

Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin

# Efeitos de desordem na transição metal-isolante de Mott

Dissertação de Mestrado

Aluna: Martha Yolima Suárez Villagrán

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Miranda

Este exemplar corresponde à versão final da dissertação de Mestrado defendida pela aluna Martha Yolima Suárez Villagrán e aprovada pela comissão julgadora.

  
Eduardo Miranda

Campinas setembro de 2009

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

Su12c isolante  Campinas,  Estadual de	Suárez Villagrán, Martha Yolima Efeitos de desordem na transição metal- de Mott / Martha Yolima Suárez Villagrán. – SP : [s.n.], 2009.  Orientador: Eduardo Miranda. Dissertação (mestrado) - Universidade Campinas, Instituto de Física “Gleb Wataghin”.
1 2 3 4 5	1. Transição de fase metal-isolante. 2. Hubbard, Modelo de. 3. Sistemas desordenados. I. Miranda, Eduardo. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física “Gleb Wataghin”. III. Título.
	6

- **Título em inglês:** Effects of disorder on the Mott metal-insulator transition.
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
  1. Metal-insulator transition
  2. Hubbard model
  3. Disordered systems
- **Área de concentração:** Física da Matéria Condensada
- **Titulação:** Mestre em Física
- **Banca examinadora:**  
Prof. Eduardo Miranda  
Prof. Valter Luiz Líbero  
Prof. Maurice de Koning
- **Data da defesa:** 12.08.2009
- **Programa de Pós-Graduação em:** Física



---

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE  
**MARTHA YOLIMA SUAREZ VILLAGRAN – RA 069829** APRESENTADA E  
APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE  
ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 12 / 08 / 2009.

**COMISSÃO JULGADORA:**

*Eduardo Miranda*

---

Prof. Dr. Eduardo Miranda - Orientador da Candidata  
DFMC/IFGW/UNICAMP

*M. L. Libero*

---

Prof. Dr. Valter Luiz Libero – IFSC/USP

*Maurice de Koning*

---

Prof. Dr. Maurice de Koning - DFMC/IFGW/UNICAMP



*AO HOMEM MAIS  
MARAVILHOSO QUE CONHEÇI,  
MEU PAI.*



# Agradecimentos

- Agradeço a meu orientador Eduardo Miranda pela disposição e incentivo na pesquisa. Por contribuir na minha formação com seu conhecimento e experiência.
- A minha mãe Dora, pelo esforço para me tornar uma melhor pessoa, pelo amor e confiança. A meus irmãos Dora, Campo, Beto e Patty pelas constantes demonstrações de afeto e ser o motivo para seguir em frente.
- Ao professor Marcelo Rozenberg pelo acompanhamento em parte do trabalho. Pelas sugestões e o fornecimento do código numérico de Monte Carlo Quântico.
- A Eric e Daniel pela disposição e contribuições no trabalho.
- A Jesús pelo conhecimento em física, apoio incondicional e tempo compartilhado.
- Aos professores Maurice de Koning, Foglio e Valter Líbero pelas perguntas e sugestões do trabalho.
- Aos meus amigos, colegas, professores e funcionários do IFGW.
- A CAPES pelo suporte financeiro.
- Ao povo Brasileiro pela generosidade e carinho.





# Resumo

Determinamos o diagrama de fases do modelo de Hubbard desordenado como função da temperatura e interação por meio da Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio. As linhas espinoidais para o metal e isolante foram traçadas para desordem fraca e moderada, usando Monte Carlo Quântico para resolver o problema de uma impureza. Encontramos que a desordem desloca as linhas espinoidais para valores maiores de interação e temperaturas menores. Nosso estudo mostra que a região de coexistência do isolante e do metal sobrevive à introdução de desordem e preserva a transição de Mott, pelo menos para valores suficientemente pequenos de desordem.



# Abstract

We determine the phase diagram of the disordered Hubbard Model as a function of temperature and interaction strength by means of the Statistical Dynamical Mean Field Theory. The metallic and insulating spinodal lines are traced for weak and moderate disorder using Quantum Monte Carlo as the impurity solver. We find that disorder pushes the spinodal lines to larger interactions and smaller temperatures. Our studies show that the coexistence region of insulator and metal survives the introduction of disorder and is a robust feature of the Mott transition, at least for sufficiently small disorder strength.



# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Transição de Mott</b>	<b>5</b>
2.1	Evidência experimental . . . . .	6
2.2	Diagrama de fases para o $V_2O_3$ . . . . .	8
2.3	Diagrama de fases para $NiS_{2-x}Se_x$ . . . . .	10
2.4	Descrições teóricas da transição de Mott . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Teoria Dinâmica de Campo Médio</b>	<b>15</b>
3.1	Teoria de Campo Médio de Weiss . . . . .	15
3.2	Obtenção das equações da TDCM . . . . .	18
3.2.1	Análise da ação efetiva . . . . .	22
3.3	Mapeamento no modelo de Anderson . . . . .	26
3.4	Algoritmo . . . . .	28
3.4.1	Solução do problema de uma impureza . . . . .	28
3.4.2	Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio . . . . .	32
3.4.3	Algoritmo na TEDCM . . . . .	35
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>37</b>

4.1	Transição de Mott . . . . .	42
4.1.1	Construção da curva de histerese . . . . .	45
4.2	Caso desordenado . . . . .	50
4.2.1	Sistema em $T=0.02363D$ . . . . .	50
4.2.2	Sistema em $T=0.01298D$ . . . . .	62
4.2.3	Comparando as duas temperaturas . . . . .	64
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>69</b>
<b>A</b>	<b>Algoritmo de Hirsch-Fye</b>	<b>73</b>

# Lista de Figuras

2.1	Condutividade para uma amostra cristalina de $V_2O_3$ [14]. . . . .	7
2.2	Diagrama de fases para a transição metal-isolante em $V_2O_3$ como função da dopagem com Cr ou Ti e como função da pressão. A transição metal-isolante, que é de primeira ordem, termina num ponto crítico de segunda ordem [6]. . . . .	8
2.3	(a) Condutividade em função da temperatura e da pressão, para $V_2O_3$ . (b) Diagrama de fases para o $V_2O_3$ . [7]. . . . .	9
2.4	a) Estrutura pirita do $NiS_{2-x}Se_x$ . b) Diagrama de fases para o composto $NiS_{2-x}Se_x$ . . . . .	10
2.5	a) Transição de Mott segundo Hubbard. b) Transição de Mott segundo Brinkman e Rice. . . . .	11
2.6	Transição de Mott usando a Teoria Dinâmica Campo Médio (TDCM) [21]. . . . .	13
2.7	Diagrama de fases. As linhas pontilhadas delimitam a região onde as soluções metálica e isolante coexistem, a linha cheia indica a transição de primeira ordem entre metal e isolante e o quadrado indica o fim da linha de primeira ordem em um ponto de segunda ordem.[22] . . . . .	14

3.1	(a) Rede de spins do modelo de Heisenberg. (b) Campo sentido pelo sítio a analisar. . . . .	16
3.2	Mapeamento do problema da rede em um problema de uma única impureza embebida num banho de elétrons de condução [22]. . . . .	19
3.3	A TDCM permite mapear o problema da rede no problema de uma única impureza embebida num banho de elétrons de condução determinado auto-consistentemente, de maneira que localmente os estados que caracterizam o sítio zero são $ 0\rangle$ , $ \uparrow\rangle$ , $ \downarrow\rangle$ ou $ \uparrow\downarrow\rangle$ e guardam informação da dinâmica temporal [24]. . . . .	20
3.4	A ação efetiva está constituída por três termos $S = S_0 + S_{lat}^0 + \Delta S$ . . .	21
3.5	Trajectoria para a função de Green de um corpo. . . . .	23
3.6	Caminhos escolhidos para fazer o cálculo da função de Green no caso $n = 2$ . . . . .	24
3.7	No caso da TEDCM as energias $\epsilon_j$ , $\Sigma_j$ são diferentes em cada um dos sítios da rede. . . . .	32
4.1	Densidade de estados para o caso em que há “ <i>hopping</i> ” imaginário . . .	38
4.2	(a)Parte imaginária da função de Green característica de um sistema metálico. Neste caso $ImG(0) \neq 0$ (b) Parte imaginária da autoenergia, nesta caso $Im\Sigma(0) = 0$ . Os dois casos foram feitos para uma temperatura $T = 0.01298D$ com $U = 2.213D$ . . . . .	40
4.3	Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações para $T = 0.01298D$ , $U = 2.213D$ , no caso metálico. . . . .	40



