

FI 193 – Teoria Quântica de Sistemas de Muitos Corpos

2º Semestre de 2023

22/08/2023

Aula 6

Modelo de Hubbard

- MODELO MUITO USADO PARA DESCREVER EFEITOS DE INTERAÇÕES EM SISTEMAS COM BANDAS d SEMI-PREENCHIDAS: METAIS DE TRANSIÇÃO DAS LINHAS 3, 4 E 5 DA TABELA PERIÓDICA: $3d^m$, $4d^m$, $5d^m$
- OS ORBITAIS d E f, SÃO MAIS COMPACTOS QUE OS ORBITAIS s E p:
 - O MODELO DE ELÉTRONS LIVRES NÃO É BOM, É MELHOR UMA DESCRIÇÃO "TIGHT-BINDING".
 - OS EFEITOS DA INTERAÇÃO COULOMBIANA ENTRE OS ELÉTRONS QUANDO OCUPAM OS ORBITAIS d E f SÃO MAIORES.

i) TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE DE MOTT-HUBBARD.

ii) OS SUPERCONDUTORES DE ALTA T_c (CUPRATOS).

Física de um corpo: estrutura de bandas

$$H_0 = \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \psi_{\sigma}(\vec{r}) + \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) V(\vec{r}) \psi_{\sigma}(\vec{r})$$

ELETRONS NÃO INTERAGENTES NA PRESENÇA DE UM POTENCIAL CRISTALINO: $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$

\vec{R} É REDE DE BRAVAIS.

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi_{\vec{k}}^{(m)}(\vec{r}) = \epsilon_{\vec{k}}^{(m)} \psi_{\vec{k}}^{(m)}(\vec{r})$$

SOLUÇÃO DA EQ. DE SCH. IND. TEMPO

TEOREMA DE BLOCH: $\psi_{\vec{k}}^{(m)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}^{(m)}(\vec{r})$

$$u_{\vec{k}}^{(m)}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}^{(m)}(\vec{r})$$

m : ROTULA A BANDA ($m = 1, 2, 3, \dots$)

\vec{k} : MOMENTO CRISTALINO

$\vec{k} \in 1^{\text{a}}$ ZONA DE BRIOULLIN

ZONA DE BRIOULLIN É UMA CÉLULA UNITÁRIA DA REDE RECÍPROCA:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1 \quad \forall \vec{R} \text{ DA REDE DE BRAVAIS}$$

$\{\vec{k}\} \rightarrow$ REDE RECÍPROCA

CÚBICA: $k_i \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right] \quad i = x, y, z$
COM LADO a

$$\int d^3r \psi_{\vec{k}}^{(n)*}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}'}^{(n')}(\vec{r}) = \delta_{n,n'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$$

E FORMAM UM CONJUNTO COMPLETO.

PORTANDO, PODEMOS MUDAR DA BASE DE POSIÇÃO $\{\vec{r}\}$ PARA A BASE DAS FUNÇÕES DE BLOCH $\{\psi_{\vec{k}}^{(n)}(\vec{r})\}$

$$\psi_0^\dagger(\vec{\lambda}) = \sum_{n, \vec{k}} \psi_{\vec{k}}^{(n)*}(\vec{\lambda}) C_{\vec{k}, \sigma}^{(n)\dagger}$$

COM ISSO:

$$H_0 = \sum_{n, \vec{k} \in Bz} \epsilon_{\vec{k}}^{(n)} \underbrace{C_{\vec{k}, \sigma}^{(n)\dagger} C_{\vec{k}, \sigma}^{(n)}}_{\hat{n}_{\vec{k}, \sigma}^{(n)}}$$

FUNÇÕES DE WANNIER SÃO A TRANSFORMADA DE FOURIER DISCRETA DAS FUNÇÕES DE BLOCH:

$$\phi_i^{(n)}(\vec{\lambda}) = \frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_{\vec{k} \in Bz} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{\lambda} - \vec{R}_i)} \psi_{\vec{k}}^{(n)}(\vec{\lambda}) = \phi(\vec{\lambda} - \vec{R}_i)$$

N_S : NÚMERO DE CÉLULAS UNITÁRIAS.

