onda eletrônicas. Em muitos sistemas os dois efeitos são igualmente relevantes e devem ser levados em conta. Devemos entender então como incluir os dois processos em um mesmo tratamento.

Dentro da TCMD, que usamos na descrição dos sistemas interagentes, a desordem é tratada como em CPA [43, 44]. Desse modo, o modelo da rede com desordem é mapeado em vários problemas de uma impureza, e não apenas em um, como ocorre no caso limpo.

O modelo de Hubbard na presença de desordem é dado por

$$H = \sum_{ij\sigma} [(\epsilon_i - \mu)\delta_{ij} - t](c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (3.25)$$

seguindo a mesma notação utilizada na equação 2.4. Aqui, ϵ_i segue uma distribuição $P(\epsilon)$ de largura W .

²Veja apêndice D sobre transformada de Hilbert.

Na TCMD, a função de Green local média dos elétrons de condução satisfaz a relação auto-consistente [45]

$$\bar{G}(\omega) = \left\langle \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon_j - \Delta(\omega) - \Sigma_j(\omega)} \right\rangle, \quad (3.26)$$

sendo $\epsilon_{di} = \epsilon_i - \mu$ e $\Sigma_j(\omega)$ a energia local e a autoenergia correspondentes a cada problema de uma impureza. Para a rede de Bethe,

$$\Delta(\omega) = t^2 \bar{G}(\omega). \quad (3.27)$$

Note que a equação 3.26 é uma generalização para sistemas interagentes da equação 3.8, pois elas diferem pelo termo de autoenergia, proporcional a U . Isso indica que o tratamento da desordem na TCMD equivale ao da CPA, como escrevemos acima.

Dada uma subrotina que resolva o problema de uma impureza, a implementação da TCMD para o caso desordenado é simples: começamos com um banho inicial, resolvemos problemas de uma impureza para N níveis de energia diferentes e encontramos um novo banho fazendo a média das funções de Green resultantes com o peso apropriado. O cálculo continua até que haja convergência.

No entanto, essa abordagem descreve a transição de Mott (transição metal-isolante devido à interação elétron-elétron) e o efeito de desordem fraca sobre o sistema, mas não captura a transição de Anderson. Essa limitação pode ser corrigida incorporando a TMT ao cálculo iterativo da TCMD. Nesse caso, o problema da rede continua sendo mapeado em um ensemble de problemas de uma impureza, mas considera-se valores mais prováveis (ou típicos), e não valores médios como na TCMD.

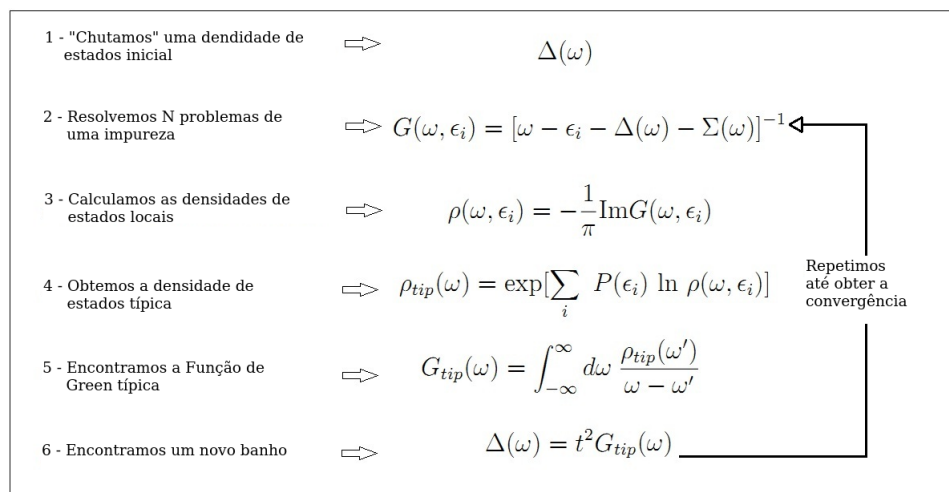


Figura 3.1: Fluxograma para o cálculo numérico da TMT incorporada à TCMD para a rede de Bethe.

O cálculo autoconsistente é realizado conforme descrito a seguir. Partimos de um valor inicial para o banho e resolvemos N problemas de uma impureza, obtendo as funções de Green $G(\omega, \epsilon_i) = [\omega - \epsilon_i - \Delta(\omega) - \Sigma(\omega)]^{-1}$ (a diferença com relação ao caso não interagente da equação

3.17 é a presença da autoenergia do problema de uma impureza). Das funções de Green locais, obtemos DE locais, a partir das quais encontramos a DE típica como apresentado na equação 3.16. Por meio de uma transformada de Hilbert (equação 3.22), obtemos então a função de Green típica. Para a rede de Bethe, o cálculo autoconsistente é fechado pela relação $\Delta(\omega) = t^2 G_{tip}(\omega)$, que fornece-nos um novo banho. Essa implementação está resumido no fluxograma da figura 3.1.

Na figura 3.1 vemos ainda alguns detalhes do cálculo numérico. Por exemplo, na relação que nos dá a densidade de estados típica, usamos um somatório ao invés da integral da equação (3.16), porque a energia ϵ_i encontra-se discretizada. Além disso, na obtenção da função de Green típica pela transformada de Hilbert da equação (3.22), é preciso realizar uma interpolação numérica para encontrar a DE típica em pontos onde ela não está definida (no cálculo numérico a frequência ω também encontra-se discretizada).

Capítulo 4

Resultados

Este capítulo é destinado à apresentação de nossos resultados. Antes de descrever os efeitos de localização no modelo de Hubbard desordenado, faremos uma breve descrição de resultados para o problema auxiliar de uma impureza, no qual o modelo da rede é mapeado via TCMD, e da transição metal-isolante de Mott no caso sem desordem. Nas seções seguintes, apresentaremos resultados para os efeitos da desordem W , e especialmente da localização de Anderson, sobre a região de coexistência de Mott e estudaremos as consequências dessa localização sobre a temperatura crítica. Além disso, observaremos os efeitos de interação sobre a transição de Anderson e descreveremos outras regiões do diagrama de fase $U \times W$, incluindo, por exemplo, uma transição de fase induzida por efeito conjunto de correlação e desordem, que ocorre para $W \approx U$.

4.1 Problema de uma impureza

Conforme descrito na seção 2.1, o tratamento de sistemas fortemente correlacionados via TCMD consiste em mapear o problema da rede em um problema auxiliar (ou um ensemble de problemas auxiliares, no caso desordenado), dado por um único sítio embebido por um banho de elétrons de condução. Cada problema auxiliar é descrito pelo Hamiltoniano de Anderson de uma impureza (equação 2.17) e a função de Green de elétrons localizados (elétrons tipo d) é dada por

$$G_d(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_d - \Delta(\omega) - \Sigma(\omega)}, \quad (4.1)$$

sendo $\epsilon_d = \epsilon_i - \mu$ a energia local no nível da impureza. ϵ_i é o valor da energia dos elétrons de condução no problema original (modelo de Hubbard) e μ é o potencial químico, que, no caso de semi-preenchimento, é igual a $U/2$. Além disso, $\Delta(\omega)$ representa o banho dos elétrons de condução que a impureza vê e $\Sigma(\omega)$ é a autoenergia da impureza, que é proporcional a U .

Para esse problema de uma impureza, a DE, dada pela parte imaginária da função de Green ($\rho_d(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G_d(\omega)$), possui picos em ϵ_d e $\epsilon_d + U$. Além disso, há a formação de um pico no nível de Fermi, devido à interação entre o spin da impureza e os spins dos elétrons de condução, formando um singlete. Esse fenômeno recebe o nome de efeito Kondo [48] e pode ser observado

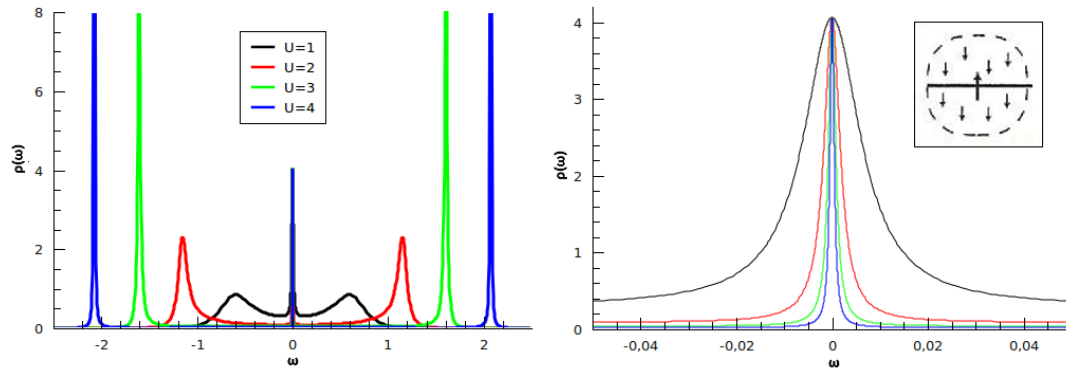


Figura 4.1: DE de problemas de uma impureza para diferentes valores de interação U . Os resultados foram obtidos com um banho $\Delta(\omega)$ semi-circular (característico da rede de Bethe) de largura $D = 1.0$ e com $\varepsilon_i = 0.1$, $T = 0.01$ e $\mu = U/2$. A figura da direita mostra um zoom em torno do nível de Fermi, no qual observamos o pico Kondo, gerado pela interação entre o elétron da impureza (representado pelo spin central na figura esquemática do “inset”) e os elétrons de condução (representados pelos demais spins no “inset”).

na figura 4.1.

Os picos na DE da impureza são alargados pela hibridização com o banho. Quando $\Delta(\omega \approx \varepsilon_d)$ (ou $\Delta(\omega \approx \varepsilon_d + U)$) é muito pequeno, quase não há hibridização e os picos são praticamente funções delta de Dirac, indicando que os elétrons estão localizados no sítio da impureza. Os resultados apresentados na figura 4.1 foram obtidos com um banho semicircular de largura fixa. À medida que aumentamos U , os picos em ε_d e $\varepsilon_d + U$ passam a estar fora da região em que o banho é considerável, o que diminuímos a hibridização, estreitando os picos.

4.2 Transição de Mott no modelo de Hubbard - caso limpo

Conforme descrito ao longo deste documento, estudamos aqui o modelo de Hubbard (apresentado na equação 2.4), que representa a competição entre energia cinética, proporcional ao “hopping” t entre primeiros vizinhos, e a interação elétron-elétron U . Dependendo do termo dominante nessa competição, o sistema pode estar na fase metálica (quando a energia cinética é superior à interação) ou na fase isolante de Mott (no caso contrário). Podemos incluir ainda um termo de desordem na energia local (conforme apresentado na equação 3.25), o que pode gerar efeitos de localização de Anderson.

Nesta seção revisamos a descrição da transição de Mott para o Hamiltoniano de Hubbard sem desordem, para então passar à descrição dos efeitos da desordem sobre o modelo, nas seções seguintes.

Na transição de Mott, um material que seria considerado metálico por teoria de bandas,¹ pode apresentar um comportamento isolante à medida que aumentamos a interação elétron-

¹Uma breve descrição de metais e isolantes de banda pode ser encontrada na Introdução.

elétron U . Isso ocorre porque a interação reduz a fração de dupla ocupação nos sítios da rede, provocando a abertura de um “gap” no nível de Fermi.²

Em um tratamento do modelo de Hubbard por TCMD, obtemos a densidade de estados do sistema. Partindo de uma DE metálica semicircular (característica da rede de Bethe no limite de coordenação infinita, equação 2.13) e aumentando a interação U , observamos o surgimento de uma estrutura de três picos: duas bandas de Hubbard alargadas pelo “hopping” e um pico central de quase-partícula. Aumentando ainda mais a interação, observamos o desaparecimento do pico central, com a abertura do “gap”. Esse comportamento da DE para U crescente pode ser visto na figura 3, apresentada na introdução deste trabalho. Alternativamente, poderíamos partir de uma DE inicial isolante, caracterizada por duas bandas de Hubbard, e observar o fechamento do “gap” à medida que diminuimos U . Observe que a DE da rede é construída a partir da DE do problema de uma impureza, por meio do mapeamento iterativo da TCMD. É interessante observar, então, que o pico central da DE da impureza torna-se mais estreito à medida que aumentamos U , conforme visto no painel da direita da figura 4.1, o que implica no desaparecimento do pico central da DE do modelo de Hubbard para um U crítico.

A DE no nível de Fermi, $\rho(\omega_0 \approx 0)$ ³ pode ser considerada um parâmetro de ordem para a transição de Mott, pois é diferente de zero na fase metálica, devido à presença do pico central de quase-partícula, mas se anula na fase isolante, assinalando a abertura do “gap”. Dessa forma, para T fixo, podemos variar a interação para encontrar o U crítico para o qual ocorre a transição, isto é, o valor de U para o qual $\rho(\omega_0)$ se anula, quando aumentamos U , ou torna-se finito, se partimos de um isolante e diminuimos U .

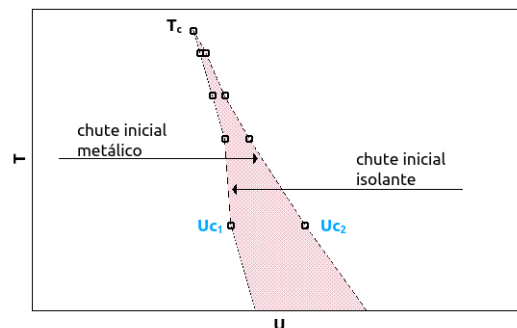


Figura 4.2: Diagrama esquemático $T \times U$ incluindo a região de coexistência e as linhas espinoidais. Começando do lado isolante e diminuindo a interação U , encontramos a linha U_{c1} , correspondente ao $U(T)$ no qual ocorre o fechamento do “gap” entre as bandas de Hubbard. Por outro lado, começando pelo lado metálico e aumentando U , encontramos a linha U_{c2} , na qual o peso espectral do pico central de quase-partícula se anula.