4.4	Comportamento isolante: (a) Parte imaginária da função de Green em função da frequência. (b) Autoenergia em função da frequência para $T = 0.01298D$ e $U = 2.313D$ . . . . .	41
4.5	Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara onde $T = 0.01298D$ , $U = 2.313D$ , para o caso isolante. . . . .	41
4.6	a) Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações, para $U = 2.2296D$ e $T = 0.02363D$ . A linha azul descreve o caso no qual o sistema é preparado inicialmente como isolante, e a linha vermelha corresponde ao caso no qual temos o sistema preparado como metal. Dessa maneira para qualquer valor de $U$ dentro da região de coexistência devem ser encontradas as duas soluções bem convergidas. b) Para um valor de $U$ dentro da região de coexistência é encontrada a parte imaginária da função de Green em função da frequência apresentando comportamento como metal (curva vermelha) e como isolante (curva azul). . . . .	43
4.7	Para $U = 2.2878D$ com $T = 0.02363D$ , fora da região de coexistência, independentemente de se o sistema inicialmente foi preparado como isolante ou como metal a solução obtida corresponde à solução isolante. . . . .	44
4.8	Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações para $T = 0.01298D$ . O sistema foi inicialmente preparado como metal. A transição de Mott ocorre em $U_{c2} = (2.317 \pm 0.003)D$ . . . . .	46
4.9	Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara, quando $T = 0.01298D$ . O sistema inicialmente é preparado como isolante e a transição de Mott ocorre em $U_{c1} = (2.250 \pm 0.003)D$ . . . . .	46

4.10	Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função de número de loops para $T=0.02363D$ , quando o sistema é inicialmente preparado como metal. É encontrado $U_{c2} = (2.267 \pm 0.003)D$ . . . . .	47
4.11	Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função de número de loops para $T=0.02363D$ , quando o sistema inicialmente foi preparado como isolante, sendo $U_{c1} = (2.225 \pm 0.003)D$ . . . . .	47
4.12	Curva de histerese para $T = 0.01298D$ (curva vermelha), onde $U_{c1} = (2.250 \pm 0.003)D$ e $U_{c2} = (2.317 \pm 0.003)D$ . Se $T = 0.02363D$ , que corresponde à curva azul, temos $U_{c1} = (2.225 \pm 0.003)D$ , $U_{c2} = (2.267 \pm 0.003)D$ . . . . .	48
4.13	Diagrama de fases $T \times U$ . Neste caso são mostrados os valores de $U_{c1}$ e $U_{c2}$ , para as duas temperaturas estudadas. . . . .	49
4.14	Diagrama de fases calculado por Oudovenko et al. [27], os resultados representados por círculos foram obtidos usando Monte Carlo Quântico para resolver as equações da TDCM. . . . .	49
4.15	Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara, para todos os sítios da rede de $10 \times 10$ . O comportamento da média geométrica da parte imaginária da função de Green é apresentada no gráfico inserido. O sistema está evoluindo de isolante a metal. Isto está relacionado com a diminuição do valor de $U$ . Estima-se que $U_{c1} = 2.267 \pm 0.004D$ . . . . .	51
4.16	Evolução do sistema de isolante a metal. A cor azul reflete o comportamento isolante e a cor vermelha representa o comportamento metálico. . . . .	53

4.17	Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara, para todos os sítios da rede $10 \times 10$ , em função do número de iterações perto da região de coexistência. No gráfico inserido é observado o comportamento da média geométrica da parte imaginária da função de Green como função da frequência. Estima-se que $U_{c2} = 2.284 \pm 0.004D$	55
4.18	Evolução do sistema de metal a isolante. A cor azul reflete o comportamento isolante e a cor vermelha o comportamento metálico. . . . .	56
4.19	Dentro da região de coexistência, são encontradas as soluções metálica e isolante bem convergidas. a) Média geométrica da função de Green como função da frequência. A curva vermelha representa a solução metálica e a azul, o isolante. b) Para cada sítio foi calculada $ImG(\omega_1)$ , para o mesmo valor de $U$ . . . . .	57
4.20	Parte central: as soluções metálica e isolante são apresentadas na mesma escala. A cor azul corresponde ao caso isolante, enquanto a cor vermelha representa o caso metálico. Nos detalhes dentro dos círculos, as soluções metálica e isolante estão numa escala que enfatiza as flutuações espaciais.	58
4.21	(a) Média geométrica da parte imaginária da função de Green em função da frequência e (b) parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações, fora da região de coexistência, no caso isolante. . . . .	59
4.22	Gráfico de $ImG(\omega_1)$ para cada sítio da rede, para os casos nos quais vamos de isolante a metal e de metal a isolante. . . . .	60

4.23	(a) Média geométrica da parte imaginária da função de Green em função da frequência e (b) parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações. Pode-se observar que independentemente de como for preparado o sistema inicialmente este converge para os mesmos valores sítio a sítio. . . . .	60
4.24	Gráfico de $ImG(\omega_1)$ para cada sítio da rede, para os casos nos quais vamos de isolante a metal e de metal a isolante. Aqui foi encontrada uma solução metálica que coincide sítio a sítio nos dois casos. . . . .	61
4.25	Curvas de histerese comparando o caso limpo e desordenado . . . . .	62
4.26	Dentro da região de coexistência, são encontradas as soluções metálica e isolante bem convergidas. a) Média geométrica da função de Green como função da frequência. A curva vermelha representa a solução metálica e a azul, o isolante. b) Para cada sítio foi calculada $ImG(\omega_1)$ , para o mesmo valor de $U$ . . . . .	63
4.27	Parte central: as soluções metálica e isolante são apresentadas na mesma escala. A cor azul corresponde ao caso isolante, enquanto a cor vermelha representa o caso metálico. Nos detalhes dentro dos círculos, as soluções metálica e isolante estão numa escala que enfatiza as flutuações espaciais. . . . .	64
4.28	Curvas de histerese comparando o caso limpo e desordenado. . . . .	65
4.29	Curvas de histerese para as duas temperaturas $T = 0.01298D$ e $T = 0.02363D$ , com $W = 0.52D$ . . . . .	66
4.30	Diagrama de fases $T \times U$ para o sistema com e sem desordem. . . . .	67
4.31	Diagrama de fases obtido para diferentes valores de desordem, através da TDCM [28]. . . . .	67

# Capítulo 1

## Introdução

O primeiro modelo com grande sucesso na descrição de elétrons de condução em metais foi devido a Paul Drude em 1900 [1]. Esta teoria semiclássica assume que os elétrons podem movimentar-se livremente pelo cristal sem sentir os efeitos de outros elétrons, mas podem ser espalhados pelos íons do cristal, com o intervalo de tempo médio entre espalhamentos constante, chamado tempo de relaxação. Deste modelo simples é possível produzir correntes constantes devido a campos elétricos aplicados [1]. Esta teoria foi modificada por Arnold Sommerfeld, em 1927, incluindo efeitos quânticos da distribuição de Fermi-Dirac e o princípio de exclusão de Pauli. As bases teóricas para entender o por quê deste modelo descrever o comportamento de vários materiais foi estabelecida por Lev Landau com a chamada Teoria do Líquido de Fermi [2]. Esta teoria mapeia excitações elementares de sistemas eletrônicos interagentes em excitações de sistemas não interagentes, descrevendo interações fracas residuais com um conjunto pequeno de parâmetros fenomenológicos. O resultado básico da teoria do líquido de Fermi é que elétrons com energias baixas se comportam quase como elétrons não interagentes com tempo de relaxação infinito no nível de Fermi quando  $T = 0$ .

Nos sistemas eletrônicos fortemente correlacionados não podemos negligenciar os efeitos de interação entre os elétrons. Estes efeitos levam a interessantes fenômenos como a transição metal-isolante, que tem atraído um interesse considerável nos últimos anos. Grandes progressos foram realizados no entendimento do comportamento perto da transição induzida pela interação elétron-elétron. A descrição teórica inicia com o trabalho de Mott [3], a contribuição de Hubbard [4], a descrição de Brinkman e Rice e culmina com a Teoria Dinâmica de Campo Médio (TDCM), a qual unifica de maneira consistente os pontos de vista de Hubbard e Brinkman e Rice [5]. Desde então a TDCM tornou-se o esquema mais aceito de descrição teórica da transição de Mott.

Ela permite entender o comportamento de alguns compostos, tais como os óxidos dos metais de transição. Um dos primeiros compostos no qual foi observada a transição de Mott é o  $V_2O_3$  dopado com cromo ou titânio [6, 7]. A transição pode ser induzida pela variação da pressão, potencial químico e a temperatura. Recentemente uma transição metal-isolante de primeira ordem foi observada em alguns compostos orgânicos  $\kappa$ -BEDT [8], nos quais a transição de Mott ocorre pela variação da pressão. A TDCM permite estudar sistemas de elétrons fortemente correlacionados e, no que diz respeito à transição metal-isolante de Mott, permite fazer uma descrição satisfatória em modelos simplificados como o modelo de Hubbard.

Existe entretanto uma generalização desta teoria que permite estudar melhor os efeitos de desordem nesses sistemas. Ela recebe o nome de Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio (TEDCM). Nesta teoria assume-se que cada sítio da rede tem um valor de energia diferente dado por uma distribuição de probabilidades, que geralmente é considerada uniforme ou gaussiana.

Medições experimentais feitas em  $NiS_{2-x}Se_x$  e compostos orgânicos demonstram que a presença de desordem faz com que a temperatura do ponto crítico diminua. Em

particular, experimentos feitos em  $NiS_2$  mostram que o ponto crítico no qual ocorre a transição de Mott está em  $150K$ , com uma pressão externa aplicada de 3 GPa. Por outro lado, quando são feitas substituições de  $S$  por  $Se$  obtendo-se  $NiS_{2-x}Se_x$  pode-se ver que o ponto crítico está perto de  $100K$  [9, 10].