ELAS SÃO LOCALIZADAS NOS SÍTIOS \vec{R}_i DA REDE MAS TÍPICAMENTE TÊM CAUDAS OSCILANTES.

TRANSFORMAÇÃO DE BASE: $\{\psi_{\vec{k}}^{(m)}(\vec{r})\} \rightarrow \{\phi_i^{(m)}(\vec{r})\}$

$$H_0 = \sum_{\vec{r}, i, j} t_{ij}^{(m)} (c_{i\vec{r}}^{(m)\dagger} c_{j\vec{r}}^{(m)} + h.c.)$$

$t_{ij}^{(m)} \neq 0$ PARA VÁRIOS PARES DE SÍTIOS i, j

APROXIMAÇÕES:

(i) RETER APENAS UMA BANDA: ~~NO~~

(ii) RETER APENAS PRIMEIROS VIZINHOS:

$t_{ij} = 0$ SE i, j NÃO SÃO PRIMEIROS VIZINHOS

PARA SIMPLIFICAR VAMOS FORAR NUMA REDE HIPER-CÚBICA EM D DIMENSÕES.

$$H_0 = \epsilon_0 \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - t \sum_{\langle ij \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.)$$

VOLTAR PARA BASE $\vec{k} \in BZ$:

$$c_{i\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_{\vec{k} \in BZ} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger$$

$$H_0 = \epsilon_0 \sum_{i,\sigma} \left(\frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_{\vec{p}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{R}_i} c_{\vec{p},\sigma} \right) +$$

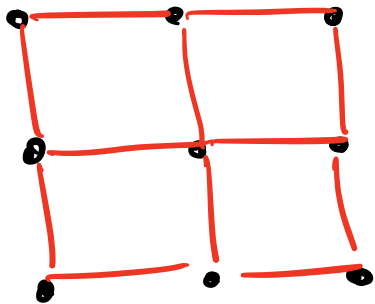
$$-t \sum_{\langle ij \rangle} \left(\frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_{\vec{p}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{R}_j} c_{\vec{p},\sigma} \right) + h.c.$$

$$\sum_i e^{i(\vec{p} - \vec{k}) \cdot \vec{R}_i} = \delta_{\vec{p}, \vec{k}} N_S$$

$$\Rightarrow \epsilon_0 \sum_{\vec{k}, \sigma} \delta_{\vec{p}, \vec{k}} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{p},\sigma} = \epsilon_0 \sum_{\vec{k}, \sigma} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma}$$

$$\sum_{\langle ij \rangle} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} e^{i\vec{p} \cdot \vec{R}_j} = \Delta$$

↳ SOMA SOBRE TODAS AS LIGAÇÕES DA REDE ENTRE PRIMEIROS VIZINHOS



CADA LIGAÇÃO É COBERTA SE TOMARMOS:

• TODOS OS SÍTIOS DA REDE E SEUS VIZINHOS DESLOCADOS DE

$$\vec{\delta} = a\vec{x} \text{ E } a\vec{y}$$

$$\sum_{\langle ij \rangle} = \sum_i \sum_{\vec{\delta}} \quad \vec{\delta} = \vec{R}_i + \vec{\delta}$$

$$\Delta = \sum_i \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} e^{i\vec{p} \cdot (\vec{R}_i + \vec{\delta})} = \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{\delta}} \sum_i e^{i(\vec{p} - \vec{k}) \cdot \vec{R}_i}$$

$$= N_S \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{q}} \delta_{\vec{p}, \vec{k}} = N_S \delta_{\vec{p}, \vec{k}} (e^{ik_1 a} + e^{ik_2 a} + \dots + e^{ik_D a})$$