Vimos também que a transição de Mott apresenta uma região na qual duas soluções, uma

²Uma descrição dos mecanismos responsáveis pela transição metal-isolante de Mott foi apresentada na introdução deste trabalho. Veja, por exemplo, a figura 1.

³No cálculo numérico ω encontra-se discretizada e ω_0 representa a menor frequência, que é aproximadamente zero

metálica e outra isolante, coexistem. A solução encontrada depende da função inicial utilizada no cálculo iterativo (veja detalhes do cálculo numérico na seção 2.1.1), sendo que uma das soluções é estável e a outra metaestável. Em outras palavras, mantendo uma temperatura fixa, mas variando a densidade de estados (ou o banho) inicial e a energia de interação elétron-elétron U , podemos determinar U_{c1} e U_{c2} , que representam os pontos de transição encontrados quando começamos o cálculo numérico pelo lado isolante e diminuimos U , ou quando começamos pelo lado metálico e aumentamos U , respectivamente. Repetindo o procedimento para várias temperaturas, construímos as linhas espinoidais $U_{c1}(T)$ e $U_{c2}(T)$, que delimitam a região de coexistência. A figura 4.2 apresenta um diagrama de fase esquemático $T \times U$ incluindo a região de coexistência, que está contida no intervalo $U_{c1}(T) < U < U_{c2}(T)$ e termina no ponto crítico de segunda ordem, caracterizado pela temperatura T_c .

4.3 Efeitos de localização de Anderson na transição de Mott - Regime de $U > W$

Vimos que a transição de Mott é caracterizada pela abertura de um “gap” no nível de Fermi devido à redução de dupla ocupação no sistema, gerada pela forte repulsão coulombiana entre elétrons que ocupam o mesmo sítio. Essa transição é bem definida e conhecida na ausência de desordem ($W = 0$). Porém, as características da transição de Mott são observadas ainda que W seja finito. Esses sistemas são estudados na presente seção, a partir do modelo de Hubbard desordenado, no qual as energias ε_i dos sítios seguem uma distribuição $P(\epsilon)$ uniforme de largura W .

4.3.1 Efeitos de desordem sobre a região de coexistência

Estamos interessados em observar o efeito da desordem, e mais especificamente da localização de Anderson, sobre a região de coexistência de Mott. Para isso comparamos a forma e posição da região de coexistência no caso limpo (sem desordem), com o caso desordenado. No caso com desordem, resolvemos o problema utilizando a TCMD “tradicional” e a TMT-TCMD. Conforme discutido no capítulo 3, o primeiro método considera a DE média e não captura efeitos da localização de Anderson, ao contrário do segundo, que utiliza a DE típica. Comparando resultados obtidos com os dois métodos, é possível avaliar os efeitos de localização devido à desordem.

A unidade de energia utilizada neste trabalho é igual à largura $2D$ da banda de energia da rede de Bethe no caso limpo e não interagente ($2D = 4t = 1$).

A figura 4.3 apresenta uma comparação entre a região de coexistência no caso limpo ($W = 0$) e no caso com desordem moderada $W = 0.8$, obtidas via TMT-TCMD (quadrados vermelhos) e TCMD (estrelas verdes). Vemos que, no caso desordenado, a região de coexistência torna-se mais estreita, ocorre para valores maiores de energia de interação U e se fecha para um valor menor de temperatura. Note que essas observações são válidas para ambos os métodos de solução;

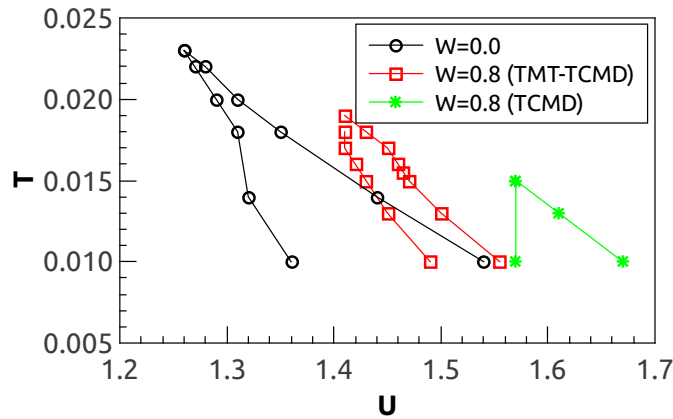


Figura 4.3: Linhas espinoidais $U_{c1}(T)$ e $U_{c2}(T)$ delimitando a região de coexistência para o caso limpo ($W = 0.0$, círculos pretos) e para o caso com desordem ($W = 0.8$) obtidos via TMT-TCMD (quadrados vermelhos) e TCMD (estrelas verdes).

portanto, trata-se de efeitos gerais de desordem, que independem da inclusão da localização de Anderson.

Realizamos uma comparação de nossos resultados para a região de coexistência a temperatura finita, obtidos com TCMD, com outros presentes na literatura [26]. Encontramos grande concordância entre os resultados, apesar de diferenças no cálculo numérico - nossos problemas de uma impureza foram resolvidos por teoria de perturbação no eixo real, ao contrário do outro trabalho, no qual os cálculos foram realizados no eixo imaginário.

Sabemos que no caso desordenado a transição ocorre para um U maior, quando comparada ao caso limpo, porque a desordem alarga as sub-bandas de Hubbard e o pico central. Isso faz com que, vindo do lado isolante, o “gap” se torne mais estreito e assim se feche para um U maior. Vindo do lado metálico, o pico central se torna mais largo, anulando-se também para um U maior. O alargamento das bandas e do pico central devido à desordem pode ser visto na figura 4.4, para os casos (a) metálico e (b) isolante.

Uma descrição da mudança na forma da região de coexistência (sua largura e temperatura final T_c) exige uma análise mais cuidadosa dos sistemas interagentes e desordenados. Em [26], os autores apresentam argumentos físicos para a dependência das linhas espinoidais U_{c1} e U_{c2} com a temperatura, tanto no caso limpo como no caso com desordem pequena a moderada. Nessa referência, o efeito da desordem é considerado via TCMD e observa-se que, em uma primeira aproximação, $U_{c1}(T) \approx U_{c1}(0)$ para qualquer valor de desordem, desde que essa não seja muito grande. Essa aproximação é baseada no seguinte argumento: a solução isolante apresenta uma grande escala de energia dentro da região de coexistência, o que faz com que a linha de transição quase não seja sensível a variações na temperatura. A linha espinoidal metálica, por outro lado, tem uma pequena escala de energia nessa região, e portanto apresenta uma dependência considerável com a temperatura.

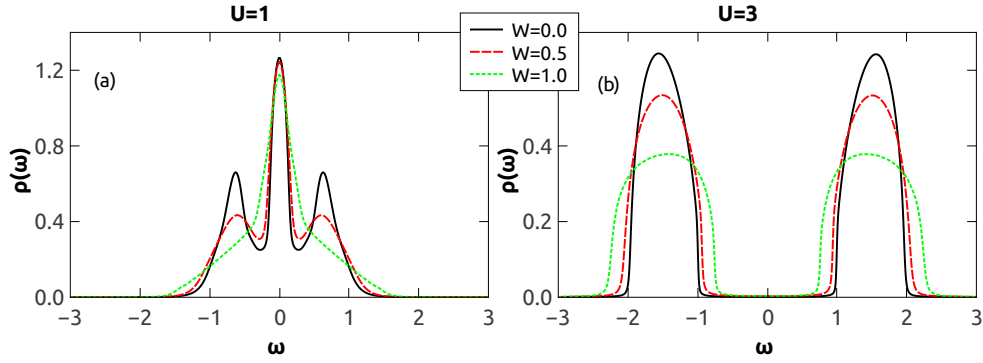


Figura 4.4: DE média, obtida via TCMD, para diferentes valores de W a temperatura fixa $T = 0.01$. A presença de desordem provoca o alargamento das bandas, tanto no caso metálico ($U = 1$) quanto no caso isolante ($U = 3$).

Ao comparar resultados obtidos via TCMD e TMT-TCMD (símbolos verdes e vermelhos da figura 4.3, respectivamente) observamos que, para esse valor de desordem moderada ($W = 0.8$), T_c é maior ao considerarmos efeitos de localização de Anderson. Isso ocorre porque a linha espinoidal U_{c1} no cálculo TMT-TCMD, em contraste com o comportamento de TCMD descrito acima, apresenta uma dependência considerável com a temperatura, o que faz com que as linhas espinoidais se fechem para uma temperatura maior.

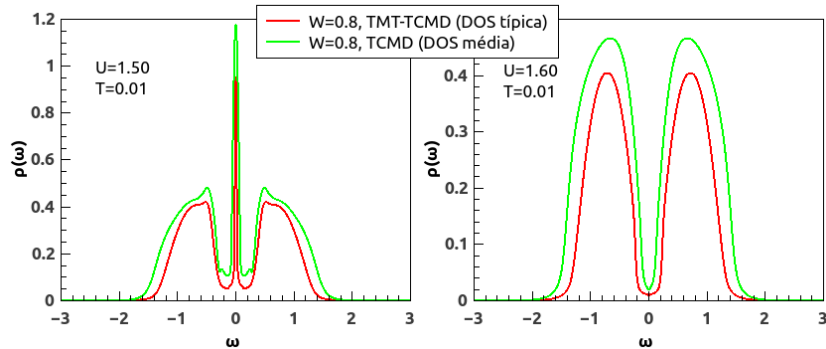


Figura 4.5: DE típica e média em função da frequência. A localização devido à desordem começa pelas bordas das bandas.

Na figura 4.3 podemos ver ainda que a transição é deslocada para um U menor ao incluirmos efeitos de localização de Anderson. Isso ocorre porque, na presença de desordem, os estados que se encontram nas bordas das bandas são os primeiros a se localizar [28]. Esse efeito é capturado por TMT-TCMD, pois estados localizados não contribuem com peso espectral na DE típica. De fato, a localização na borda das bandas pode ser vista na figura 4.5, que apresenta uma comparação entre DE típica, obtida via TMT-TCMD, e média, obtida via TCMD. O estreitamento das bandas devido aos efeitos de localização de Anderson diminui o U crítico para o qual ocorre a transição de Mott. No caso isolante ($U = 1.60$ na figura), a localização das

bordas alarga o “gap”; assim, partindo de um chute inicial isolante, é preciso diminuir ainda mais a interação U para fechar o “gap”, o que “empurra” U_{c1} para valores menores de U em comparação com TCMD. Partindo de uma solução metálica ($U = 1.50$ na figura), por outro lado, vemos que o pico central já se encontra mais estreito devido à localização de Anderson; assim, a destruição desse pico ocorre para U menores, o que “puxa” U_{c2} para valores menores de U em comparação com TCMD.

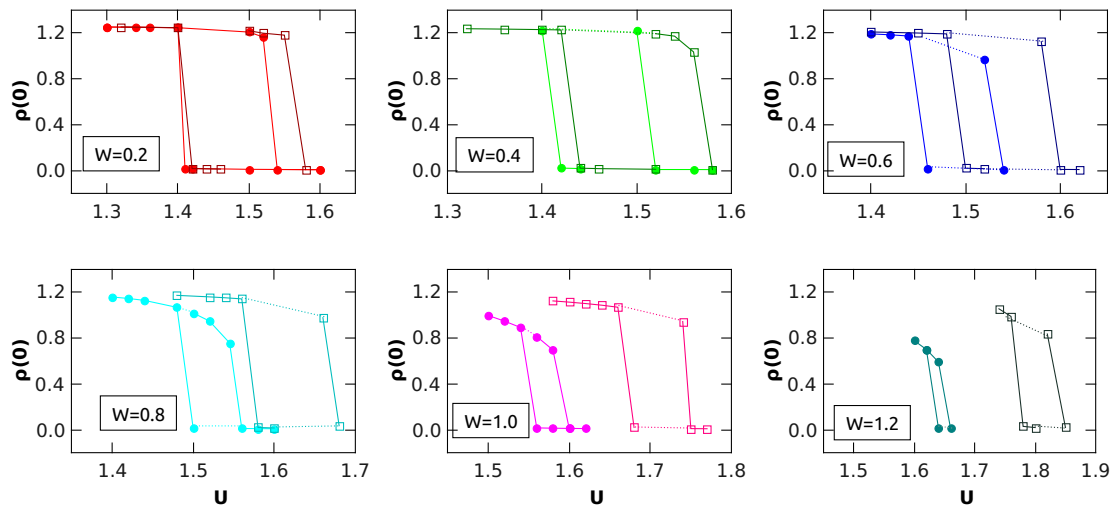


Figura 4.6: DE no nível de Fermi encontradas para U crescente e decrescente, constituindo curvas de histerese que definem a região de coexistência. As curvas foram obtidas por TCMD (quadrados abertos) e TMT-TCMD (círculos fechados) e é possível observar os efeitos da localização devido à desordem: as transições ocorrem para valores menores de U e a região de coexistência torna-se mais estreita. Resultados para $T = 0.01$.