O objetivo principal desta dissertação é estudar a influência da desordem na transição de Mott. No primeiro capítulo é feita uma introdução da transição de Mott. A primeira parte é dedicada aos resultados experimentais que evidenciam a transição metal-isolante na região paramagnética. Em particular, são apresentadas as curvas de histerese dos compostos  $V_2O_3$  e  $NiSSe$ . Na segunda parte, são mostradas as idéias de Hubbard e Brinkman e Rice sobre a transição de Mott e a importância da Teoria Dinâmica de Campo Médio para unificar os pontos de vistas de Hubbard e Brinkman e Rice.

No capítulo 3 é introduzida a Teoria Dinâmica de Campo Médio (TDCM), que permite mapear o problema da rede no problema de uma única impureza embebida em um banho de elétrons de condução determinado de maneira auto-consistente. São apresentadas as equações fundamentais, o algoritmo numérico e as modificações para o caso no qual é incluída desordem no sistema, o que constitui a Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio (TEDCM). Para resolver os problemas de uma impureza foi empregado o método de Monte Carlo Quântico (algoritmo de Hirsch e Fye).

No capítulo 4 estão os resultados obtidos para o caso no qual temos férmions numa rede quadrada de dimensões  $10 \times 10$ . O Hamiltoniano descrevendo o sistema é o Hamiltoniano de Hubbard desordenado. Foram identificados os valores de  $U$  para os quais o sistema passa de metal para isolante e vice-versa através da construção da curva de histerese. Observou-se que a desordem aumenta os valores de  $U$  nos quais ocorre a transição de Mott. Nesta dissertação foram analisadas duas temperaturas e um valor de desordem.





## Capítulo 2

# Transição de Mott

A transição de Mott é uma transição metal-isolante, que é causada pelas interações elétron-elétron [11]. Isto ocorre quando a razão entre a interação dos elétrons e a largura de banda é aumentada. Experimentalmente, este fenômeno é observado em compostos tais como  $V_2O_3$  [12],  $Ni(Se, S)_2$  [13] e a família dos condutores orgânicos  $\kappa$ -BEDT [8]. O modelo de Hubbard é o modelo mais simples que pode capturar a física essencial da transição. Em anos recentes, progressos teóricos têm permitido entender melhor a transição de Mott pela aplicação da Teoria Dinâmica de Campo Médio (DMFT) ao modelo de Hubbard. Neste capítulo, são apresentadas algumas evidências experimentais da transição de Mott em alguns compostos, assim como os pontos de vista teóricos de Hubbard e Brinkman e Rice a respeito da transição de Mott.

## 2.1 Evidência experimental

Metais são frequentemente descritos na aproximação “*tight-binding*”. Esta descrição está baseada na aproximação de partículas independentes, na qual os elétrons são tratados como partículas não interagentes movendo-se no potencial periódico dos íons da rede. Desta maneira, as interações elétron-elétron são parcialmente blindadas e os elétrons podem ser descritos como ondas. Neste caso, metais são descritos como sistemas com bandas de valência parcialmente preenchidas e um isolante corresponde a uma banda de valência completamente preenchida.

Entretanto, há alguns materiais para os quais a aproximação de partícula independente não se aplica. Estes sistemas mostram uma banda de valência estreita, devido à pequena superposição das funções de onda dos orbitais d e f. Nesta situação os elétrons ficam mais tempo perto de um dado íon da rede, sentindo uma forte interação de Coulomb. No caso extremo, a interação pode ser tão forte que tende a localizar os elétrons.

O aumento da interação Coulombiana em relação à energia cinética pode transformar um sistema metálico com banda de valência semi-preenchida em um isolante. Esta é a transição metal-isolante de Mott.

A transição de metal para isolante é causada pelo aumento da interação entre os elétrons no sistema. Esta ocorre quando parâmetros físicos externos tais como pressão, densidade, composição, desordem, temperatura e campo magnético variam. A transição pode ser descontínua, quando há um salto na condutividade, ou contínua, quando esta quantidade não muda subitamente através da transição. O fenômeno e a teoria foram revisados por Mott em (1974) [11].

Sistemas clássicos nos quais é observada a transição metal-isolante são  $V_2O_3$ ,  $VO_2$ ,  $NiS$ , ... [15]. Um dos primeiros compostos a apresentar a transição de Mott foi o  $V_2O_3$ .

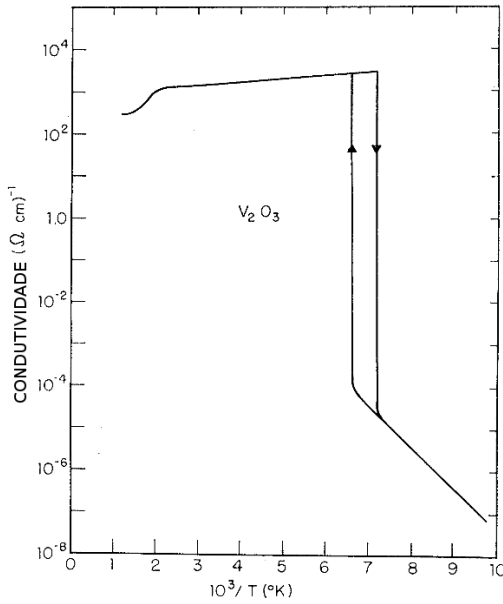


Figura 2.1: Condutividade para uma amostra cristalina de  $V_2O_3$  [14].

A figura 2.1 mostra a condutividade do  $V_2O_3$  em função do inverso da temperatura. A condutividade aumenta exponencialmente para valores pequenos de temperatura. Perto de  $150K$  ela sofre um salto de um fator de  $10^7$ , associado a uma transição de primeira ordem. Uma curva de histerese é observada [15].

Os diagramas de fases do  $V_2O_3$  e do  $NiS_{2-x}Se_x$  são apresentados nas seções seguintes. Recentemente, uma transição de Mott de primeira ordem foi observada nos compostos orgânicos  $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu[N(CN)_2]Cl$ , como função da pressão hidrostática [16].

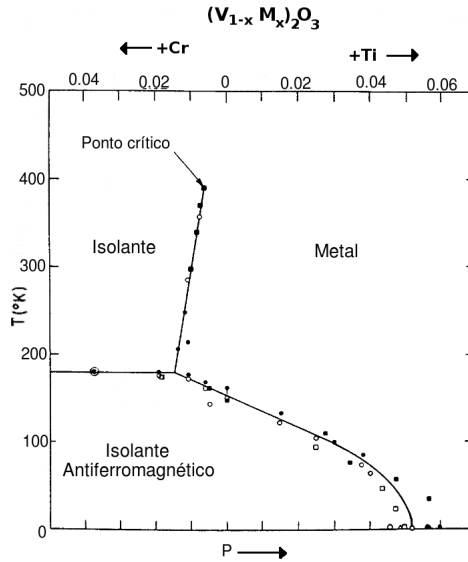


Figura 2.2: Diagrama de fases para a transição metal-isolante em  $V_2O_3$  como função da dopagem com Cr ou Ti e como função da pressão. A transição metal-isolante, que é de primeira ordem, termina num ponto crítico de segunda ordem [6].

## 2.2 Diagrama de fases para o $V_2O_3$

Compostos da forma  $(V_{1-x}M_x)_2O_3$  apresentam transição metal-isolante devido à variação da composição química ( $x$ ), pressão ( $P$ ) e temperatura ( $T$ ). Na figura (2.2) é apresentado o diagrama de fases no qual temos três regiões bem definidas: metal paramagnético, isolante paramagnético e isolante antiferromagnético. O diagrama de fases mostra que adições de  $Cr^{3+}$  estão associados a pressões negativas [6]. O incremento de  $Ti^{3+}$  corresponde a pressões positivas. A linha reta que separa a região do isolante paramagnético da região do metal paramagnético indica a transição de primeira ordem de Mott, que culmina perto de 400 K num ponto crítico de segunda ordem.