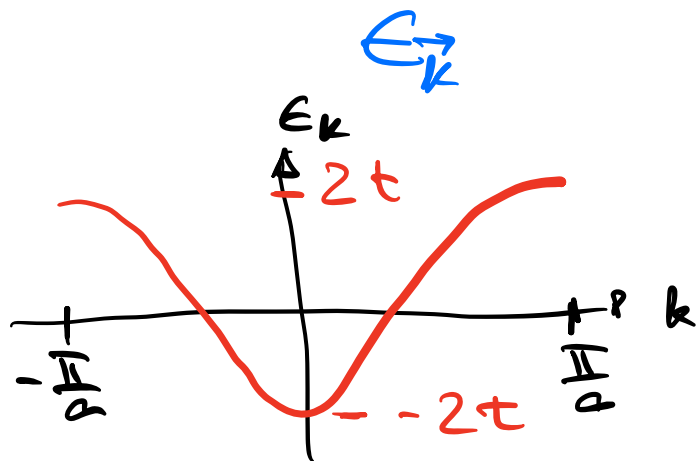
$$\Rightarrow -t \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \sum_{\sigma} C_{\vec{p}, \sigma}^{\dagger} C_{\vec{p}', \sigma} \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} \left(\sum_{i=1}^D e^{i\vec{k}_i a} \right) + h.c.$$

$$= -t \sum_{\vec{k}, \sigma} C_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}, \sigma} \left(\sum_{i=1}^D e^{i\vec{k}_i a} \right) + h.c.$$

$$= -t \sum_{\vec{k}, \sigma} \sum_{i=1}^D \underbrace{\left(e^{i\vec{k}_i a} + e^{-i\vec{k}_i a} \right)}_{2 \cos(k_i a)} C_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}, \sigma}$$

$$= \sum_{\vec{k}, \sigma} \left[-2t (\cos k_1 a + \cos k_2 a + \dots + \cos k_D a) \right] C_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}, \sigma}$$

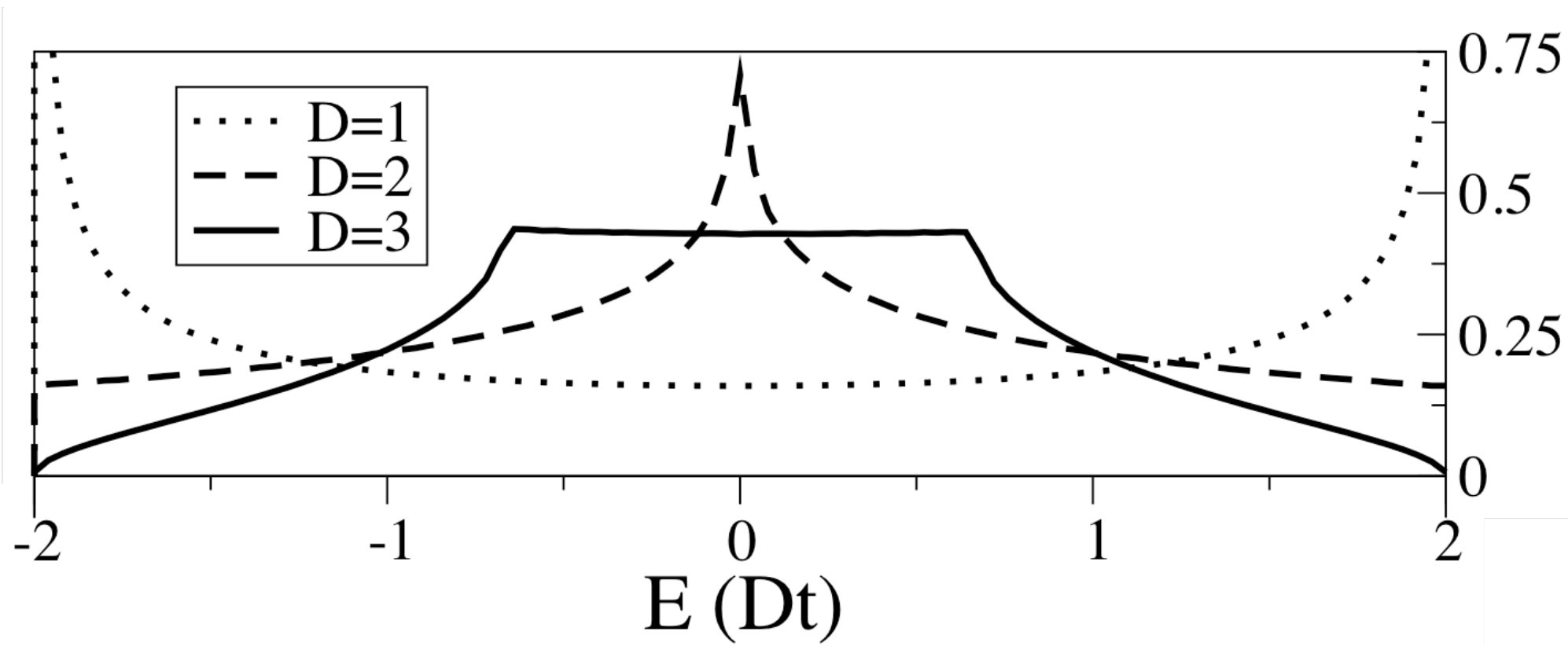
Eq (D):