Os diagramas de fase apresentados na figura 4.3 foram construídos por análises de DE no nível de Fermi $\rho(\omega_0)$ em função da interação, obtidas para U crescente e decrescente, para diferentes temperaturas. Para cada T , esse estudo fornece-nos curvas de histerese que delimitam a região de coexistência. Curvas desse tipo, para uma temperatura fixa $T = 0.01$ e diferentes valores de desordem, no regime $W < U$, são apresentadas na figura 4.6. Da comparação entre os resultados obtidos por TCMD (quadrados abertos) e TMT-TCMD (círculos fechados), vemos novamente que, ao incluir efeitos de localização de Anderson, a transição se move para valores menores de interação. Além disso, fica claro que a localização torna a região de coexistência mais estreita em U . Esses efeitos tornam-se mais evidentes à medida que aumentamos a desordem W .

Estudos presentes na literatura ressaltam a importância dos efeitos da localização de Anderson no limite de desordem grande, $W \geq U$ [28]. Nossos resultados comprovam que a localização devido à desordem tem consequências relevantes sobre a região de coexistência, mesmo no regime de desordem menor, $W < U$.

É interessante estudar ainda a conjunção entre desordem e correlação na transição metal-

isolante. Realizamos, para isso, um estudo do número de ocupação do sistema para o valor de desordem moderada $W = 0.8$, utilizado na maior parte dos resultados desta seção. No capítulo 1, apresentamos a figura 1.15, que representa, de maneira esquemática, a ocupação característica de diferentes tipos de isolantes. Um isolante de Mott é caracterizado por ocupação simples de cada sítio, pois é preciso fornecer uma energia U grande para que o sítio seja duplamente ocupado. Na figura 4.7, apresentamos o número de ocupação local por spin, n_i , em função da energia do sítio, ϵ_i , para um metal e um isolante. No caso metálico (círculos pretos), o número de ocupação por spin varia entre $0.4 < n_i < 0.6$. No caso isolante (quadrados vermelhos), por outro lado, o número de ocupação por spin não difere muito do valor de ocupação simples ($n_i = 0.5$). Isso indica que a correlação eletrônica é o fator responsável pela transição metal-isolante neste regime de $U > W$.

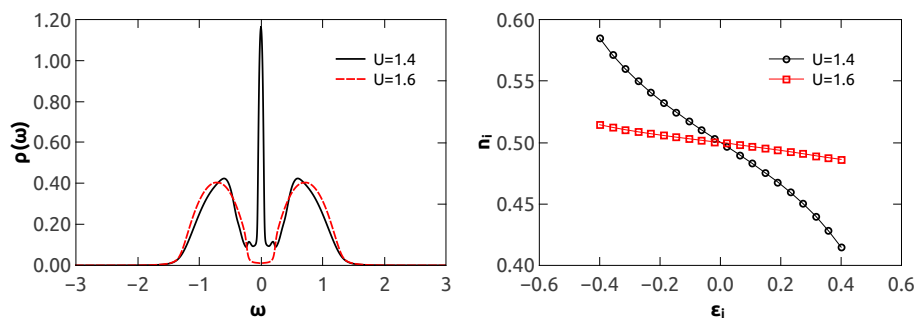


Figura 4.7: DE típicas e respectivos números de ocupação local por spin em função da energia do sítio. Nesse limite de desordem moderada ($W = 0.8$), a correlação eletrônica é o fator responsável pela transição, o que resulta em um isolante do tipo Mott. Resultados para $T = 0.01$.

Nesta seção estudamos o regime de desordem moderada $W < U$ e observamos os efeitos da localização de Anderson sobre a região de coexistência metal-isolante. Vimos que, de maneira geral, a presença de desordem diminui a temperatura crítica e aumenta o valor de U para o qual ocorre a transição, em comparação com o caso limpo. Além disso, apesar da transição ser rígida por correlação eletrônica, a localização devido à desordem tem efeitos relevantes sobre a região de coexistência, que se torna mais estreita e é deslocada para valores menores de U . Isso pode ser percebido pela comparação de resultados obtidos via TCMD e TMT-TCMD, apresentados, por exemplo, nas figuras 4.3, 4.5 e 4.6.

4.3.2 Temperatura crítica - uma análise a partir da região de “crossover”

A presença de uma região de coexistência é uma característica de transições de fase de primeira ordem e está restrita a temperaturas menores que T_c , a temperatura do ponto crítico de segunda ordem; acima de T_c encontramos um regime de “crossover”. Na seção anterior observamos os efeitos da desordem sobre a região de coexistência, a partir de resultados para $T < T_c$. Nessa abordagem, a temperatura crítica é determinada por meio do ponto de encontro das duas linhas espinoidais. Alternativamente, é possível obter T_c trabalhando na região de “crossover”, isto

é, com $T > T_c$, conforme apresentado nas referências [39, 40] e descrito na seção 2.4. Esse tratamento alternativo oferece vantagens numéricas, uma vez que permite-nos trabalhar com temperaturas maiores. Ele foi proposto para o caso limpo [39, 40], e, no presente trabalho, testamos o método para o caso desordenado, como discutido nesta seção.

Vimos, na seção 2.4, que é possível identificar uma linha de Widom quântica com a linha de “crossover” [39, 40]. Essa linha é determinada pela curvatura do funcional de energia livre de Landau (apresentado na seção 2.3), que por sua vez está relacionada à taxa de convergência da função de Green ao longo dos passos iterativos do cálculo numérico.

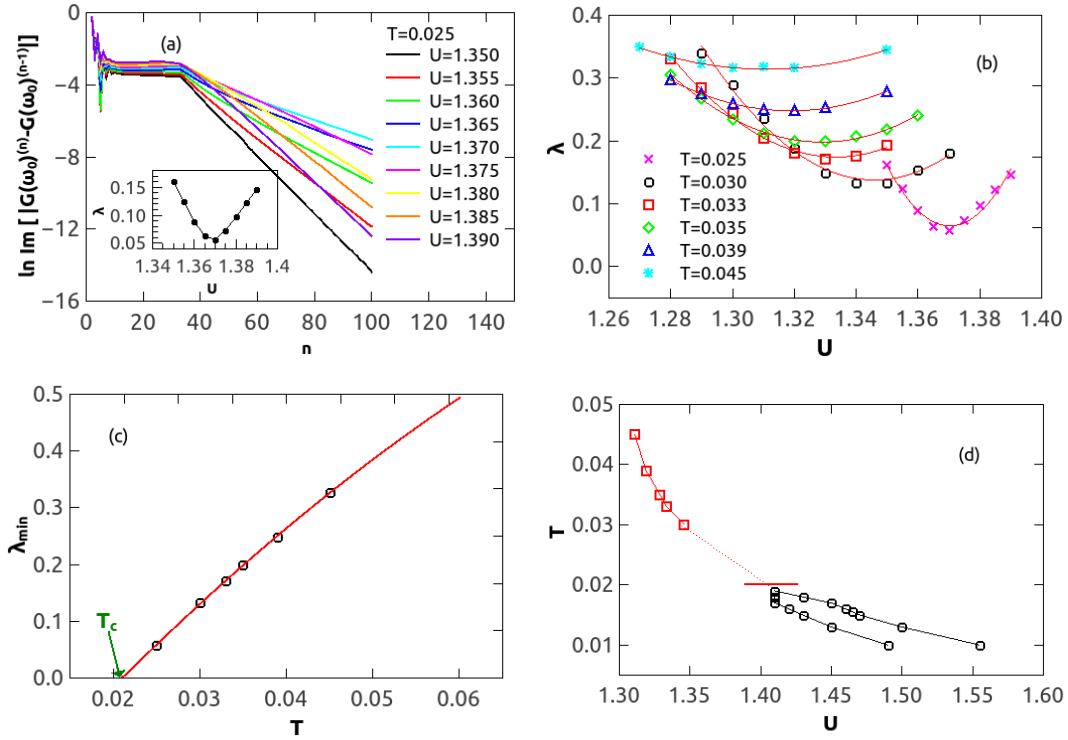


Figura 4.8: Análise da linha de “crossover” para um sistema desordenado com $W = 0.8$.

A figura 4.8 exemplifica esta análise da linha de “crossover” para o caso de desordem moderada, $W = 0.8$. Para cada U , o menor autovalor λ da matriz flutuação (equação 2.34) corresponde a inclinação da curva $\ln |\text{Im}[G_{tip}^{(n)}(\omega_0) - G_{tip}^{(n-1)}(\omega_0)]|$ para a menor frequência⁴ em função do passo iterativos, n . Note que, no cálculo TMT-TCMD, utilizamos a função de Green típica na análise. Para uma dada temperatura, podemos variar U para obter $\lambda(U)$, conforme apresentado em (a) para $T = 0.025$. Repetindo esse procedimento para várias temperaturas, obtemos as diferentes curvas $\lambda(U)$ apresentadas no quadro (b). Nessa figura, os símbolos representam dados numéricos, enquanto as linhas correspondem a ajustes quadráticos. A partir dessas curvas encontramos um

⁴Note que utilizamos a taxa de convergência da função de Green correspondente à menor frequência. As funções se alteram expressivamente nessa frequência, o que justifica essa escolha. É possível, no entanto, utilizar outras frequências ou mesmo uma soma sobre várias delas. Testamos diferentes procedimentos e observamos que não há mudanças relevantes ao realizarmos outras escolhas.

valor de λ mínimo para cada T , conforme apresentado em (c). Fazendo um ajuste quadrático⁵ dos dados de (c) e extrapolando, obtemos $T_c = T(\lambda_{min} = 0)$ para o valor de desordem considerado.

A linha de “crossover” também é construída a partir dos dados apresentados na figura 4.8 (b): para cada T encontramos o U correspondente a λ_{min} , construindo a curva $U_{\lambda_{min}}(T)$. Essa linha é representada pelos quadrados vermelhos em (d). O valor de T_c encontrado em (c) também está apresentado nesse quarto quadro, por meio de uma linha horizontal. Além disso, incluímos as duas linhas espinoidais da região de coexistência (círculos pretos). Como podemos ver, a temperatura crítica obtida pela extrapolação de λ_{min} coincide com T_c obtida pela análise realizada a partir da região de coexistência, o que indica que o método funciona bem também na presença de desordem moderada.

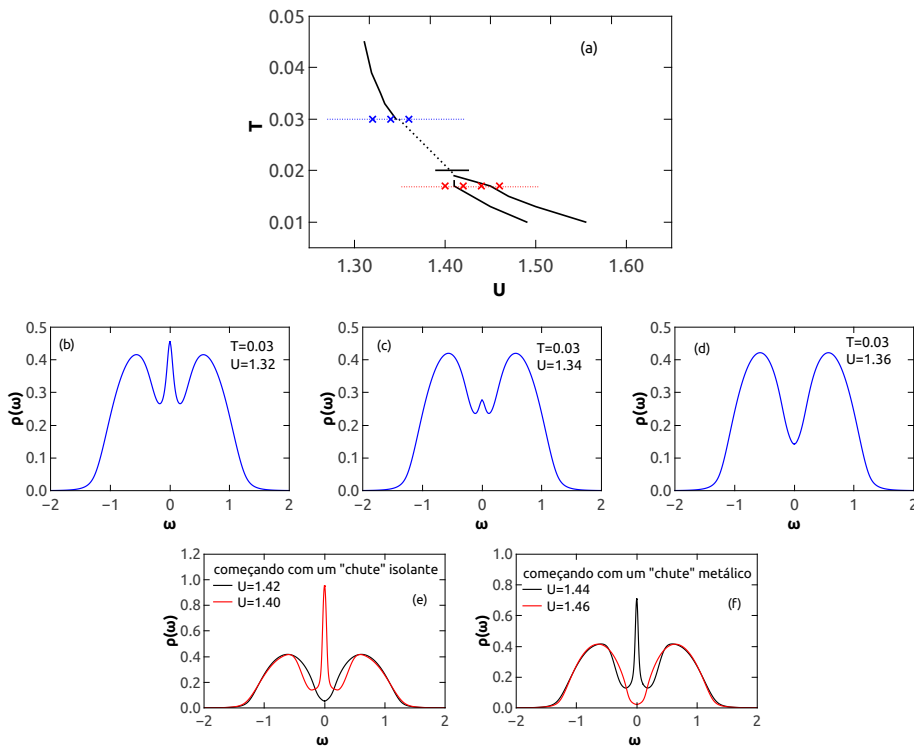


Figura 4.9: (a) LWQ e linhas espinoidais para um sistema desordenado com $W = 0.8$. Destaque para linhas de temperatura fixa acima e abaixo de T_c . (b-d) DE típicas para $T = 0.03$. (e) DE típicas para $T = 0.017$, obtidas começando o cálculo numérico com uma função isolante e diminuindo U . (f) DE típicas para $T = 0.017$, obtidas começando o cálculo numérico com uma função metálica e aumentando U .

Para entender melhor a interpretação da linha de Widom quântica como a linha de “crossover”, podemos examinar o comportamento de DE típicas em função U para temperaturas acima e abaixo de T_c , como apresentado na figura 4.9. Os quadros (b) a (d) da figura apresentam resul-

⁵Realizamos diversos testes e observamos que os dados para λ_{min} em função de T correspondem bem a ajustes praticamente lineares, com pequenas contribuições quadráticas.

tados para $T = 0.03 > T_c$ e podemos observar que as DE mudam suavemente quando o sistema atravessa a linha, caracterizando um “crossover”. No caso das transições de fase de primeira ordem, que ocorrem para $T < T_c$, por outro lado, observamos uma região de coexistência e as DE se alteram descontinuamente, como pode ser visto nos quadros (e) e (f) da figura, para $T = 0.017$.