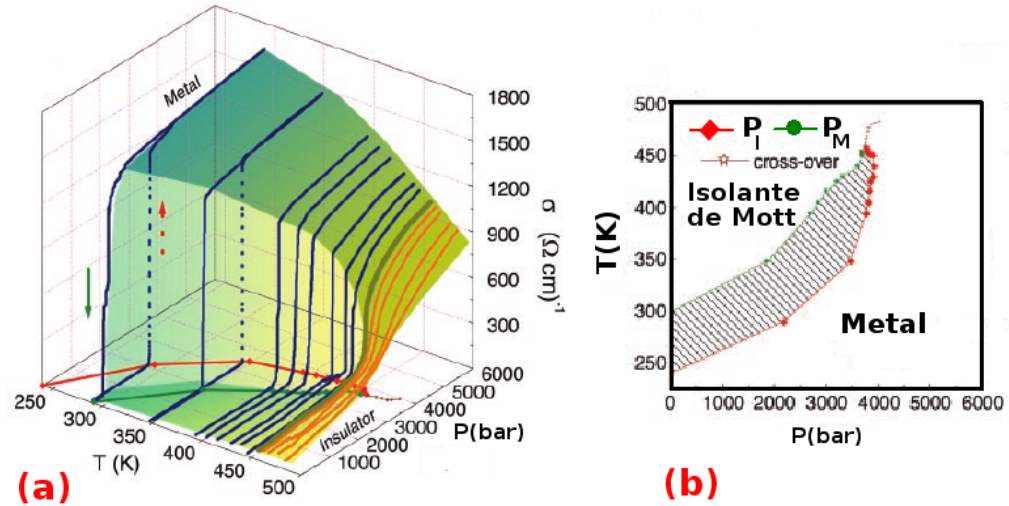


Figura 2.3: (a) Condutividade em função da temperatura e da pressão, para  $V_2O_3$ . (b) Diagrama de fases para o  $V_2O_3$ . [7].

Limelette et al. em 2008 [7], fizeram a análise da transição de Mott, no caso em que temos  $V_2O_3$  dopado com cromo. As curvas de condutividade em função da pressão e temperatura para um intervalo de temperatura  $290K < T < 485K$ , com  $T_c = 457.5K$  são apresentadas na figura (2.3.a). Abaixo da temperatura crítica observa-se um salto abrupto no valor da condutividade na região de transição (curvas azuis). Acima da temperatura crítica a condutividade varia de maneira contínua (curvas amarelas). O diagrama de fases para  $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$  como função da pressão e temperatura, no intervalo de  $1 \text{ kbar} < P < 6 \text{ kbar}$  e  $240K < T < 500K$ , pode ser visto na figura (2.3.b). É encontrado um metal para pressões maiores que  $P_M$  e um isolante para pressões menores que  $P_I$ . Estas duas linhas espinoideais delimitam uma região  $P_M < P < P_I$  na qual os dois estados coexistem. A região de coexistência termina no ponto crítico  $P_c \cong 3738$  bar e  $T = 457.5K$ .

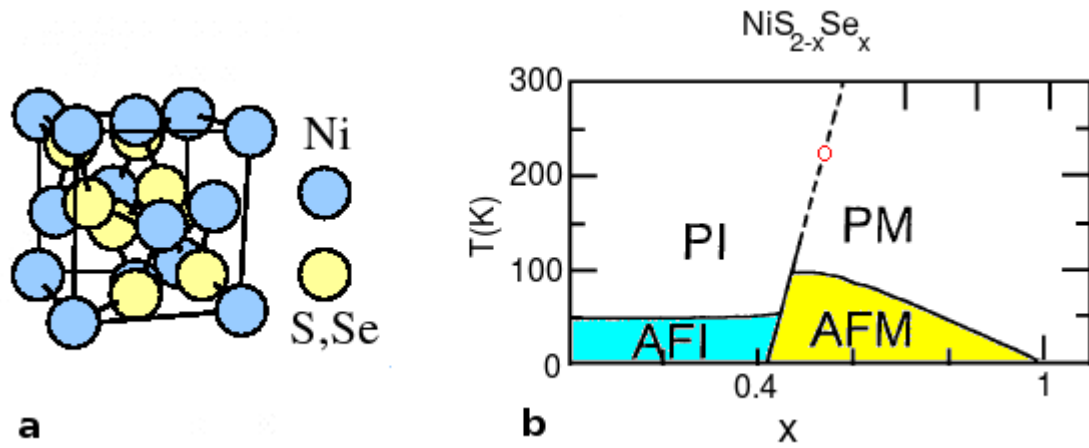


Figura 2.4: a) Estrutura pirita do  $NiS_{2-x}Se_x$ . b) Diagrama de fases para o composto  $NiS_{2-x}Se_x$ .

### 2.3 Diagrama de fases para $NiS_{2-x}Se_x$

O composto  $NiS_{2-x}Se_x$  é um dos mais utilizados no estudo da transição de Mott. Ele apresenta estrutura pirita, na qual os átomos de níquel formam uma rede cúbica de face centrada, como é mostrado na figura (2.4a) e as porcentagens de enxofre e selênio dependem do valor de  $x$  onde  $0 \leq x \leq 2$ .  $NiS_2$  é um isolante antiferromagnético com gap de energia  $E_g \simeq 0.3eV$  e a temperatura de Néel  $T_N \simeq 40K$  [17] e  $NiSe_2$  é um metal paramagnético.

No diagrama de fases da figura (2.4b) pode-se observar mudanças nas propriedades quando o sistema vai de  $NiS_2$  a  $NiSe_2$ . Para valores de temperatura pequenos  $T < 50K$  e  $x \leq 0.45$  temos um isolante antiferromagnético. Em  $x = 0.45$  ocorre uma fraca transição de primeira ordem de isolante antiferromagnético (AFI) a metal antiferromagnético (AFM). A temperatura de Néel  $T_N$ , na fase AFM decresce continuamente

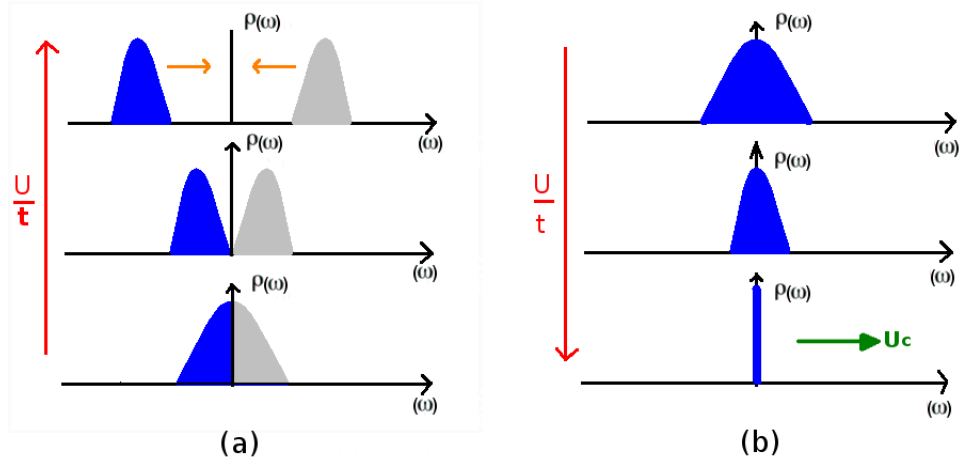


Figura 2.5: a) Transição de Mott segundo Hubbard. b) Transição de Mott segundo Brinkman e Rice.

com  $x$  e se anula ao redor de  $x = 1$  [18]. No diagrama também pode-se observar uma linha que descreve a transição de primeira ordem entre o isolante paramagnético e o metal paramagnético que culmina no ponto crítico de segunda ordem perto de 200 K.

## 2.4 Descrições teóricas da transição de Mott

Hubbard em 1964 introduziu o primeiro modelo teórico capaz de descrever a transição metal-isolante [4]. O Hamiltoniano associado é da forma

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i \left( n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right), \quad (2.1)$$

onde  $c_{i\sigma}^\dagger$  é o operador de criação no sítio  $i$  com projeção de spin  $\sigma$  e  $\langle i, j \rangle$  significa soma sobre primeiros vizinhos. O parâmetro  $t_{i,j}$  corresponde ao “*hopping*” entre sítios  $i$  e  $j$  e  $U$  é a repulsão local entre elétrons no mesmo sítio.

Hubbard baseou seu cálculo no limite atômico, que dá origem a duas bandas, as chamadas bandas de Hubbard inferior e superior, separadas pela interação  $U$ . Ele concluiu que a transição de Mott ocorre em  $\frac{U_c^{HH}}{D} = \sqrt{3} \approx 1.732$  e o gap aumenta gradualmente em função de  $U$ . Este tratamento oferece uma boa solução isolante para valores de  $U$  grandes, mas não captura corretamente a física de baixas energias da parte metálica, as quase-partículas do Líquido de Fermi [19]. Brinkman e Rice em 1970, usando a função de onda variacional de Gutzwiller, encontraram que a transição de Mott ocorre para um valor maior de interação  $\frac{U_c^{BR}}{D} = 8\frac{\bar{\epsilon}}{D} \approx 3.37$ . A função de onda de Gutzwiller dá uma boa descrição do Líquido de Fermi na região metálica, mas não consegue fazer a descrição da região isolante e carece das excitações de altas energias que dão origem às bandas superior e inferior de Hubbard da solução isolante.

Brinkman e Rice trabalharam na fase metálica, que descreve o Líquido de Fermi fortemente renormalizado, com a característica de que a escala de Fermi colapsa de maneira gradual à medida que o sistema se aproxima da transição. A transição metal-isolante é sinalizada pelo desaparecimento das quase-partículas do líquido de Fermi. Na figura (2.5) são apresentados os cenários de Hubbard e Brinkman e Rice para a transição de Mott.