$$E_k = -2t \cos k_x$$

LARGURA DE BANDA
 $E' \quad \underline{4t} = W$

Densidade de estados de redes hiper-cúbicas com hopping de primeiros vizinhos em dimensão D



$$g(E) = \sum_{\vec{k}} \delta(E - \epsilon_{\vec{k}})$$

Interações

INTERAÇÃO COULOMBIANA NA BASE DE SÍTIOS:

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{\substack{ijlm \\ \sigma\sigma'}} \langle ij | U(\vec{r} - \vec{r}') | lm \rangle C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma'}^\dagger C_{m\sigma} C_{l\sigma}$$

$$\langle ij | U(\vec{r} - \vec{r}') | lm \rangle = \int d\vec{r} d\vec{r}' \phi^*(\vec{r} - \vec{r}_i) \phi^*(\vec{r}' - \vec{r}_j) U(\vec{r} - \vec{r}') \phi(\vec{r} - \vec{r}_l) \phi(\vec{r}' - \vec{r}_m)$$

O CARÁTER DE LONGO ALCANCE DO POTENCIAL COULOMBIANO É ATENUADO PELA BLINDAGEM DOS ELÉTRONS NUM METAL.

O MAIOR TERMO DE INTERAÇÃO É O COMPLETAMENTE LOCAL:

$$\langle ii | U(\vec{r} - \vec{r}') | ii \rangle = \int_{\equiv U} d\vec{r} d\vec{r}' |\phi(\vec{r} - \vec{r}_i)|^2 |\phi(\vec{r}' - \vec{r}_i)|^2 U(\vec{r} - \vec{r}')$$

HUBBARD RETEVE APENAS ESSE TERMO LOCAL:

$$H_1 = \frac{U}{2} \sum_{i, \sigma, \sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} c_{i\sigma}$$

$$= \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} \left[c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}^\dagger \underbrace{c_{i\sigma} c_{i\sigma}}_0 + c_{i\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{i\sigma} \right]$$