Temperatura crítica em função da desordem

Todo o procedimento apresentado acima pode ser repetido para diferentes valores de desordem W , o que permite-nos constatar o efeito da desordem sobre T_c . De acordo com a figura 1.13, retirada da referência [26] e apresentada no capítulo 1, T_c é sempre finita por maior que seja a desordem. Tal resultado foi obtido com TCMD “tradicional”. Nesta seção apresentamos um estudo semelhante, porém utilizando TMT-TCMD, o que permite-nos observar de que forma a localização de Anderson influencia o comportamento de $T_c(W)$.

A análise acima tem uma motivação interessante, sugerida na referência [40]: para o caso limpo, os autores observam um comportamento de escala para a resistividade na região de “crossover” de Mott e associam esse comportamento a uma perspectiva de “criticalidade quântica escondida”. Eles argumentam que a presença de uma região de coexistência em $T < T_c$ é um fenômeno de baixas energias e pode não influenciar o sistema a temperaturas maiores, que apresenta características consistentes com a presença de um ponto crítico quântico a $T = 0$. Como a desordem tende a diminuir a temperatura crítica, é interessante estudar T_c em função de W , possivelmente revelando o ponto crítico quântico “escondido” pela região de coexistência, ou seja, encontrando $T_c(W^*) = 0$, para um certo W^* .

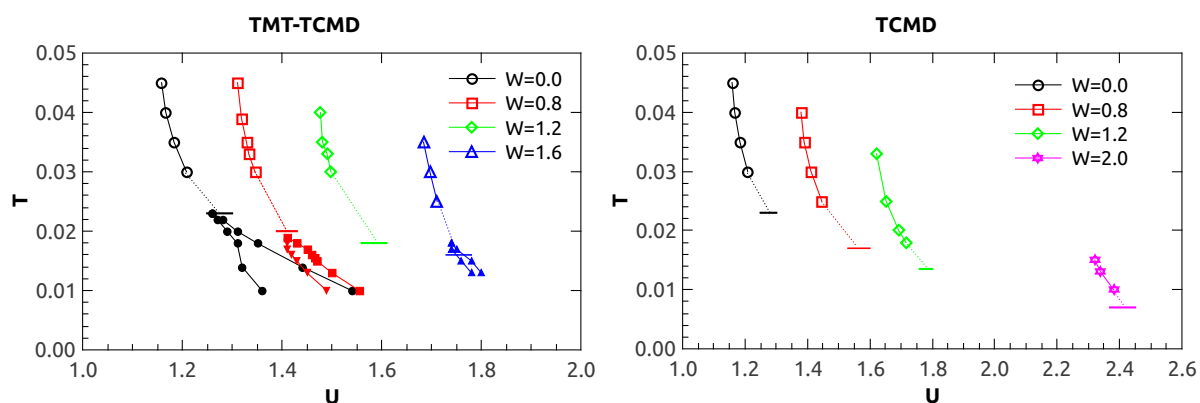


Figura 4.10: LWQ para diferentes valores de W , incluindo linhas horizontais representando o valor de T_c , e algumas linhas espinoidais delimitando regiões de coexistência. O quadro da esquerda apresenta resultados obtidos via TMT-TCMD, enquanto o da direita se refere a TCMD.

Na figura 4.10 vemos as LWQ obtidas por TMT-TCMD e por TCMD, para diferentes valores de W . Valores de T_c encontrados a partir de uma análise análoga à apresentada na figura 4.8 são representados por linhas horizontais. No caso de TMT-TCMD, incluímos ainda algumas linhas

espinoidais, caracterizando a região de coexistência. Novamente, comparações entre resultados de TMT-TCMD e de TCMD reforçam os efeitos de localização de Anderson descritos na seção anterior, isto é, ao incluir tais efeitos, a transição ocorre para um U menor e a temperatura crítica aumenta, em comparação com resultados obtidos por TCMD.

O comportamento da temperatura crítica em função da desordem fica mais evidente na figura 4.11, na qual observamos as curvas de $T_c(W)$ obtidas com os dois métodos. T_c permanece finita mesmo ao incluirmos efeitos de localização de Anderson. Note que os resultados de TMT-TCMD foram obtidos até $W = 1.6$. Para valores maiores de W , não conseguimos definir uma taxa de convergência linear para a função de Green em função dos passos iterativos, dessa forma não encontramos um valor de λ bem definido, o que impossibilita uma análise satisfatória de T_c a partir da região de “crossover”.

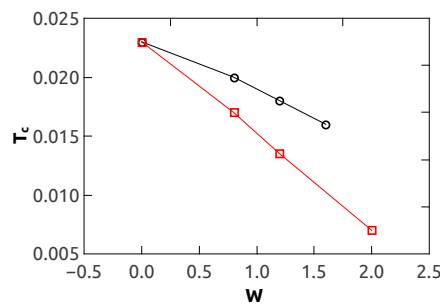


Figura 4.11: Curvas de temperatura crítica em função da desordem obtidas por TMT-TCMD e por TCMD.

Para completar os resultados acima, procuramos detalhadamente uma região de coexistência para $W = 2.0$, analisando DE típicas obtidas partindo de uma função inicial metálica, aumentando U , e partindo de um isolante, diminuindo U . Observamos diferentes valores de temperatura e vimos que em todos os casos as soluções independem do “chute” inicial utilizado, conforme apresentado na figura 4.12 para $T = 0.008$. Esse valor de temperatura é pequeno, de forma que podemos considerar que, para o valor de desordem considerado, não há região de coexistência para nenhum valor de T . Além disso, observamos que efeitos de localização de Anderson tornam a região de coexistência mais estreita em U (como pode ser visto nas figuras 4.3, 4.6 e 4.10, por exemplo). Esses fatores nos levam à conjectura de que, no tratamento de TMT-TCMD para o modelo de Hubbard, T_c vai a zero descontinuamente pela junção das duas linhas espinoidais para $W \lesssim 2$. De fato, pela observação do diagrama de fase $U \times W$ a $T = 0$ da referência [27] (reproduzido na figura 1.14), vemos que a região de coexistência se fecha para $W \approx 2$, indicando que T_c vai a zero aproximadamente nesse valor de desordem. Outras regiões do diagrama de fase de sistemas correlacionados e desordenados, incluindo aquela na qual acreditamos que $T_c = 0$, serão estudadas na seção 4.5.

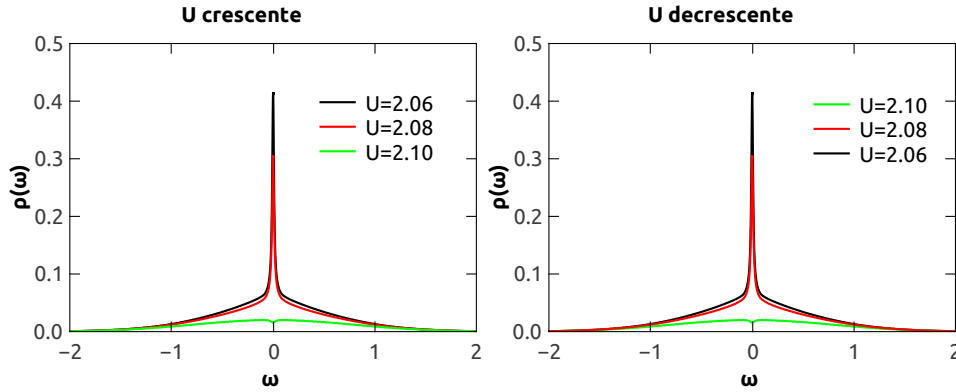


Figura 4.12: DE típicas obtidas partindo de uma função inicial metálica, aumentando U , e partindo de um isolante, diminuindo U . As soluções encontradas coincidem, o que indica que não há região de coexistência para $W = 2.0$ a $T = 0.008$.

4.4 Transição metal-isolante induzida por desordem - Regime de $W > U$.

Na seção anterior estudamos o regime de $U > W$, que possui uma transição de fase do tipo Mott, isto é, as DE apresentam a abertura do “gap” no nível de Fermi com o aumento de U . Mesmo nesse regime, observamos efeitos relevantes de localização de Anderson. Na presente seção estudamos o regime contrário, $W > U$, que apresenta uma transição tipo Anderson, porém com efeitos relevantes devido à correlação. Ressaltamos que, a partir desta seção, apresentamos exclusivamente resultados obtidos via TMT-TCMD, pois são estes que incluem efeitos de localização de Anderson.

Diferentemente da transição de Mott, a transição de Anderson é de segunda ordem e por isso não apresenta região de coexistência; além disso, ela não é caracterizada pela abertura de um “gap”. Vimos que, nessa transição, a mobilidade dos elétrons é reduzida devido à aleatoriedade das energias de cada sítio. A localização começa pelas bordas das bandas (veja figura 4.5) e, com o aumento de W , mais estados vão se tornando localizados. Do ponto de vista de problemas locais (problemas de uma impureza), as DE são caracterizadas por picos muito estreitos, que não contribuem para o valor típico da DE da rede. Em outras palavras, a DE típica considera apenas estados estendidos do sistema. Quando todos os estados se localizam, a DE típica vai a zero [8, 27].

A densidade de estados típica integrada na frequência, N , pode ser considerada, portanto, um parâmetro de ordem para a transição de Anderson, como pode ser visto na figura 4.13. Os quadros da esquerda apresentam DE típicas para $T = 0.005$ e diferentes valores de desordem para (a) $U = 0.1$ e (c) $U = 1.0$. Nesses gráficos observamos uma redução de peso espectral à medida que aumentamos W , indicando que os estados vão se localizando. Para um valor crítico de W , não há mais estados estendidos no sistema, que passa então por uma transição metal-isolante induzida pela desordem. À direita na figura, apresentamos N em função de W

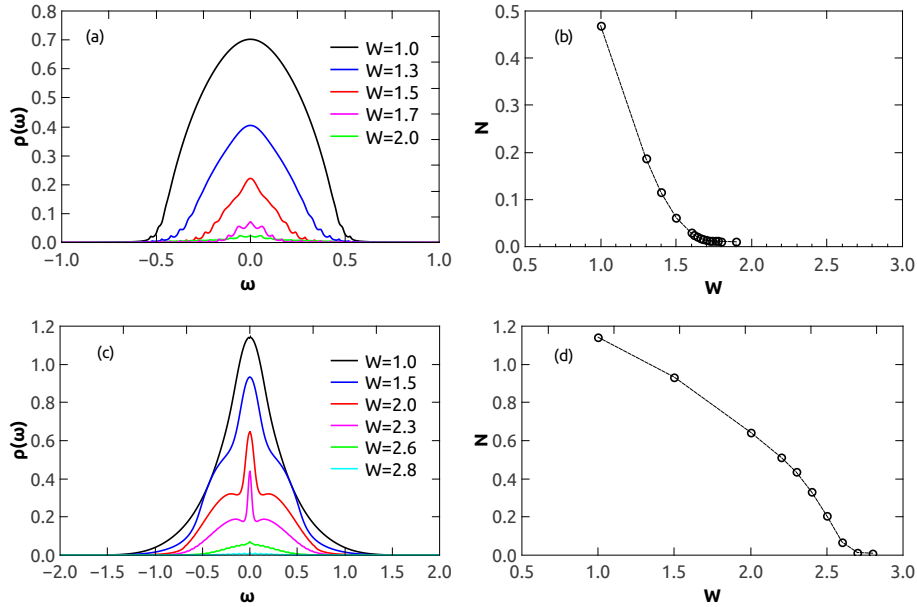


Figura 4.13: DE típicas para (a) $U = 0.1$ e (c) $U = 1.0$, para os valores de W apresentados nas legendas. DE típica integrada na frequência, N , em função de W para (b) $U = 0.1$ e (d) $U = 1.0$. Resultados para $T = 0.005$.

para os valores de U fixos considerados em (a) e (c). N diminui continuamente à medida que os estados vão se tornando localizados; quando $N \approx 0$, o metal se torna um isolante de Anderson (note que N não é exatamente zero devido a incertezas no cálculo numérico).

A transição de Anderson é bem definida quando $U = 0$. No caso presente, em que $U \neq 0$, podemos dizer que a transição também é induzida pela desordem, o que fica evidente pela ausência do “gap” e redução do peso espectral à medida que aumentamos W . A presença de interação, no entanto, tem efeitos relevantes sobre o sistema, mesmo no regime $W > U$. Comparando, por exemplo, a curva do quadro (b), para $U = 0.1$, com a curva em (d), para $U = 1.0$, observamos que a interação elétron-elétron blinda os efeitos de localização devido à desordem, pois, com o aumento de U , N se anula para um valor maior de W (os valores de desordem críticas são $W \approx 1.8$ para $U = 0.1$ e $W \approx 2.7$ para $U = 1.0$). Tal resultado está de acordo com a literatura [49] e pode ser observado, por exemplo, nos resultados experimentais em redes óticas apresentados na figura 1.10 e no diagrama de fase da figura 1.14.