Em 1989 Metzner e Vollhardt [20], reconheceram um limite simples mas não trivial do modelo de Hubbard: a alta dimensionalidade. Este limite de dimensão infinita fornece a chamada Teoria Dinâmica de Campo Médio, que será introduzida posteriormente e através da qual será obtida uma descrição completa da transição de Mott. A figura (2.6) mostra a densidade de estados à temperatura zero como uma função da interação  $U$  segundo a TDCM. No gráfico, podemos observar as duas bandas obtidas por Hubbard e o pico de quase-partículas de Brinkman e Rice.

O diagrama de fases característico dos metais de transição é obtido na TDCM



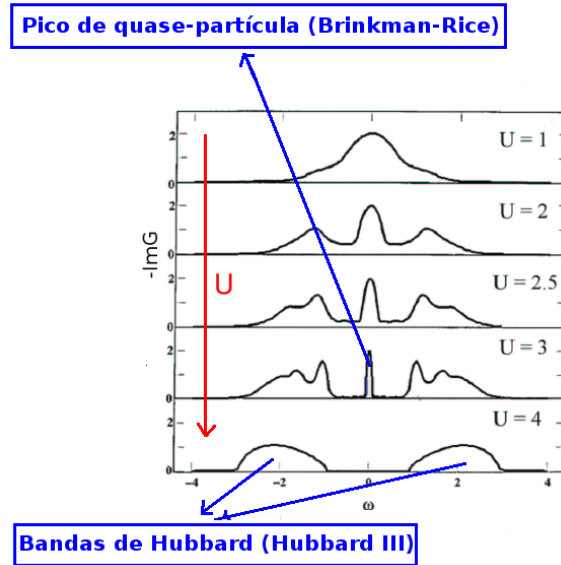


Figura 2.6: Transição de Mott usando a Teoria Dinâmica Campo Médio (TDCM) [21].

como mostrado na figura (2.7). Pode-se observar como partindo da fase metálica para valores pequenos de  $U$  e aumentando-se o valor da interação de maneira gradual, o sistema sofre uma transição de primeira ordem de metal a isolante em  $U_{c2}$ . De maneira similar, se o sistema inicialmente é preparado como isolante, ao diminuir o valor da interação é encontrado o valor  $U_{c1}$  no qual o sistema abandona o comportamento isolante e apresenta comportamento como metal. Isto é válido para diferentes valores de temperatura (ver linhas pontilhadas figura 2.7). A região compreendida entre  $U_{c1} < U < U_{c2}$  é denominada região de coexistência, pois nela as duas soluções, metálica e isolante, são encontradas. Nesta região há apenas uma fase estável, que é a fase de equilíbrio termodinâmico. A separação entre as fases estáveis é dada pela linha cheia. Dentro da região de coexistência quando uma fase é estável a outra é apenas metaestável. Esta região culmina no ponto crítico de segunda ordem. Acima desta

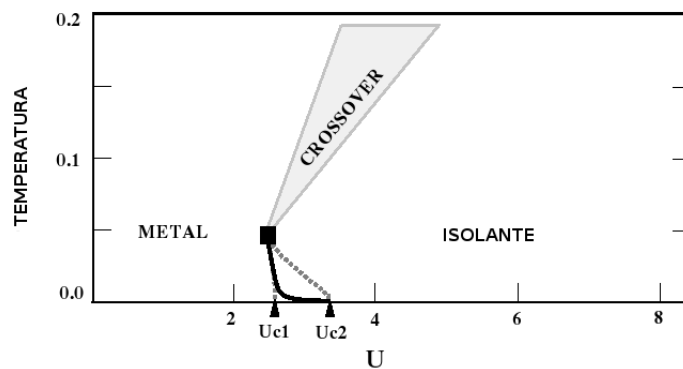


Figura 2.7: Diagrama de fases. As linhas pontilhadas delimitam a região onde as soluções metálica e isolante coexistem, a linha cheia indica a transição de primeira ordem entre metal e isolante e o quadrado indica o fim da linha de primeira ordem em um ponto de segunda ordem.[22]

temperatura é possível ir de maneira contínua de metal a isolante via a região de “*crossover*”.

## Capítulo 3

# Teoria Dinâmica de Campo Médio

Neste capítulo é apresentada a Teoria clássica de Weiss como ponto de partida para entender a Teoria Dinâmica de Campo Médio. As equações que descrevem a teoria são mostradas assim como o algoritmo numérico e a extensão para o caso no qual no sistema é incluída desordem.

### 3.1 Teoria de Campo Médio de Weiss

A teoria de campo médio estuda um problema de muitos corpos interagentes, substituindo a interação por um campo externo apropriadamente escolhido, de tal maneira que, toda a interação que um corpo sente devido aos outros é representada por um campo médio efetivo.

Na análise da teoria de Campo médio de Weiss emprega-se o Hamiltoniano de Heisenberg. Este Hamiltoniano representa uma rede na qual cada um dos sítios tem

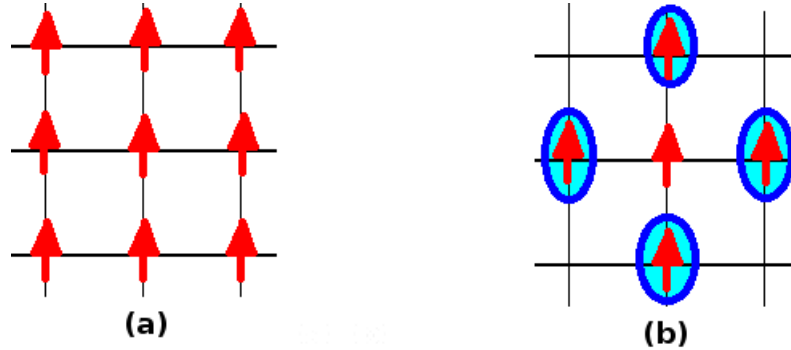


Figura 3.1: (a) Rede de spins do modelo de Heisenberg. (b) Campo sentido pelo sítio a analisar.

um spin como é ilustrado na figura (3.1.a). O Hamiltoniano é da forma

$$H = J \sum_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (3.1)$$

onde  $J$  é a integral de troca.  $J$  governa as diferenças de energia para diferentes orientações dos spins. Para obter a teoria de campo médio, vamos fixar nossa atenção no sítio  $i$ , como se observa na figura (3.1.b), caracterizado pelo spin  $\mathbf{S}_i$ . Para este sítio, devido à influência dos  $z$  primeiros vizinhos, vai-se encontrar um Hamiltoniano da forma

$$H_i = J \mathbf{S}_i \cdot \left( \sum_j \mathbf{S}_j \right), \quad (3.2)$$

que depende da soma sobre os  $\mathbf{S}_j$  com  $j \neq i$ .  $\sum_j \mathbf{S}_j$  pode assumir valores diferentes dependendo da configuração do spins  $\mathbf{S}_j$ . Ao tomarmos a média no estado fundamental ou térmico

$$\frac{1}{z} \sum_j \mathbf{S}_j \longrightarrow \frac{1}{z} \langle \sum_j \mathbf{S}_j \rangle = \mathbf{m}. \quad (3.3)$$

O campo médio efetivo que cada spin da rede sente devido aos outros é da forma

$$\mathbf{h}_{eff} = zJ\mathbf{m}, \quad (3.4)$$

que é conhecido como o Campo Médio de Weiss e o Hamiltoniano em cada sítio é aproximado por

$$H_i = \mathbf{h}_{eff} \cdot \mathbf{S}_i. \quad (3.5)$$

Escolhendo o eixo  $z$  ao longo de  $\mathbf{h}_{eff}$

$$Z = Tr(\exp(-\beta h_{eff} S_{iz})) = \sum_m \exp(-\beta h_{eff} m), \quad (3.6)$$

Usando (3.4) obtemos a equação de auto-consistência para  $h_{eff}$

$$h_{eff} = \frac{zJ}{Z} \sum_m m \exp(-\beta h_{eff} m). \quad (3.7)$$

### Campo Médio em $d \rightarrow \infty$

Pelo teorema do limite central quando a dimensão do sistema vai para infinito ( $d \rightarrow \infty$ ), as flutuações relativas da magnetização vão a zero e

$$\frac{\Delta m}{m} \sim \frac{1}{\sqrt{z}} \sim \frac{1}{\sqrt{d}}. \quad (3.8)$$

Se reescalarmos a constante de acoplamento

$$J \rightarrow \frac{J^*}{z}, \quad (3.9)$$

onde  $J^* = const$ , o campo efetivo torna-se

$$h_{eff} = J \left\langle \sum_{j=1}^z \mathbf{S}_j \right\rangle = \frac{J^*}{z} \left\langle \sum_{j=1}^z \mathbf{S}_j \right\rangle = J^* \langle \mathbf{S}_j \rangle. \quad (3.10)$$

Essa aproximação torna-se exata quando  $z \rightarrow \infty$ . Podemos agora resumir a teoria de campo médio de Weiss da seguinte maneira:

- Enfocar a física de um único sítio;
- Codificar o efeito do resto da rede em um número: o campo de Weiss;
- Resolver o problema de um sítio sob o efeito deste campo;
- Relacionar o campo de Weiss com o comportamento num único sítio: auto-consistência.