$0 \leftarrow \{c_{i\sigma}, c_{i\sigma}\} = 0$

$$= \frac{U}{2} \sum_i \left[c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\uparrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \right]$$

$$= U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\uparrow} = U \sum_i (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow}) (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow})$$

$$H_2 = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

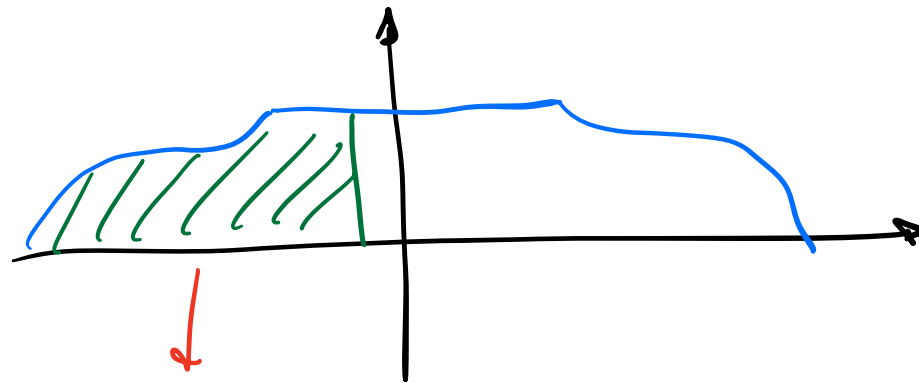
INTERAÇÃO COULOMBIANA QUANDO 2 ELÉTRONS DE SPINS OPOSTOS OCUPAM O MESMO ORBITAL,

MODELO DE HUBBARD

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} E_{\vec{k}} C_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

SE $U=0$ (NÃO-INTERAGENTE)

BANDA PARCIALMENTE PREENCHIDA:



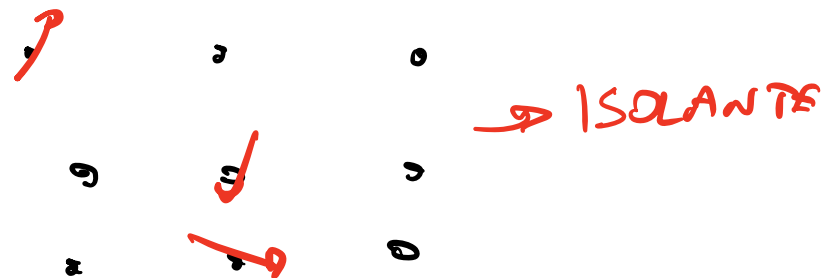
METAL

SE $t=0$ (LIMITE ATÔMICO):

PARA CADA SÍTIO:

$$0, \uparrow, \downarrow \Rightarrow E=0$$

$$\uparrow\downarrow \Rightarrow E=U$$



EM PARTICULAR, NO SEMI-PREENCHIMENTO:

↓ ↑ ↓

↓ ↑ ↓

↓ ↑ ↓

ISOLANTE NO
LIMITE ATÔMICO

$U \ll t$: METAL

$U \gg t$: ISOLANTE

$U = U_c = f(t) \Rightarrow$ TRANSIÇÃO METAL-
ISOLANTE!