É interessante observar ainda o comportamento do número de ocupação por spin, n_i , em função da energia no sítio, ε_i , nesta transição. A figura 4.14 apresenta dados para $U = 1.0$ e $T = 0.005$. Em (a) vemos uma DE metálica ($W = 2.3$) e uma DE isolante ($W = 2.8$) e em (b) os respectivos números de ocupação por spin. Observamos que no caso isolante (quadrados vermelhos) os sítios estão vazios (quando $\varepsilon_i > U/2$), duplamente ocupados (quando $\varepsilon_i < -U/2$), ou ocupados com um único elétron (quando $-U/2 < \varepsilon_i < U/2$). A presença de ocupação simples é um efeito gerado pela interação. Este perfil de ocupação do isolante de Anderson interagente é claramente diferente do observado para um isolante de Mott (figura 4.7), no qual observamos

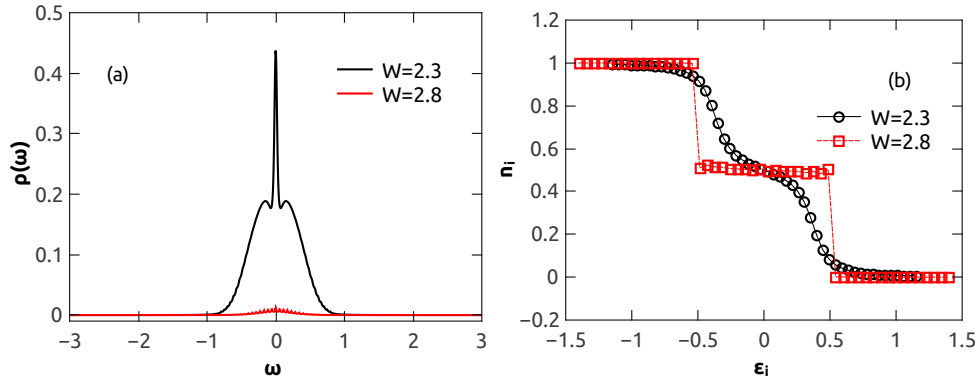


Figura 4.14: DE típicas em função da frequência para dois valores de W e respectivos números de ocupação local por spin em função da energia do sítio. No caso isolante observamos tanto ocupação simples quanto sítios vazios ou duplamente ocupados, o que indica um isolante de Anderson interagente. Resultados para $U = 1.0$ e $T = 0.005$.

apenas ocupação simples.

4.5 Diagrama de fase de sistemas correlacionados e desordenados, com ênfase no regime de $U \approx W$

Nas seções anteriores, estudamos principalmente dois regimes do diagrama de fase de sistemas correlacionados e desordenados, $W > U$ e $U > W$, e observamos tanto os efeitos de desordem sobre o isolante de Mott, quanto os efeitos de correlação sobre o isolante de Anderson. Vimos, por exemplo, que no tratamento que considera localização de Anderson, a região de coexistência torna-se cada vez mais estreita à medida que aumentamos W , até que as linhas espinoidais provavelmente se unem e a temperatura do ponto crítico de segunda ordem vai a zero. Com o objetivo de compreender melhor tais regimes e analisar ainda o caso em que $U \approx W$, estudamos, na presente seção, o comportamento do sistema ao longo de diferentes linhas do diagrama de fase $U \times W$.

Um diagrama deste tipo, obtido por nós a $T = 0.008$, pode ser visto na figura 4.15, no qual é possível observar a diversidade de fases e transições presentes em sistemas correlacionados e desordenados descritos pelo modelo de Hubbard. Os círculos constituem as linhas espinoidais que delimitam a região de coexistência de Mott (em preto temos a linha espinoidal metálica, U_{c2} , e em rosa a linha espinoidal isolante, U_{c1}). Os triângulos verdes correspondem à transição entre um metal e um isolante de Mott sem a presença de uma região de coexistência. Nesse caso, os pontos de transição obtidos partindo-se de uma função inicial metálica, aumentando U , ou de um isolante, diminuindo U , coincidem. As estrelas azuis indicam pontos nos quais $\rho(\omega_0)$ e N vão a zero, ou seja, correspondem às transições entre as fases metálica e isolante de Anderson correlacionado. Finalmente, os quadrados vermelhos correspondem a pontos de transição entre o isolante de Mott e o isolante de Anderson. Esse diagrama concorda bem

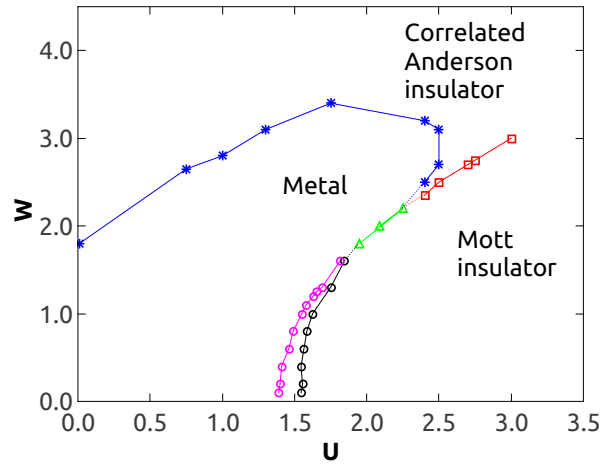


Figura 4.15: Diagrama de fase $U \times W$ obtido a $T = 0.008$. Veja texto para a definição das cores/símbolos.

com outro conhecido na literatura [27] (reproduzido na figura 1.14) e todas essas transição são exemplificadas e analisadas em detalhes ao longo desta seção.

Uma análise conjunta da DE no nível de Fermi e da densidade espectral integrada pode nos ajudar a observar em detalhes os mecanismos de localização presentes em transições de fase encontradas para diferentes valores de W fixos, aumentando U . Resultados para $\rho(\omega_0)$ e N em função de U em torno dessas transições podem ser vistos na figura 4.16. Além disso, as correspondentes DE típicas em função da frequência são apresentadas na figura 4.17. Na figura 4.16 (a), vemos que em todos os casos há um comportamento não monotônico de $\rho(\omega_0)$ em função de U dentro da fase metálica. Como pode ser observado no diagrama de fase da figura 4.15, partindo de U pequeno e aumentando a interação, levamos o sistema para “mais longe” do isolante de Anderson, o que provoca um aumento da metalicidade, ou seja, um aumento de $\rho(\omega_0)$. Aumentando ainda mais o valor de U , o sistema se aproxima do isolante de Mott, o que provoca uma redução em $\rho(\omega_0)$, que então vai a zero no ponto da transição metal-isolante.

As figuras 4.16 e 4.17 apresentam resultados para transições de fase observadas em diferentes regimes. Para $W = 1.0$, por exemplo, a transição ocorre para $U > W$. Nesse caso, vemos que há localização devido à desordem, o que provoca perda de peso espectral na DE típica, com redução de N (veja figura 4.16(b)), que, no entanto, permanece finito quando $\rho(\omega_0) = 0$ (veja figura 4.16 (a)), caracterizando um isolante de Mott. Para esse valor de desordem, na fase isolante, as DE típicas apresentam estruturas bem definidas de sub-bandas separadas por um “gap”, como pode ser visto na figura 4.17 (a).

À medida que aumentamos W , a distinção entre os dois tipos de isolantes torna-se menos evidente, pois ocorre uma redução nas sub-bandas e N diminui. Mais informações sobre os mecanismos de localização envolvidos nessas transições podem ser obtidas pela análise do número de ocupação por spin em função da energia dos sítios. Na figura 4.18, apresentamos gráficos de n_i em função de ε_i para (a) $W = 1.8$ e (b) $W = 2.0$ e diferentes valores de U (as DE

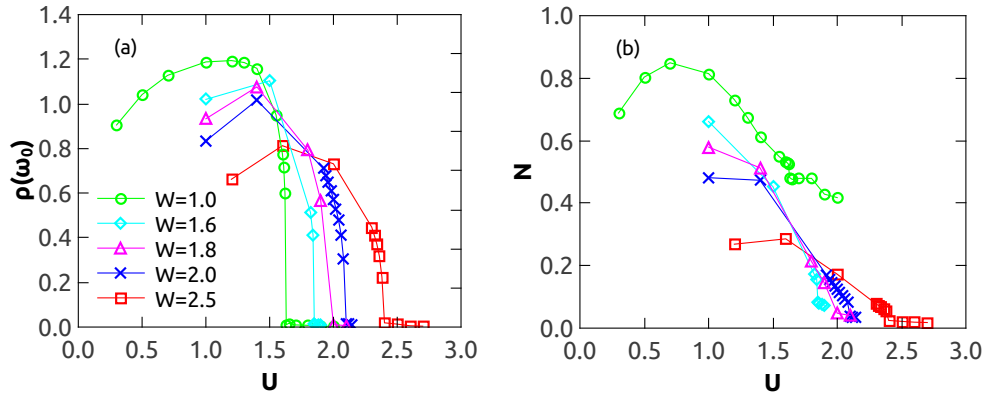


Figura 4.16: (a) $\rho(\omega_0)$ e (b) N em função de U para diferentes valores de desordem W . Todos os resultados foram obtidos a $T = 0.008$.

típicas correspondentes podem ser observadas na figura 4.17, quadros (c) e (d)). Vemos que não há sítios vazios nem duplamente ocupados para nenhum valor de U , mas apenas números de ocupação característicos da fase metálica (para $U < U_c$) e da fase isolante de Mott (para $U > U_c$). Isso indica que, apesar do forte efeito de localização de Anderson sobre os sistemas (veja, por exemplo, a redução em N apresentada na figura 4.16(b)), a transição é do tipo Mott, caracterizada por ocupação simples de cada sítio.

Note que consideramos $T_c = 0$ para $W = 2.0$, pois não há região de coexistência a temperaturas baixas, conforme observado na figura 4.12. Além disso, a análise de números de ocupação mostra que a transição é do tipo Mott, conforme descrevemos acima. Isso significa que observamos, para $W \approx 2$, uma região na qual há transição de Mott sem a presença de coexistência metal-isolante. Em outras palavras, os efeitos de localização de Anderson provocam o desaparecimento da região de coexistência, revelando o ponto crítico quântico da transição de Mott.

O sistema com $W = 2.5$, representado na figura 4.19, apresenta um comportamento um pouco diferente dos casos anteriores. Para $U = 2.3$, observamos números de ocupação característicos da fase metálica, o que concorda com os resultados da figura 4.17 (e), na qual observamos picos centrais de quase-partícula nas DE típicas correspondentes. Para $U = 2.4$, no entanto, observamos que praticamente todos os sítios estão ocupados com um único elétron, com exceção daqueles nos quais $|\varepsilon_i| \approx |U/2|$, que estão vazios ou duplamente ocupados. Aparentemente temos, nesse caso, um isolante de Anderson fortemente correlacionado. Aumentando ainda mais o valor de U ($U = 2.6$), observamos que todos os sítios passam a apresentar ocupação simples, ou seja, há uma transição entre um isolante de Anderson correlacionado e um isolante de Mott. A presença de uma faixa de isolante de Anderson entre as fases isolante de Mott e metálica, para o regime $W \approx U$, pode ser observada nos resultados apresentados no diagrama de fase da figura 4.15. Essa região é, no entanto, muito estreita, sua existência podendo estar dentro da resolução numérica que temos.

Podemos estudar ainda linhas do diagrama de fase para U fixo e W crescente. Resultados

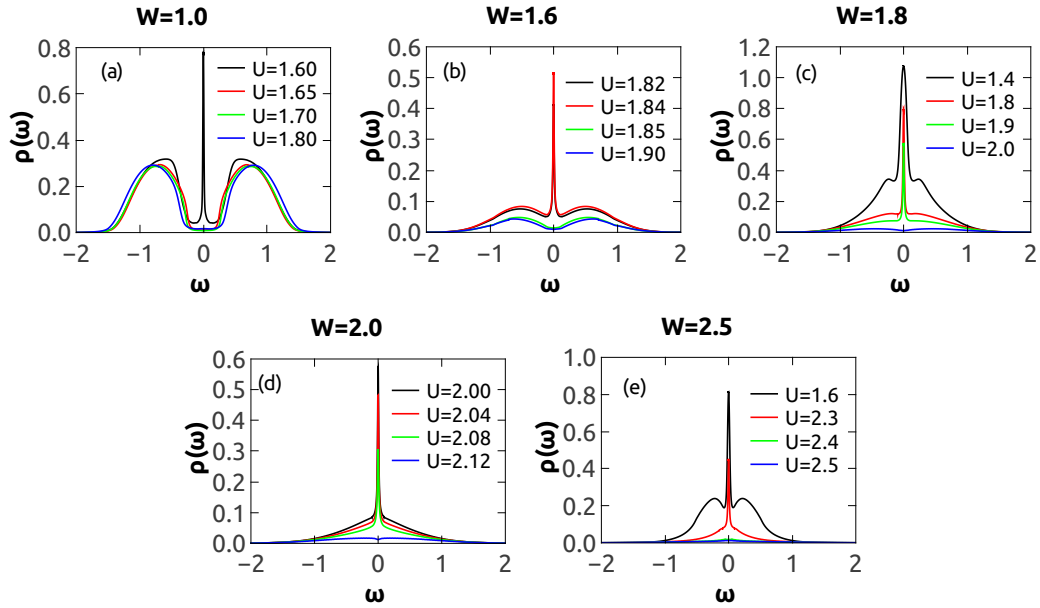


Figura 4.17: DE típicas em função da frequência para diferentes valores de U para (a) $W = 1.0$, (b) $W = 1.6$, (c) $W = 1.8$, (d) $W = 2.0$ e (e) $W = 2.5$. Resultados obtidos a $T = 0.008$.

para $U = 1.75$ e $T = 0.008$ podem ser vistos na figura 4.20. Para W pequeno, encontramos a fase isolante de Mott, aumentando a desordem atingimos a fase metálica e, para W ainda maior, temos um isolante de Anderson. Isso fica evidente pela observação da DE típica em (a), na qual vemos um isolante de Mott caracterizado por duas sub-bandas de Hubbard separadas por um “gap” para $W = 1.0$, um metal com um pico central de quase-partícula no nível de Fermi para $W = 2.5$ e um isolante de Anderson, no qual a DE típica se anula devido à localização de todos os sítios, para $W = 4.0$. Em (b), vemos a ocupação por spin n_i em função da energia no sítio ϵ_i , normalizada pelo valor da largura W da desordem. Nesta figura, também observamos uma distinção clara entre as fases, isto é, ocupação simples no isolante de Mott, ocupação variável no metal e estados vazios, duplamente ocupados ou ocupados com um único elétron no isolante de Anderson correlacionado. Os pontos de transição podem ser bem estabelecidos pela observação da DE típica integrada, N , e da DE típica no nível de Fermi, $\rho(\omega_0)$, em função de W , apresentadas em (c). Em $W \approx 1.3$, $\rho(\omega_0) \rightarrow 0$, mas N permanece finito, caracterizando uma transição de Mott (nesse caso não observamos a região de coexistência porque realizamos apenas cálculos para U crescente). Em $W \approx 3.5$, por outro lado, $\rho(\omega_0) \rightarrow 0$ é acompanhado por $N \rightarrow 0$, o que indica uma transição de Anderson.