## 3.2 Obtenção das equações da TDCM

A idéia central da Teoria Dinâmica de Campo Médio (TDCM) [22], é mapear o problema da rede no problema de uma única impureza embebida em um banho de elétrons de condução (figura 3.2), o qual é determinado de maneira auto-consistente. Os fundamentos da TDCM, estão no trabalho de W. Metzner e D. Vollhardt [20] de 1989, no qual as propriedades não triviais dos sistemas de muitos corpos são descritas em dimensão infinita. Posteriormente em 1992, Georges e Kotliar [23] compreenderam que para o modelo de Hubbard os trabalhos de Metzner e Vollhardt correspondem a uma teoria de Campo Médio, a qual se torna exata em dimensão infinita.

A TDCM captura a dinâmica local do sítio. O estado característico varia em função do tempo e os estados alcançados variam entre  $|0\rangle$ ,  $|\uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$  ou  $|\uparrow\downarrow\rangle$  que são o estado vazio, com unicamente um elétron de spin para cima, para baixo ou um estado duplamente ocupado com spins opostos. Um elétron no sítio zero pode sair, percorrer a rede e retornar para o sítio zero. Na figura (3.3) é apresentada uma das possíveis sequências envolvendo duas transições: um átomo em um estado vazio absorve um elétron do reservatório circundante e um átomo com ocupação simples absorve um elétron com spin oposto [24].

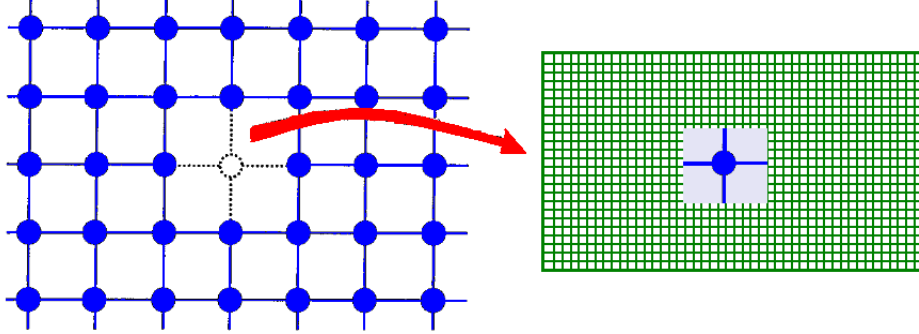


Figura 3.2: Mapeamento do problema da rede em um problema de uma única impureza embebida num banho de elétrons de condução [22].

Nesta seção será obtido o conjunto de equações auto-consistentes que definem a Teoria Dinâmica de Campo Médio, que resulta da formulação em  $d \rightarrow \infty$ , e que consiste no mapeamento do modelo da rede no problema de uma impureza mais uma condição de auto-consistência.

Considere o modelo de Hubbard

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (3.11)$$

onde  $c_{i\sigma}^\dagger$  é o operador de criação no sítio  $i$  com projeção de spin  $\sigma$  e  $\langle i, j \rangle$  significa soma sobre primeiros vizinhos. O parâmetro  $t_{i,j}$  corresponde ao “*hopping*” entre sítios  $i, j$  e  $U$  é a repulsão local entre elétrons no mesmo sítio. No limite de dimensão infinita ( $d \rightarrow \infty$ ), como foi notado por Metzner e Vollhardt, o parâmetro de “*hopping*”  $t$  deve ser reescalado como  $t \rightarrow \frac{t}{\sqrt{d}}$  [23], para resultar num limite não trivial. O Hamiltoniano

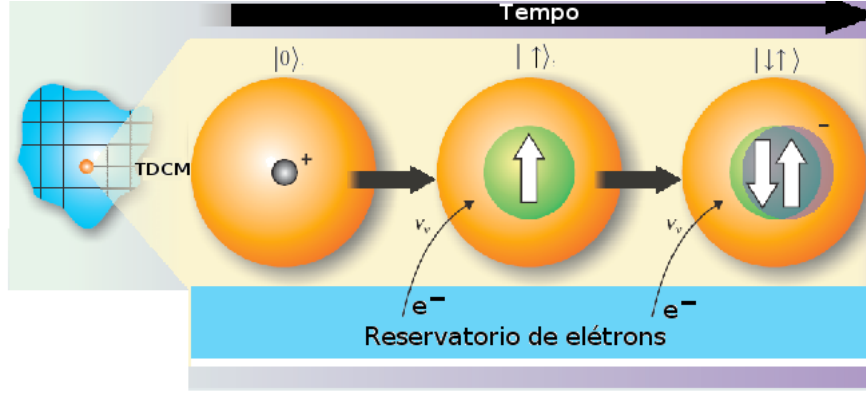


Figura 3.3: A TDCM permite mapear o problema da rede no problema de uma única impureza embebida num banho de elétrons de condução determinado auto-consistentemente, de maneira que localmente os estados que caracterizam o sítio zero são  $|0\rangle$ ,  $|\uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$  ou  $|\uparrow\downarrow\rangle$  e guardam informação da dinâmica temporal [24].

de Hubbard, Eq(3.11), está associado à ação em tempo imaginário [25].

$$\begin{aligned}
S = \int_0^\beta d\tau \{ & \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) [\partial_\tau - \mu] c_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij\sigma} t_{ij} [c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + h.c] \\
& + \sum_i U c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) \}, \tag{3.12}
\end{aligned}$$

que se pode escrever como

$$S = S_0 + S_{lat}^0 + \Delta S, \tag{3.13}$$

onde  $S_0$  é a ação do sítio zero,  $S_{lat}^0$  a ação da rede com o sítio zero removido e  $\Delta S$  é o termo de ação que liga o sítio zero com o resto da rede, sendo

$$\begin{aligned}
S_{lat}^0 = \int_0^\beta d\tau \{ & \sum_{i \neq 0, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) [\partial_\tau - \mu] c_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij \neq 0, \sigma} t_{ij} [c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + h.c] \\
& + \sum_{i \neq 0} U n_{i\uparrow}^\dagger(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) \}, \tag{3.14}
\end{aligned}$$



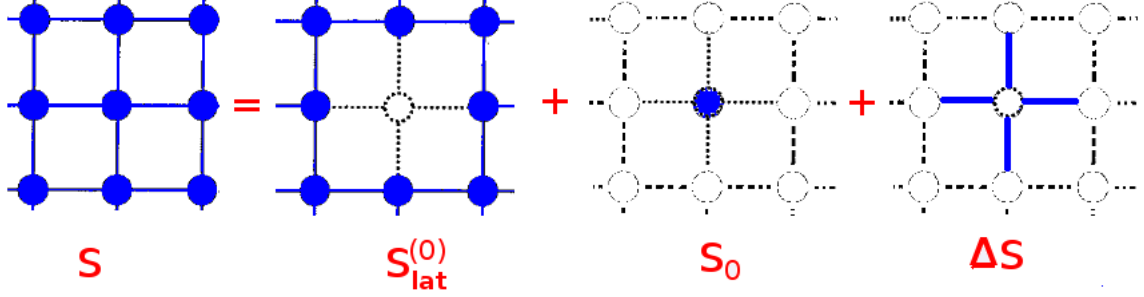


Figura 3.4: A ação efetiva está constituída por três termos  $S = S_0 + S_{lat}^0 + \Delta S$

$$S_0 = \int_0^\beta d\tau [\sum_{\sigma} c_{0\sigma}^\dagger(\tau) [\partial_\tau - \mu] c_{0\sigma}(\tau) + U n_{0\uparrow}^\dagger n_{0\downarrow}], \quad (3.15)$$

e

$$\Delta S = - \int_0^\beta d\tau \sum_{0,i} t_{i0} [c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{0\sigma}(\tau) + c_{0\sigma}^\dagger(\tau) c_{i\sigma}(\tau)]. \quad (3.16)$$

Por conveniência, a função de partição do modelo de Hubbard é escrita no formalismo de integral funcional sobre as variáveis de Grassmann [25] como

$$Z = \int \prod_{j\sigma} [dc_{j\sigma}^\dagger][dc_{j\sigma}] e^{-S}, \quad (3.17)$$

$$= \int \prod_{\sigma} [dc_{0\sigma}^\dagger][dc_{0\sigma}] e^{-S_0} \int \prod_{j \neq 0, \sigma} [dc_{j\sigma}^\dagger][dc_{j\sigma}] e^{-S_{lat}^0 - \Delta S}. \quad (3.18)$$

A ação efetiva no sítio zero, depois de integrar sobre o resto da rede é da forma

$$\frac{1}{Z_{eff}} e^{-S_{eff}[c_{0\sigma}^\dagger, c_{0\sigma}]} = \frac{1}{Z} \int \prod_{j \neq 0, \sigma} [dc_{j\sigma}][dc_{j\sigma}^\dagger] e^{-S}, \quad (3.19)$$

de tal forma que

$$Z = \int \prod_{\sigma} [dc_{0\sigma}^\dagger][dc_{0\sigma}] \frac{Z}{Z_{eff}} e^{-S_{eff}[c_{0\sigma}^\dagger, c_{0\sigma}]}, \quad (3.20)$$

$$Z_{eff} = \int \prod_{\sigma} [dc_{0\sigma}^\dagger][dc_{0\sigma}] e^{-S_{eff}[c_{0\sigma}^\dagger, c_{0\sigma}]}. \quad (3.21)$$