TRANSIÇÃO MOTT-HUBBARD

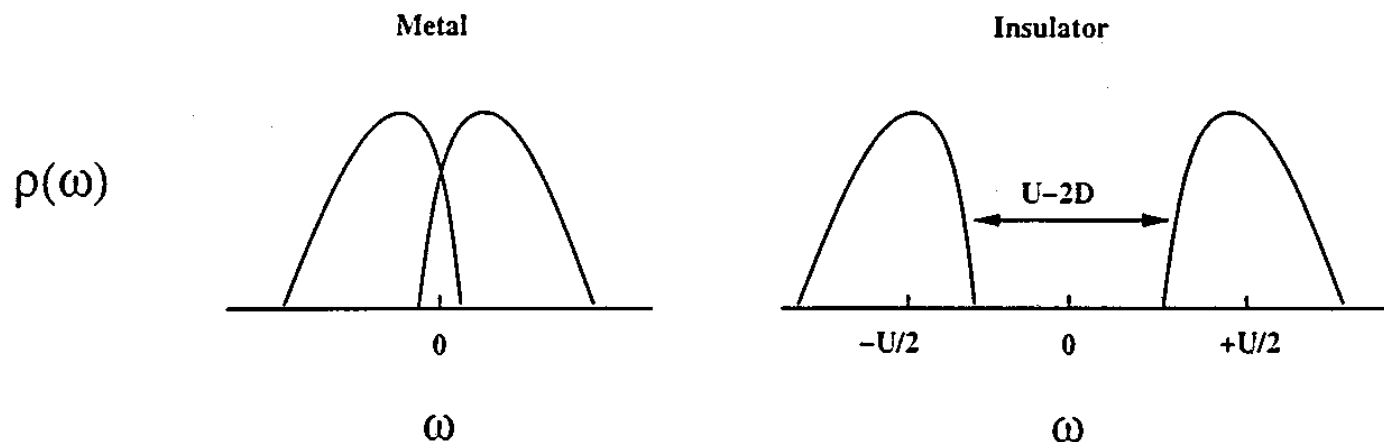
ESSE MODELO SÓ TEM SOLUÇÃO EXATA
(ANSATZ DE BETHE) EM 1D. (LIEB + WU, 1969)

EM 1D: $U_c = 0$

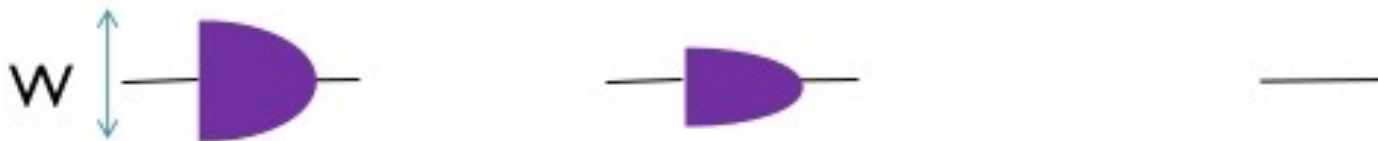
EM $D > 1$, ACREDITA-SE QUE, EXCETO POR
ALGUMAS SITUAÇÕES ESPECIAIS QUE NÃO SÃO
GENÉRICAS, $U_c \neq 0$

Primeiras descrições teóricas

- A descrição de Hubbard III: do isolante para o metal; duas bandas (de Hubbard) separadas que se tocam na transição ([J. Hubbard, Proc. R. Soc. \(London\) A 281, 401 \(1964\)](#))



- A descrição de Brinkman e Rice: do metal para o isolante; desaparecimento das quasi-partículas, $m^* \rightarrow \infty$; não há bandas de Hubbard ([W. F. Brinkman and T. M. Rice, Phys. Rev. B 2, 4302 \(1970\)](#))