Resultados para $U = 3.0$ e $T = 0.008$ são apresentados na figura 4.21. Em (a) vemos DE típicas em função da frequência para diferentes valores de W . Note a escala dos gráficos: a DE típica é muito pequena, indicando forte efeito de localização de Anderson. No entanto, para W menor observamos uma estrutura remanescente de duas sub-bandas separadas por um “gap”, que é substituída por uma estrutura sem “gap”, mais localizada nas bordas, à medida que aumentamos W , o que pode indicar um “crossover” entre os isolantes de Mott e Anderson.

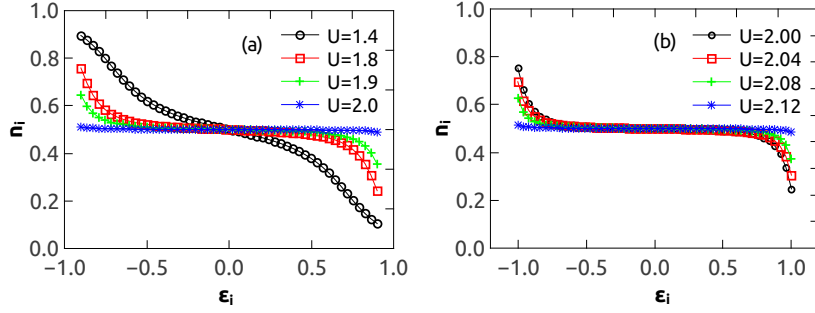


Figura 4.18: Número de ocupação por spin em função da energia do sítio para (a) $W = 1.8$ e (b) $W = 2.0$. Resultados para $T = 0.008$.

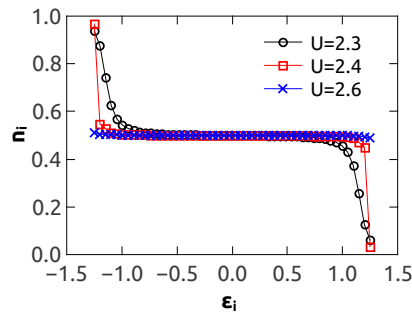


Figura 4.19: Número de ocupação por spin em função da energia no sítio para $W = 2.5$, $T = 0.008$ e diferentes valores de U .

As DE não se anulam em $\rho(\omega_0)$ por efeitos de temperatura e limitação numérica.

A distinção entre os dois tipos de isolante pode ser confirmada pelos resultados do quadro (b) da figura, que apresenta o número de ocupação por spin em função da energia no sítio. Para $W = 2.8$ há apenas ocupação simples, caracterizando um isolante de Mott, enquanto que para $W = 3.4$, observamos, além de ocupação simples, sítios vazios e sítios duplamente ocupados, caracterizando um isolante de Anderson correlacionado. Nossos resultados numéricos, apresentados no diagrama de fase da figura 4.15, indicam que o “crossover” entre os dois isolantes ocorre para $W = U$. Isso pode ser entendido se observarmos que o comportamento de dois fluidos característico do isolante de Anderson correlacionado surge quando $W \geq U$, pois nesse caso há sítios com energia $\varepsilon_i < -U/2$, que ficam duplamente ocupados ($n_i = 1$) e sítios com $\varepsilon_i > U/2$, que ficam vazios ($n_i = 0$). Esses resultados demonstram que há uma região, para W e U grandes, na qual os dois isolantes estão diretamente conectados, sem uma fase metálica intermediária, em concordância com previsões teóricas presentes na literatura [28].

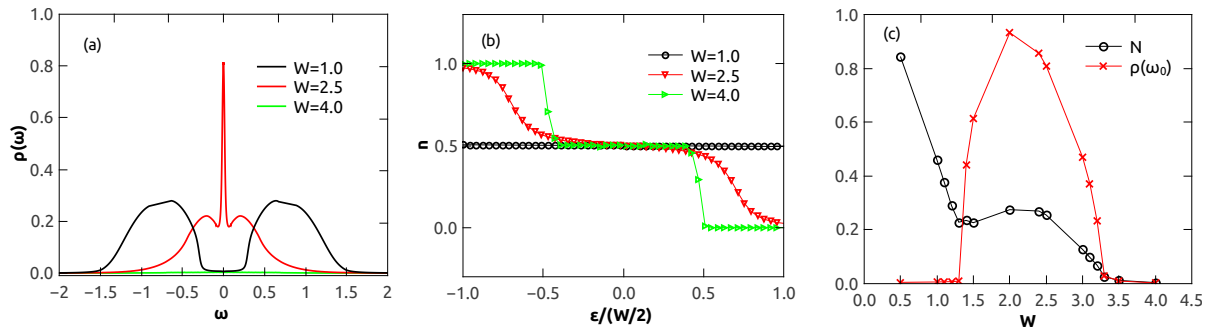


Figura 4.20: Resultados para $U = 1.75$ e $T = 0.008$: aumentando W vamos da fase isolante de Mott para a fase metálica e finalmente para a fase isolante de Anderson. (a) DE típicas para diferentes valores de W . (b) Ocupação por spin em função da energia do sítio normalizada pela largura da distribuição da desordem. (c) N e $\rho(\omega_0)$ em função de W . Em todos os gráficos percebemos uma distinção clara entre as fases.

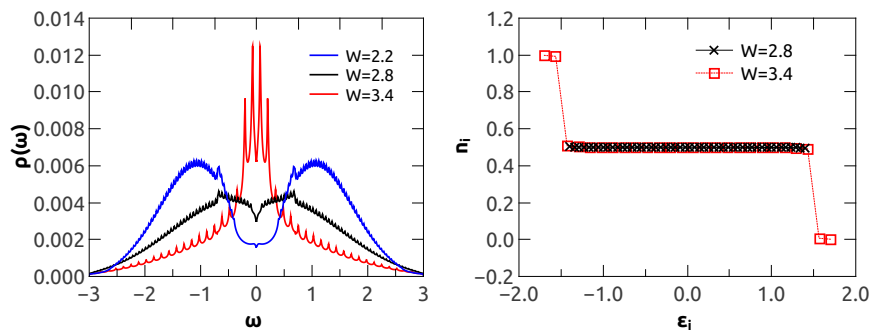


Figura 4.21: Resultados para $U = 3.0$ e $T = 0.008$ variando W : (a) DE típicas e (b) número de ocupação por spin em função da energia no sítio normalizada pela largura da desordem.

Conclusões

O trabalho apresentado nesta dissertação teve como proposta estudar sistemas correlacionados e desordenados, mais especificamente analisando a forma como interação eletrônica, U , e desordem, W , se combinam no processo de localização das funções de onda eletrônicas. Correlação eletrônica pode gerar a transição metal-isolante de Mott, enquanto desordem pode levar à localização de Anderson. Exemplos de sistemas nos quais este estudo é relevante são aqueles que possuem orbitais d ou f semi-preenchidos, pois os elétrons que ocupam esses orbitais sofrem forte repulsão coulombiana, o que influencia as propriedades do material. Além disso, materiais reais apresentam impurezas; em certas montagens experimentais dopantes são inclusive acrescentados propositalmente, com o objetivo de gerar pressão química, simulando uma redução na interação elétron-elétron. Desordem e interação se combinam, no entanto, de maneiras não triviais. Nesse contexto, investigamos os efeitos de localização de Anderson sobre a região de coexistência metal-isolante, presente na transição de Mott para temperaturas menores que a temperatura crítica T_c .

Esse estudo foi realizado utilizando o modelo de Hubbard com desordem na energia local, tratado por Teoria de Campo Médio Dinâmico combinada à Teoria do Meio Típico. O primeiro método caracteriza bem a transição de Mott, enquanto o segundo é capaz de descrever efeitos de localização de Anderson. Nessa combinação, o modelo da rede é mapeado em um ensemble de problemas de uma impureza e quantidades globais são caracterizadas por seus valores típicos (ou valores mais prováveis). Além disso, comparamos alguns resultados com outros obtidos por Teoria de Campo Médio Dinâmico “tradicional”, que não inclui efeitos de localização devido à desordem. Essa comparação permite-nos caracterizar bem tais efeitos.

Estudamos diferentes limites presentes no diagrama de fase de materiais correlacionados e desordenados. Os resultados obtidos neste trabalho permitem um entendimento mais completo de alguns pontos, além de gerarem novas conclusões.

Com relação ao limite $U > W$, sabemos que a transição é do tipo Mott, o que está de acordo com os resultados apresentados neste trabalho. Uma comparação entre resultados obtidos com TMT-TCMD e TCMD “tradicional” permite-nos concluir, no entanto, que há efeitos de localização de Anderson relevantes ainda neste regime de desordem pequena. A localização gerada por desordem move a transição para U menor, devido à localização dos estados nas bordas das bandas, além de tornar a região de coexistência mais estreita em U .

Ainda nesse regime, é possível obter o ponto crítico de segunda ordem a partir da região de “crossover”, isto é, trabalhando a temperaturas acima da região de coexistência. Esse pro-

cedimento foi apresentado na literatura para o caso limpo. Demonstramos que o método é válido também para o caso desordenado e passamos então a utilizá-lo para investigar os efeitos de localização de Anderson sobre a temperatura crítica. Para os valores de W considerados por este método, isto é, $W \leq 1.6$, T_c permanece finita, mesmo incluindo efeitos de localização de Anderson. Não foi possível utilizar o método para descrever sistemas no limite $W > U$, devido a limitações numéricas. Observamos, no entanto, que não há região de coexistência para $W = 2$, mesmo a temperaturas consideravelmente pequenas. Além disso, notamos que a localização de Anderson torna a região de coexistência mais estreita em U , o que pode fazer com que as linhas espinoidais que definem a região de coexistência coincidam, suprimindo essa região. Assim, concluímos que, no tratamento do modelo de Hubbard desordenado por TMT-TCMD, a temperatura crítica T_c vai a zero descontinuamente e, para $W \approx 2$, observamos uma transição metal-isolante de Mott sem a presença de uma região de coexistência.

No regime de $W > U$, utilizamos TMT-TCMD para descrever a transição metal-isolante induzida por localização de Anderson. Nossos resultados mostram que, na presença de interação, uma fração dos sítios passa a ter ocupação simples, resultando em isolantes de Anderson correlacionados. Além disso, um aumento de U provoca um aumento na desordem crítica na qual ocorre a transição. Tais resultados estão de acordo com outros já conhecidos.

Finalmente, no regime de W e U grandes, observamos que os isolantes de Mott e Anderson estão diretamente conectados, sem a presença de uma fase metálica intermediária. Nossos resultados numéricos mostram que o “crossover” entre os dois isolantes ocorre para $W \simeq U$, em concordância com previsões presentes na literatura.

Com o objetivo de complementar o trabalho apresentado nesta dissertação, temos a intenção de analisar o comportamento da resistividade em torno da transição de Mott na região na qual não encontramos coexistência de fases ($W/D \sim 2$). No caso limpo, as curvas de resistividade em função da temperatura para diferentes valores de interação apresentam um comportamento de escala característico mesmo para temperaturas acima de T_c [40]. Analisaremos o caso desordenado para $W/D \sim 2$ e esperamos, assim, reforçar os resultados que indicam a presença de um ponto crítico quântico na transição de Mott.

Referências Bibliográficas

- [1] P. W. Anderson, “*More Is Different*”, Science **177**, 4047 (1972).
- [2] N. F. Mott, “*The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals*”, Proc. Phys. Soc. A **62**, 416 (1949).
- [3] P. W. Anderson, “*Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*”, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [4] R. Zallen, “*The Physics of Amorphous Solids*”, A Wiley-Interscience publication, New York, 1983.
- [5] A. Georges e G. Kotliar, “*Hubbard model in infinite dimensions*”, Phys. Rev. B **45**, 6479 (1992).
- [6] G. Kotliar e D. Vollhardt, “*Strongly Correlated Materials: Insights From Dynamical Mean-Field Theory*”, Physics Today **57**, 53 (2004).
- [7] P. W. Anderson, “*Localized Magnetic States in Metals*”, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [8] V. Dobrosavljević, A.A. Pastor e B. K. Nikolić, “*Typical medium theory of Anderson localization: A local order parameter approach to strong disorder effects*”, Europhys. Lett. **62**, 76 (2003).
- [9] D. B. McWhan, A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman e T. M. Rice, “*Metal-Insulator Transition in Pure and Doped V_2O_3* ”, Phys. Rev. B. **7**, 1920 (1973).
- [10] D. B. McWhan, T. M. Rice e J. P. Remeika, “*Mott Transition in Cr-Doped V_2O_3* ”, Phys. Rev. Lett. **23**, 1384 (1969).
- [11] S.-K. Mo *et. al.*, “*Prominent Quasiparticle Peak in the Photoemission Spectrum of the Metallic Phase of V_2O_3* ”, Phys. Rev. Lett. **90**, 186403 (2003).
- [12] P. Limelette, A. Georges, D. Jérôme, P. Wzietek, P. Metcalf e J. M. Honig, “*Universality and Critical Behavior at the Mott Transition*”, Science **302**, 89 (2003).
- [13] S. Lupi *et. al.*, “*A microscopic view on the Mott transition in chromium-doped V_2O_3* ”, Nature Communications **1**, 105 (2010).