Na equação (3.16)

$$t_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{para primeiros vizinhos,} \\ 0 & \text{outras posições.} \end{cases} \quad (3.22)$$

Fazendo  $\eta_{j,\sigma} = t_{0j}c_{0\sigma}$  em (3.16)

$$\Delta S = - \int_0^\beta d\tau \sum_{j \neq 0, \sigma} [c_{j\sigma}^\dagger \eta_{j\sigma} + \eta_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}]. \quad (3.23)$$

O operador  $\eta_{j\sigma}$ , atua como uma fonte de campo para  $c_{j\sigma}^\dagger$

$$\frac{1}{Z_{eff}} e^{-S_{eff}[c_{0\sigma}^\dagger, c_{0\sigma}]} = \frac{e^{-S_0}}{Z} \int \prod_{j \neq 0, \sigma} [dc_{j\sigma}^\dagger][dc_{j\sigma}] e^{-S_{latt}^0} e^{-\Delta S}, \quad (3.24)$$

$$\frac{1}{Z_{eff}} e^{-S_{eff}[c_{0\sigma}^\dagger, c_{0\sigma}]} = \frac{e^{-S_0}}{Z} \int \prod_{j \neq 0, \sigma} [dc_{j\sigma}^\dagger][dc_{j\sigma}] e^{-S_{latt}^0} e^{\int_0^\beta d\tau \sum_{j \neq 0} [c_{j\sigma}^\dagger(\tau) \eta_{j\sigma}(\tau) + c.c.]}. \quad (3.25)$$

Como  $\eta_{j\sigma}$  é uma fonte de campo para  $c_{j\sigma}^\dagger$ , então a integral sobre  $c_{j\sigma}$  é a funcional geratriz das funções de Green conectadas da rede com o sítio zero removido. Portanto,

$$S_{eff} = S_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{j_1 \dots j_n, i_1 \dots i_n} \int \eta_{i_1}^\dagger(\tau_{i_1}) \dots \eta_{i_n}^\dagger(\tau_{i_n}) \eta_{j_1}^\dagger(\tau_{j_1}) \dots \eta_{j_n}^\dagger(\tau_{j_n}) \times \quad (3.26)$$

$$\times G^{(0)}(i_1, \dots, j_n)(\tau_{i_1}, \dots, \tau_{i_n}, \tau_{j_1}, \dots, \tau_{j_n}) d\tau_{i_1} \dots d\tau_{j_n}.$$

### 3.2.1 Análise da ação efetiva

No limite  $d \rightarrow \infty$ ,  $t$  é rescalado como  $t \sim \frac{\tilde{t}}{\sqrt{d}}$  e a ação efetiva da equação (3.26) é simplificada.

i) Quando  $n = 1$  (3.26) é da forma

$$S_{eff} = \sum_{i_1, j_1}^d \int \eta_{j_1}^\dagger(\tau_{j_1}) \eta_{i_1}(\tau_{i_1}) G_{i_1, j_1}^{(0)}(\tau_{i_1}, \tau_{j_1}) d\tau_{i_1} d\tau_{j_1} + S_0. \quad (3.27)$$

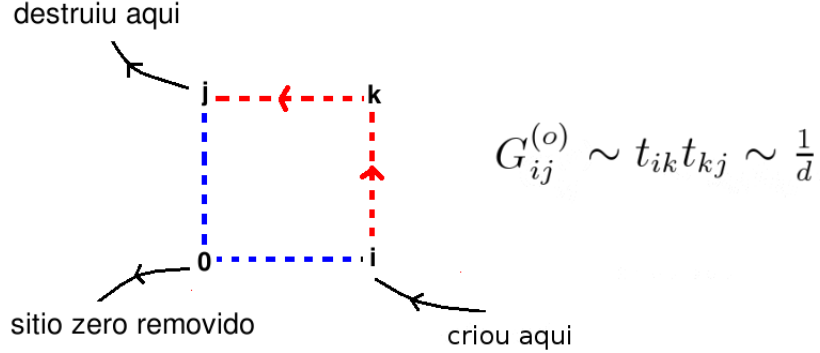


Figura 3.5: Trajetória para a função de Green de um corpo.

Note que  $\sum_{i_1, j_1}^d \sim d^2$ ,  $\eta_{j_1}^\dagger(\tau_{j_1})\eta_{i_1}(\tau_{i_1}) \sim t^2 \sim \frac{1}{d}$ . A função de Green  $G_{ij}^{(0)}$  é calculada escolhendo o caminho mostrado na figura (3.5). Em  $i$  temos criação de partículas e  $j$  dá conta da sua destruição, portanto  $G_{ij}^{(0)} \sim t_{ik}t_{kj} \sim \frac{1}{d}$ , e a ação efetiva quando  $d \rightarrow \infty$  resulta

$$S_{eff} \sim \frac{1}{d} \times d^2 \times \frac{1}{d} \sim \mathcal{O}(1). \quad (3.28)$$

ii) Para  $n = 2$ , a ação efetiva é da forma

$$S_{eff} = \sum_{i_1, i_2, j_1, j_2}^d \int \eta_{i_1}^\dagger(\tau_{i_1})\eta_{i_2}^\dagger(\tau_{i_2})\eta_{j_1}(\tau_{j_1})\eta_{j_2}(\tau_{j_2})G_{i_1, i_2, j_1, j_2}^{(0)}(\tau_{i_1}, \tau_{i_2}, \tau_{j_1}, \tau_{j_2})d\tau_{i_1}d\tau_{i_2}d\tau_{j_1}d\tau_{j_2} + S_0. \quad (3.29)$$

Fazendo  $(i_1, i_2, j_1, j_2) \rightarrow (l, k, j, i)$ , encontra-se  $\sum_{l, k, j, i}^d \sim d^4$ ,  $\eta_l^\dagger(\tau_l)\eta_k^\dagger(\tau_k)\eta_j(\tau_j)\eta_i(\tau_i) \sim t^4 \sim \frac{1}{d^2}$  e a função de Green é calculada escolhendo caminhos como os ilustrados na figura (3.6). Em  $l$  e  $k$  ocorre a criação de partículas e  $i, j$  dão conta da sua destruição. A função de Green para dois corpos é da forma

$$G_{lkji}^{(0)} \sim t^{|l-k|}t^{|k-i|}t^{|k-j|} \quad (3.30)$$

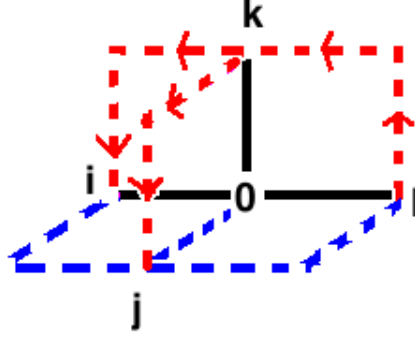


Figura 3.6: Caminhos escolhidos para fazer o cálculo da função de Green no caso  $n = 2$

$$G_{lkji}^{(0)} \sim \frac{1}{d} \times \frac{1}{d} \times \frac{1}{d} \sim \frac{1}{d^3} \quad (3.31)$$

Podemos analisar a expressão em (3.29) e temos que

$$S_{eff} \approx \frac{1}{d^2} \times d^4 \times \frac{1}{d^3} \sim \frac{1}{d} \rightarrow 0, \quad (3.32)$$

de maneira que no limite de dimensão infinita, para o caso  $n = 2$ , a ação efetiva vai a zero, e similarmente para todos os termos de ordem superior. Portanto o único termo que sobrevive é o primeiro, com  $n = 1$ , e a ação efetiva é da forma

$$S_{eff} = \sum_{i\sigma, j\sigma}^d \int \eta_{i\sigma}^\dagger(\tau) \eta_{j\sigma}(\tau') G_{ij}^{(0)}(\tau - \tau') d\tau d\tau' + S_0, \quad (3.33)$$

onde  $\eta_{i\sigma}^\dagger(\tau) = t_{i0}(\tau) c_{0\sigma}^\dagger(\tau)$  e  $\eta_{j\sigma}(\tau') = t_{j\sigma} c_{0\sigma}(\tau')$  portanto,

$$S_{eff} = \sum_{i,j,\sigma}^d t_{0i} t_{0j} \int d\tau d\tau' [c_{0\sigma}^\dagger(\tau) G_{ij}^{(0)}(\tau - \tau') c_{0\sigma}(\tau')] + S_0. \quad (3.34)$$