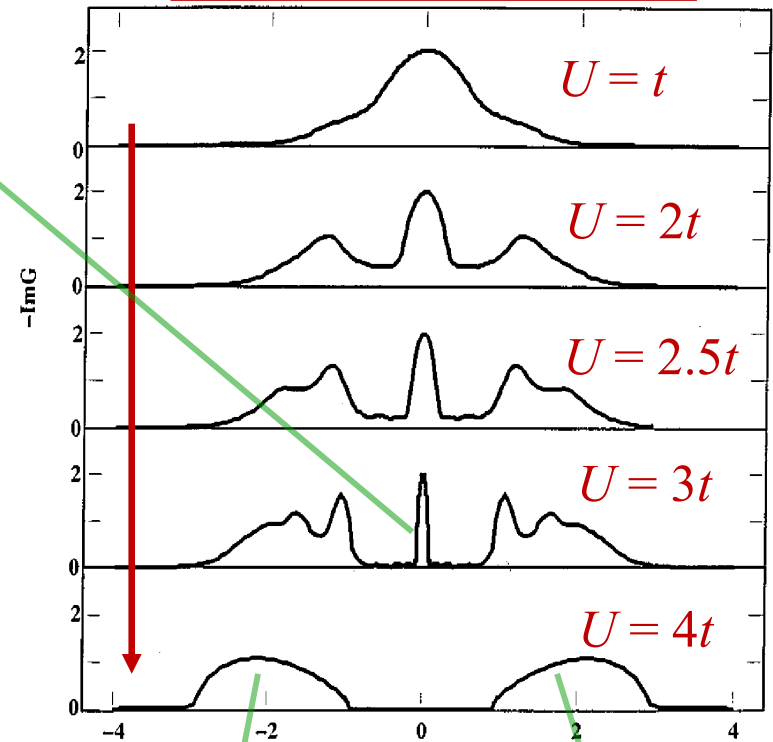


Teoria dinâmica de campo médio (Dynamical mean field theory)

Pico de quasi-partículas (Brinkman-Rice)

Unificação de Brinkman-Rice + Hubbard III

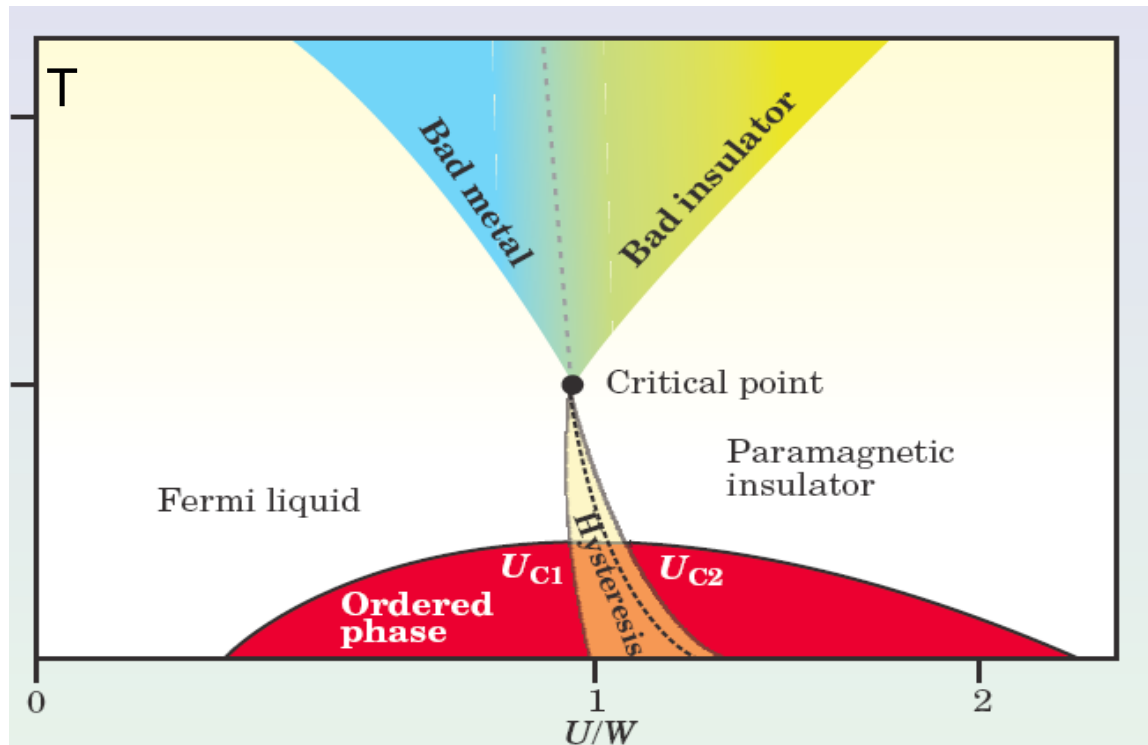
Density of states



X.Y.Zhang, M. Rozenberg G. Kotliar (PRL 1993)

Bandas de Hubbard (Hubbard III)

Diagrama de fases (DMFT)



Kotliar, Vollhardt, Phys. Today (2004)