- [14] P. Limelette, P. Wzietek, S. Florens, A. Georges, T. A. Costi, C. Pasquier, D. Jérôme, C. Mézière e P. Batail, “*Mott transition and transport crossovers in the organic compound $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu[N(CN)_2Cl]$* ”, Phys. Rev. Lett. **91**, 016401 (2003).
- [15] Michael Dumm, Daniel Faltermeier, Natalia Drichko, Martin Dressel, Cecile Meziere e Patrick Batail, “*Bandwidth-controlled Mott transition in $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu[N(CN)_2Br_xCl_{1-x}]$: Optical studies of correlated carriers*”, Phys. Rev. B **79**, 195106 (2009).
- [16] A. Richardella, P. Roushan, S. Mack, B. Zhou, D. A. Huse, D. D. Awschalom e A. Yazdani, “*Visualizing Critical Correlations near the Metal-Insulator Transition in $Ga_{1-x}Mn_xAs$* ”, Science **327**, 665 (2010).
- [17] Y. Sekine, H. Takahashi, N. Môri, T. Matsumoto e T. Kosaka, “*Effect of pressure on transport properties of $Ni(S_{1-x}Se_x)_2$* ”, Physica B **237**, 148 (1997).
- [18] M. Matsuura, H. Hiraka, K. Yamada e Y. Endoh, “*Magnetic Phase Diagram and Metal-Insulator Transition of $NiS_{2-x}Se_x$* ”, JPSJ **69**, 3166 (2000).
- [19] S. S. Kondov, W. R. McGehee e B. DeMarco, “*Interplay of disorder and interactions in an optical lattice Hubbard model*”, disponível em *arXiv* : 1305.6072.
- [20] J. Feinleib e W. Paul, “*Semiconductor-To-Metal Transition in V_2O_3* ”, Phys. Rev. **155**, 841 (1967).
- [21] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth e M. J. Rozenberg, “*Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions*”, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [22] W. Metzner e D. Vollhardt, “*Correlated Lattice Fermions in $d = \infty$ Dimensions*”, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
- [23] M. Rozenberg, X. Y. Zhang, e G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **69**, 1236 (1992); A. Georges, e W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **69**, 1240 (1992); A. Georges e W. Krauth, Phys. Rev. B **48**, 7167 (1993); T. Pruschke, D. L. Cox, e M. Jarrell, Europhys. Lett. **21**, 593 (1993); T. Pruschke, D. L. Cox, e M. Jarrell, Phys. Rev. B **47**, 3553 (1993); M. Caffarel e W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **72**, 1545 (1994); L. Laloux, A. Georges e W. Krauth, Phys. Rev. B **50**, 3092 (1994).
- [24] M. M. Radonjić, D. Tanasković, V. Dobrosavljević, e K. Haule, “*Influence of disorder on incoherent transport near the Mott transition*”, Phys. Rev. B **81**, 075118 (2010).
- [25] J. G. Analytis, A. Ardavan, S.J. Blundell, R. L. Owen, E. F. Garman, C. Jeynes e B. J. Powell, “*Effect of Irradiation-Induced Disorder on the Conductivity and Critical Temperature of the Organic Superconductor $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu(SCN)_2$* ”, Phys. Rev. Lett. **96**, 177002 (2006).

- [26] M. C. O. Aguiar, V. Dobrosavljevic, E. Abrahams e G. Kotliar, “*Effects of disorder on the non-zero temperature Mott Transition*”, Phys. Rev. B **71**, 205115 (2005).
- [27] K. Byczuk, W. Hofstetter e D. Vollhardt, “*Mott-Hubbard transition vs. Anderson localization of correlated, disordered electrons*”, Phys. Rev. Lett. **94**, 056404 (2005).
- [28] M. C. O. Aguiar, V. Dobrosavljevic, E. Abrahams e G. Kotlia, “*Critical Behavior at the Mott-Anderson Transition: A Typical-Medium Theory Perspective*”, Phys. Rev. Lett **102**, 156402 (2009).
- [29] M. C. O. Aguiar, V. Dobrosavljević, E. Abrahams, e G. Kotliar, “*Scaling behavior of an Anderson impurity close to the Mott-Anderson transition*”, Phys. Rev. B **73**, 115117 (2006).
- [30] A. Georges, “*Strongly Correlated Electron Materials: Dynamical Mean-Field Theory and Electronic Structure*”, In: A. Avella e F. Mancini (Eds.), “*Lectures on the physics of highly correlated electron systems VIII*”, AIP Conference Proceedings **715**, 3 (2004).
- [31] V. L. Libero, *De Ising a Metropolis*, Revista Brasileira de Ensino de Física **22**, 3 (2000).
- [32] F. J. Dyson, “*The S Matrix in Quantum Electrodynamics*”, Phys. Rev. **75**, 1736 (1949).
- [33] K. Yosida e K. Yamada, Prog. Theor. Phys. **46**, 244 (1970); K. Yosida e K. Yamada, Prog. Theor. Phys. **53**, 1286 (1975).
- [34] H. Kajueter e G. Kotliar, “*New Iterative Perturbation Scheme for Lattice Models with Arbitrary Filling*”, Phys. Rev. Lett. **77**, 131 (1996).
- [35] D. Meyer, T. Wegner, M. Potthoff e W. Nolting, “*The asymmetric single-impurity Anderson model - the modified perturbation theory*” Physica B **270**, 225 (1999).
- [36] H. Barman e N. S. Vidhyadhiraja, “*Transport and Spectra in the Half-filled Hubbard Model: A Dynamical Mean Field Study*”, Int. J. Mod. Phys. B **25**, 2461 (2011).
- [37] A. Martin-Rodero, F. Flores, M. Baldo, e R. Pucci, “*A new solution to the Anderson-Newns Hamiltonian of chemisorption*”, Solid State Commun. **44** , 911 (1982).
- [38] G. Kotliar, “*Landau Theory of the Mott transition in the fully frustrated Hubbard model in infinite dimensions*”, Eur. Phys. J. B **11**, 27 (1999).
- [39] J. Vucicevic, H. Terletska, D. Tanaskovic e V. Dobrosavljevic, “*Finite temperature crossover and the quantum Widom line near the Mott transition*”, Phys. Rev. B **88**, 075143 (2013).
- [40] H. Terletska, J. Vucicevic, D. Tanaskovic e V. Dobrosavljevic, “*Quantum critical Transport Near the Mott Transition*”, Phys. Rev. Lett. **107**, 026401 (2011).
- [41] G. G. Simeoni, T. Bryk, F. A. Gorelli, M. Krisch, G. Ruocco, M. Santoro e T. Scopigno, “*The Widom line as the crossover between liquid-like and gas-like behaviour in supercritical fluids*”, Nature Physics **6**, 503 (2010).

- [42] H. Terletska, J. Vucicevic, D. Tanaskovic, V. Dobrosavljevic, *Supplementary Notes: Eigenvalue analysis*, disponíveis em *arXiv* : 1210.7201 e *arXiv* : 1012.5833.
- [43] J. M. Ziman, “*Models of Disorder*”, London: Cambridge University Press, 1979, p. 312.
- [44] E. N. Economou, “*Green’s Functions in Quantum Physics*”, Berlin: Springer-Verlag, 1983, p.141.
- [45] M. C. O. Aguiar, *Efeitos de temperatura e interação finita em sistemas desordenados correlacionados*, Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas, SP, 2003.
- [46] A. C. Hewson, “*The Kondo problem to heavy fermions*”, Cambridge: University Press, 1993.
- [47] T. V. Ramakrishnan in “*Chance and Matter*”, eds. J. Souletie, J Vannimenus e R Stora, Elsevier, Amsterdam (1987), p. 213-304.
- [48] J. Kondo, “*Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys*”, Progress of Theoretical Physics **32**, 37 (1964).
- [49] D. Tanasković, V. Dobrosavljević, E. Abrahams e G. Kotliar, “*Disorder Screening in Strongly Correlated Systems*”, Phys. Rev. Lett. **91**, 066603 (2003).

Apêndice A

Segunda quantização para férmions

Dada a equação de Schroedinger para um elétron

$$H_m \Phi_m = \epsilon_m \Phi_m, \quad (\text{A.1})$$

temos que o conjunto Φ_m forma uma base completa. A função de onda $\Psi(q_i)$ de um sistema de férmions é construída a partir de combinações lineares de produtos antissimetrizados de elementos da base, na forma

$$\Psi = \Gamma[\Phi_a(q_1)\Phi_b(q_2)\dots\Phi_n(q_n)], \quad (\text{A.2})$$

sendo q_i a coordenada da i -ésima partícula e Γ o determinante de Slater, que, para duas partículas, é dado por

$$\Gamma = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \Phi_1(1) & \Phi_1(2) \\ \Phi_2(1) & \Phi_2(2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_1(1)\Phi_2(2) - \Phi_1(2)\Phi_2(1)]. \quad (\text{A.3})$$

Alternativamente, é possível descrever Ψ por representação de segunda quantização,

$$\Psi = \sum_m \alpha_m |0_1, 0_2, \dots, 1_m, \dots\rangle, \quad (\text{A.4})$$

sendo que 0_i indica um estado vazio e 1_i representa um estado ocupado. Nesse caso, a descrição por produtos antissimetrizados e determinantes de Slater fica implícita, por exemplo pela relação

$$\Gamma[\Phi_a(q_1)\Phi_b(q_2)] \rightarrow |0_1 \ 0_2 \ \dots \ 1_a \ 1_b \ \dots \ 0 \ \dots\rangle. \quad (\text{A.5})$$

Nessa representação de segunda quantização, também conhecida como representação por número de ocupação, a transição entre estados é descrita por meio de operadores de criação e aniquilação. Para a criação de um estado temos

$$c_m^\dagger |n_1 \ n_2 \ \dots \ n_m \ \dots\rangle = \eta |n_1 \ n_2 \ \dots \ (n_m + 1) \ \dots\rangle, \quad (\text{A.6})$$

sendo n o número de partículas em cada orbital (que para férmions deve ser 0 ou 1) e η um fator de normalização. De forma análoga, para um operador de aniquilação temos

$$c_m |n_1 \ n_2 \ \dots \ n_m \ \dots\rangle = \xi |n_1 \ n_2 \ \dots \ (n_m - 1) \ \dots\rangle. \quad (\text{A.7})$$

Note que operadores de criação de dois férmions anti-comutam:

$$\begin{aligned} c_2^\dagger c_1^\dagger |0_1 \ 0_2\rangle &= \frac{1}{2} [\Phi_1(1)\Phi_2(2) - \Phi_2(1)\Phi_1(2)], \\ c_1^\dagger c_2^\dagger |0_1 \ 0_2\rangle &= \frac{1}{2} [\Phi_1(2)\Phi_2(1) - \Phi_2(2)\Phi_1(1)], \\ [c_1^\dagger, c_2^\dagger]_+ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Finalmente, veremos a representação de um operador em segunda quantização. Como exemplo, consideramos a atuação de um operador \hat{O} em Φ_m , gerando um estado ψ , que pode ser decomposto em elementos da base $\{\Phi_l\}$, ou seja,

$$\hat{O}\Phi_m = \psi = \sum_l O_{lm}\Phi_l. \quad (\text{A.9})$$

O coeficiente O_{lm} pode ser encontrado por operações simultâneas nos dois lados da equação A.9:

$$\int \Phi_{m'}^* \hat{O}\Phi_m d\vec{r} = \sum_l O_{lm} \int \Phi_{m'}^* \Phi_l d\vec{r} = \sum_l O_{lm} \delta_{lm'}, \quad (\text{A.10})$$

a partir do que obtemos $O_{lm} = \int \Phi_l^* \hat{O}\Phi_m d\vec{r}$.

Note que o efeito de \hat{O} sobre Φ_m é “destruir” esse elemento da base e “criar” uma série de outros elementos, com probabilidades O_{lm} . Isso significa que o operador \hat{O} pode ser representado como

$$\hat{O} \rightarrow \sum_l O_{lm} c_l^\dagger c_m, \quad (\text{A.11})$$

ou seja,

$$\hat{O}\Phi_m = \sum_l O_{lm} c_l^\dagger c_m |0_1, 0_2, \dots, 1_m, \dots\rangle. \quad (\text{A.12})$$

Como todo estado pode ser escrito como uma combinação linear de elementos da base, a generalização para a atuação do operador sobre um estado qualquer é direta:

$$\hat{O}\psi = \psi' \rightarrow \hat{O} \sum_m \alpha_m \Phi_m = \sum_l \alpha'_l \Phi_l, \quad (\text{A.13})$$

o que implica em

$$\hat{O} \rightarrow \sum_{lm} O_{lm} c_l^\dagger c_m. \quad (\text{A.14})$$

Referência: *Notas de aula do Prof. Mario Sérgio Carvalho Mazzoni, 2012, disponível em [http : //www13.fisica.ufmg.br/ mazzoni/transf/parte1.pdf](http://www13.fisica.ufmg.br/mazzoni/transf/parte1.pdf)*

Apêndice B

Funções de Green

B.1 Funções de Green de uma partícula - uma abordagem a partir de equações de Schroedinger

Funções de Green clássicas podem ser usadas como ferramentas para a solução de equações diferenciais. No contexto de eletromagnetismo, por exemplo, o potencial elétrico $\Phi(\vec{r})$ pode ser obtido de uma distribuição de carga $\rho(\vec{r})$ pela solução da equação de Poisson $\nabla^2\Phi(\vec{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0}\rho(\vec{r})$. Alternativamente, podemos procurar a solução para a função de Green $G(\vec{r})$, que obedece uma relação mais simples, $\nabla^2G(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$, e então obter $\Phi(\vec{r})$ por

$$\Phi(\vec{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0} \int d\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') \rho(\vec{r}'). \quad (\text{B.1})$$

Funções de Green quânticas, por outro lado, são úteis por exemplo na descrição de correlações elementares e de respostas do sistema a uma perturbação externa. Em geral, sistemas quânticos na presença de campos externos, interação ou desordem, não podem ser diagonalizados. Nesses caso podemos usar funções de Green para a descrição de propriedades dos sistemas.

Consideremos, por exemplo, a parte espacial da equação de Schroedinger de uma partícula na presença de uma perturbação $V(\vec{r})$:

$$[H_0(\vec{r}) + V(\vec{r})]\Psi = E\Psi. \quad (\text{B.2})$$

Para resolver essa equação, definimos uma função de Green correspondente que obedece uma relação diferencial da forma

$$[E - H_0(\vec{r})]G_0(\vec{r}, \vec{r}', E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (\text{B.3})$$

A partir dessa construção, podemos identificar

$$G_0^{-1}(\vec{r}, E) = E - H_0(\vec{r}) \rightarrow G_0^{-1}(\vec{r}, E)G_0(\vec{r}, \vec{r}', E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (\text{B.4})$$

Dessa forma, a equação de Schroedinger pode ser reescrita como

$$[G_0^{-1}(\vec{r}, E) - V(\vec{r})]\Psi = 0. \quad (\text{B.5})$$

Finamente, por inspeção é possível perceber que a solução da equação pode ser escrita na forma integral

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi^0(\vec{r}) + \int d\vec{r}' G_0(\vec{r}, \vec{r}', E) V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}'), \quad (\text{B.6})$$

sendo $\Psi^0(\vec{r})$ autoestado de H_0 . Resolvendo a equação integral por iteração, obtemos

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi^0(\vec{r}) + \int d\vec{r}' G_0(\vec{r}, \vec{r}', E) V(\vec{r}') \Psi^0(\vec{r}') + \mathcal{O}(V^2). \quad (\text{B.7})$$

Analogamente, podemos usar funções de Green no tratamento de equações de Schroedinger dependentes do tempo:

$$[i\partial_t - H_0(\vec{r}) - V(\vec{r})]\Psi(\vec{r}, t) = 0. \quad (\text{B.8})$$

Definindo

$$[i\partial_t - H_0(\vec{r})]G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t - t') \quad (\text{B.9})$$

e

$$[i\partial_t - H_0(\vec{r}) - V(\vec{r})]G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t - t'), \quad (\text{B.10})$$

podemos escrever a solução da equação B.8 como

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi^0(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}' \int dt' G_0(\vec{r}, \vec{r}'; t, t') V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}', t'), \quad (\text{B.11})$$

ou

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi^0(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}' \int dt' G(\vec{r}, \vec{r}'; t, t') V(\vec{r}') \Psi^0(\vec{r}', t'), \quad (\text{B.12})$$

usando G_0 ou G , respectivamente. Resolvendo B.11 iterativamente, obtemos

$$\begin{aligned} \Psi &= G_0 V \Psi^0 + G_0 V G_0 V \Psi^0 + G_0 V G_0 V G_0 V \Psi^0 + \dots \\ &= \Psi^0 + (G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0 + \dots) V \Psi^0, \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

sendo que utilizamos uma notação simplificada, omitindo os sinais de integração.

Comparando as equações B.13 e B.12 obtemos a equação de Dyson, que relaciona a função de Green total com a função de Green não perturbada na forma

$$\begin{aligned} G &= G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0 + \dots \\ &= G_0 + G_0 V (G_0 + G_0 V G_0 + \dots) \\ &= G_0 + G_0 V G. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

A função de Green assume maior significado se notarmos que, conhecendo a função de onda

em um tempo t' , podemos encontrar a função de onda no tempo t pela relação

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \Psi(\vec{r}', t'); \quad (\text{B.15})$$

assim, a função de Green é também chamada de propagador.

B.2 Funções de Green de uma partícula em sistemas de muitos corpos

Em um sistema de muitos corpos, os propagadores são convenientemente definidos a partir da notação de segunda quantização. A temperatura zero podemos definir uma função de Green eletrônica na forma

$$G(\lambda; t - t') = -i \langle \Psi_0 | T c_\lambda(t) c_\lambda^\dagger(t') | \Psi_0 \rangle, \quad (\text{B.16})$$

sendo λ um número quântico e Ψ_0 estado fundamental do Hamiltoniano H ($H | \Psi_0 \rangle = \epsilon_0 | \Psi_0 \rangle$). Além disso, T é o operador de ordenamento temporal, que organiza os operadores colocando à direita aqueles que atuam em tempos anteriores, ou seja

$$T[V(t_1)V(t_2)] = \theta(t_1 - t_2)V(t_1)V(t_2) + \theta(t_2 - t_1)V(t_2)V(t_1), \quad (\text{B.17})$$

onde

$$\theta(x) \begin{cases} 1 & \text{se } x > 0 \\ 0 & \text{se } x < 0 \\ 1/2 & \text{se } x = 0. \end{cases} \quad (\text{B.18})$$

Para explorar o significado da função de Green como propagador, vamos tomar o exemplo no qual $t > t'$. No tempo t' criamos uma excitação λ e a destruímos no tempo t . Se $c_\lambda^\dagger | \Psi_0 \rangle$ é autoestado de H ($H c_\lambda^\dagger | \Psi_0 \rangle = \epsilon_\lambda c_\lambda^\dagger | \Psi_0 \rangle$) então esse estado propaga-se com uma dependência temporal exponencial simples: $G(\lambda, t > t') = -i \exp[-i(t - t')(\epsilon_\lambda - \epsilon_0)]$. De forma geral, no entanto, $c_\lambda^\dagger | \Psi_0 \rangle$ não é autoestado do Hamiltoniano. Nesse caso, no tempo t' uma partícula no estado λ é espalhada e evolui durante um intervalo $t - t'$; depois medimos a superposição com o estado λ no tempo t , obtendo informações sobre o sistema. No caso de $t' > t$, temos informações sobre uma excitação de buraco.

B.3 Um exemplo: função de Green para férmions livres

Vamos analisar um exemplo de propagador livre, a função de Green de um gás de Fermi a temperatura zero (metal simples). O Hamiltoniano do problema é dado por

$$H = H_0 - \mu N = \sum_{\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (\text{B.19})$$

onde μ é o potencial químico, N é o número de elétrons e $c_{k\sigma}^\dagger$ ($c_{k\sigma}$) cria (destrói) um elétron de vetor de onda k (omitindo a indicação de vetor), massa m e spin σ . Além disso, $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$ e o estado fundamental é dado por

$$|\phi\rangle = \prod_{\sigma, |k| < k_F} c_{k\sigma}^\dagger |0\rangle. \quad (\text{B.20})$$

Na representação de Heisenberg, temos

$$\begin{aligned} c_{k\sigma}^\dagger(t) &= e^{i\epsilon_k t} c_{k\sigma}^\dagger \\ c_{k\sigma}(t) &= e^{-i\epsilon_k t} c_{k\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Na propagação para tempos futuros só é possível acrescentar um férmion acima da energia de Fermi, ou seja,

$$\begin{aligned} \langle \phi | c_{k\sigma}(t) c_{k'\sigma'}^\dagger(t') | \phi \rangle &= \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{k,k'} e^{-i\epsilon_k(t-t')} \langle \phi | c_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger | \phi \rangle \\ &= \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{k,k'} (1 - n_k) e^{-i\epsilon_k(t-t')}, \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

com $n_k = \theta(|k_F| - |k|)$. Na propagação para tempos passados, por sua vez, só é possível destruir um férmion, criando um buraco, abaixo da energia de Fermi:

$$\langle \phi | c_{k\sigma}(t) c_{k'\sigma'}^\dagger(t') | \phi \rangle = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{k,k'} n_k e^{-i\epsilon_k(t-t')}. \quad (\text{B.23})$$

Assim temos

$$G(\vec{k}, t) = -i[(1 - n_k)\theta(t) - n_k\theta(-t)]e^{-i\epsilon_k t}. \quad (\text{B.24})$$

Observe a mudança de sinal ao reordenar no tempo os operadores de criação e aniquilação para férmions. Isso ocorre devido à anti-comutação dos operadores. Definimos assim uma função de Green para partículas e uma para buracos:

$$G(\vec{k}, t) = \begin{cases} -i\theta_{|k|-|k_F|} e^{-i\epsilon_k t} & (t > 0), \text{ elétron} \\ i\theta_{|k_F|-|k|} e^{-i\epsilon_k t} & (t < 0), \text{ buraco} \end{cases} \quad (\text{B.25})$$

Realizamos agora uma transformada de Fourier da função de Green,

$$\begin{aligned} G(\vec{k}, \omega) &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega - \epsilon_k)t} e^{-|t|\delta} [\theta_{|k|-|k_F|}\theta(t) - \theta_{|k_F|-|k|}\theta(-t)] \\ &= -i \left[\frac{\theta_{|k|-|k_F|}}{\delta - i(\omega - \epsilon_k)} - \frac{\theta_{|k_F|-|k|}}{\delta + i(\omega - \epsilon_k)} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

sendo que o fator de convergência $e^{-|t|\delta}$ foi incluído para resolvermos a integral. Finalmente, tomando o limite $\delta \rightarrow 0$ e definindo $\delta_k = \text{sign}(|k| - |k_F|)$, o propagador para férmions livres é

dados por

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\delta_k}. \quad (\text{B.27})$$

Apêndice C

Sistemas a temperatura finita

A temperatura zero, as propriedades do sistema são determinadas pelo seu estado fundamental. A temperatura finita T , por outro lado, utilizamos um ensemble que inclui o estado fundamental e estados excitados, e calculamos médias com o auxílio da função de partição $Z = \text{Tr}e^{-\beta H}$, sendo $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e H o hamiltoniano do problema.

Z pode ser representada por um operador de evolução temporal em tempo imaginário, na forma $Z = \text{Tr}U(-i\hbar\beta)$, sendo $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$ o operador de evolução temporal. Dessa forma, o tratamento de problemas físicos de muitos corpos a temperatura finita pode ser construído evoluindo-se, em tempo imaginário, os estados a $T = 0$. Ou seja, realizando a substituição $\frac{it}{\hbar} \rightarrow \tau$ o formalismo para temperatura finita segue praticamente igual ao tratamento de sistemas a $T = 0$.

No formalismo a temperatura finita, o operador que dá a evolução da função de onda a partir de um tempo qualquer é substituído por uma evolução no intervalo finito de tempo imaginário $t \in [0, -i\hbar\beta]$. Isso implica em uma limitação na dimensão temporal nesse formalismo. Isso pode ser interpretado como uma consequência de flutuações térmicas, que fazem com que processos mais longos do que $\tau = \beta$ percam a coerência. Grandezas físicas são então periódicas (no caso de bósons) ou anti-periódicas (férmions) no intervalo $\tau \in [0, \beta]$.

A transformada de Fourier de funções em tempo imaginário gera funções em um espaço de frequências imaginárias $i\nu_n$ ($i\omega_n$), conhecidas como frequências de Matsubara para bósons (férmions). Da condição de periodicidade (anti-periodicidade) temos

$$\begin{aligned} e^{i\nu_n(\tau+\beta)} &= e^{i\nu_n\tau} \\ (e^{i\omega_n(\tau+\beta)} &= -e^{i\omega_n\tau}), \end{aligned} \tag{C.1}$$

de onde obtemos $\nu_n = 2\pi n k_B T$ ($\omega_n = \pi(2n + 1)k_B T$).

Referência: P. Coleman, “*Introduction to Many Body Physics*”, disponível em www.physics.rutgers.edu/~coleman/.

Apêndice D

Transformada de Hilbert

A função de Green obedece a transformada de Hilbert

$$G(\omega + i\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\omega') d\omega'}{\omega + i\eta - \omega'}, \quad (\text{D.1})$$

sendo $\rho(\omega')$ a DE. Multiplicando por $\frac{\omega - i\eta - \omega'}{\omega - i\eta - \omega'}$, temos

$$G(\omega + i\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\omega') d\omega'}{(\omega - \omega')^2 + \eta^2} (\omega - i\eta - \omega') \quad (\text{D.2})$$

e, separando a parte real e a parte imaginária, encontramos

$$G(\omega + i\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\omega - \omega')\rho(\omega') d\omega'}{(\omega - \omega')^2 + \eta^2} - i\pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta\rho(\omega') d\omega'}{\pi[(\omega - \omega')^2 + \eta^2]}. \quad (\text{D.3})$$

Fazendo $\eta \rightarrow 0$, obtemos

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\omega') d\omega'}{\omega - \omega'} - i\pi \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega - \omega')\rho(\omega') d\omega'. \quad (\text{D.4})$$

Assim, vemos que a parte imaginária da função de Green no eixo real se relaciona com a DE da forma conhecida $\text{Im}G(\omega) = -\pi\rho(\omega)$, enquanto a parte real é dada pelo valor principal de Cauchy de $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\omega') d\omega'}{\omega - \omega'}$.