Da equação (3.15) temos

$$S_{eff} = \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_\sigma c_{0\sigma}^\dagger(\tau) (\partial_\tau - \mu) c_{0\sigma}(\tau) + U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} \right] \quad (3.35)$$

$$+ \sum_{ij,\sigma}^d t_{0i} t_{0j} \int d\tau d\tau' \left[ c_{0\sigma}^\dagger(\tau) G_{ij}^{(0)}(\tau - \tau') c_{0\sigma}(\tau') \right], \quad (3.36)$$

$$S_{eff} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\substack{ij \\ \sigma}} c_{0\sigma}^\dagger(\tau) ((\partial_\tau - \mu) \delta(\tau - \tau') + t_{0i} t_{0j} G_{ij}^0(\tau - \tau')) c_{0\sigma}(\tau') \\ + U \int_0^\beta d\tau n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau), \quad (3.37)$$

$$S_{eff} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{0\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{0\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau), \quad (3.38)$$

onde

$$\mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') = (\partial_\tau - \mu) \delta(\tau - \tau') + \sum_{ij} t_{0i} t_{0j} G_{ij}^0(\tau - \tau'). \quad (3.39)$$

Em termos das frequências de Matsubara

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \sum_{ij} t_{0i} t_{0j} G_{ij}^0(i\omega) \quad (3.40)$$

e

$$S_{eff} = \sum_{\omega\sigma} c_{0\sigma}^\dagger(\omega) [i\omega + \mu - t_{0i} t_{0j} G_{ij}^0(\omega)] c_{0\sigma}(\omega) + \int_0^\beta d\tau U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow}. \quad (3.41)$$

A função de Green do sítio que aparece na ação efetiva pode-ser calculada usando-se que

$$G(\tau - \tau') = -\langle T[c_{0\sigma}(\tau) c_{0\sigma}^\dagger(\tau')] \rangle_{S_{eff}}. \quad (3.42)$$

A função de Green da rede é:

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_k - \Sigma(i\omega_n)} \quad (3.43)$$

onde  $\Sigma$  é a autoenergia

$$\Sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) - G^{-1}(i\omega_n). \quad (3.44)$$

No limite  $d \rightarrow \infty$ ,  $\Sigma(\vec{k}, \omega) = \Sigma(\omega)$  [20].

Para que o problema tenha solução fechada, deve-se impor uma condição de auto-consistência, na qual deve-se igualar a função de Green local obtida a partir da função de Green da rede com a função de Green calculada usando a ação efetiva:

$$G(i\omega) = \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, i\omega) = \int \frac{\rho(\epsilon)d\epsilon}{i\omega + \mu - \epsilon - \Sigma(i\omega)}. \quad (3.45)$$

Portanto, dada uma função inicial  $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega)$ , obtemos  $G(\tau - \tau')$ , a partir da equação (3.42), usando algum método numérico como Monte Carlo Quântico. A partir dessas duas grandezas pode-se calcular  $\Sigma(i\omega_n)$  pela equação (3.44). Aplicando a condição de auto-consistência igualamos a função de Green da rede com aquela calculada pela ação efetiva para encontrar  $G(i\omega)$  como indica (3.45). A partir de  $\Sigma(i\omega_n)$  e  $G(i\omega)$ , usando (3.44) obtemos

$$\mathcal{G}_0^{-1(new)}(i\omega) = \Sigma(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n), \quad (3.46)$$

com  $\mathcal{G}_0^{-1(new)}(i\omega)$  fechamos um ciclo de auto-consistência. Repetimos este mesmo procedimento, agora usando  $\mathcal{G}_0^{-1(new)}(i\omega)$  como chute inicial. O ciclo completo deve ser feito para um número de iterações suficiente, até atingir a convergência.

### 3.3 Mapeamento no modelo de Anderson

A função  $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ , incorpora o fato de que o elétron pode sair do sítio 0, percorrer a rede e voltar para o sítio 0. Pode-se obter o mesmo efeito ao introduzir um banho fictício de elétrons de condução descritos pelo Hamiltoniano de Anderson

$$H_{AIM} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} V_k (a_{k\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + c_{\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma}) + \epsilon_c \sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + U n_{c\uparrow} n_{c\downarrow}, \quad (3.47)$$

onde temos dois tipos distintos de elétrons: de condução, que ocupam estados estendidos, e elétrons localizados. O Hamiltoniano acima é um Hamiltoniano auxiliar. O primeiro termo no Hamiltoniano representa a energia dos elétrons de condução:  $a_{k\sigma}$  e  $a_k^{\dagger}$  são os operadores de criação e aniquilação. O terceiro termo representa a energia dos elétrons localizados:  $c_{\sigma}$  e  $c_{\sigma}^{\dagger}$  são os operadores de criação e aniquilação, de elétrons localizados com spin  $\sigma$ . O segundo termo representa a hibridização entre estados estendidos e localizados, sendo  $V_k$  o potencial de hibridização. O último termo representa a interação coulombiana entre dois elétrons localizados onde,  $n_{c\sigma} = c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma}$  é o operador número e  $U$  o potencial de interação. Neste caso a interação de Coulomb está presente unicamente nos elétrons localizados e não nos elétrons de condução.

A ação efetiva para o Hamiltoniano (3.47) é

$$S_{eff}^{IMP} = \sum_{\omega\sigma} c_{0\sigma}^{\dagger}(\omega) [\mathcal{G}_0^{-1}(\omega)] c_{0\sigma}(\omega) + \int d\tau U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow}, \quad (3.48)$$

onde

$$\mathcal{G}_0^{-1}(\omega) = \omega + \mu - \Delta(\omega) \quad (3.49)$$

e

$$\Delta(\omega) = \sum_k \frac{|V_k|^2}{\omega - \epsilon(k)}. \quad (3.50)$$

A importância de  $S_{eff}^{IMP}$  é que agora podemos usar nossa intuição obtida a partir do entendimento do modelo de Anderson para entender a física de  $S_{eff}$ , de maneira que podemos ver o problema de uma rede na Teoria Dinâmica de Campo Médio como mapeada no problema de uma simples impureza mais uma condição de auto-consistência.

## 3.4 Algoritmo

O algoritmo usado para resolver problemas usando Teoria Dinâmica de Campo Médio consiste em:

- 1) Colocar uma tentativa inicial para  $\Delta^{(1)}(\omega)$
- 2) Encontrar a função de Green  $G^{(1)}(\tau)$
- 3) Fazer a transformada de Fourier  $G^{(1)}(\omega)$
- 4) Encontrar a autoenergia

$$\Sigma^{(1)}(\omega) = \omega - \Delta^{(1)}(\omega) - [G^{(1)}(\omega)]^{-1} \quad (3.51)$$

- 5) Calcular  $G_{Local}^{(1)}(\omega)$

$$G_{Local}^{(1)}(\omega) = \sum_k \frac{1}{\omega - \epsilon(k) - \Sigma^{(1)}(\omega)} \quad (3.52)$$

- 6) Impor condição de auto-consistência

$$G_{Local}^{(1)} = \frac{1}{\omega - \Delta^{(2)}(\omega) - \Sigma^{(1)}(\omega)} \quad (3.53)$$

e encontrar  $\Delta^{(2)}(\omega)$

$$\Delta^{(2)}(\omega) = \omega - \Sigma^{(1)}(\omega) - [G_{Local}^{(1)}]^{-1} \quad (3.54)$$

- 8) No caso em que  $\Delta^{(1)}(\omega) \approx \Delta^{(2)}(\omega)$ , segundo um critério de convergência o programa pára. No caso contrário fazer  $\Delta^{(1)}(\omega) = \Delta^{(2)}(\omega)$  e volta para o passo 2.

### 3.4.1 Solução do problema de uma impureza

Para resolver o problema de uma impureza de Anderson é preciso usar algum método numérico. Neste caso será usado Monte Carlo Quântico (algoritmo de Hirsch e Fye).



No apêndice A estão algumas deduções do método. Basicamente temos que calcular a função de Green local a temperatura finita

$$G(\tau - \tau') = -\langle T_\tau c_{0\sigma}(\tau) c_{0\sigma}^\dagger(\tau') \rangle_{\text{eff}} \quad (3.55)$$

dada a ação efetiva. No nosso caso, para fazer o cálculo vamos usar o Hamiltoniano de Anderson para uma impureza, dado pela equação (3.47). Escreveremos a função de partição

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H}. \quad (3.56)$$

O Hamiltoniano é constituído por duas contribuições, um termo não-interagente

$$H^0 = \sum_{p \geq 2, \sigma} \epsilon_p a_{p\sigma}^\dagger a_{p\sigma} + \sum_{p \geq 2, \sigma} V_p (a_{p\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger a_{p\sigma}) + (\epsilon_d + \frac{U}{2}) \sum_\sigma n_{d\sigma}, \quad (3.57)$$

constituído por termos quadráticos nos operadores de criação e destruição e

$$H^i = U [n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} - \frac{1}{2} (n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow})], \quad (3.58)$$

termo de interação constituído por termos quárticos nos operadores de criação e destruição.

Na função de partição vamos discretizar  $\beta = \frac{1}{T} = L\Delta\tau$  em  $L$  intervalos de tamanho  $\Delta\tau$ . Usando a fórmula de Susuki-Trotter

$$e^{\Delta\tau H_0 + \Delta\tau H_I} \cong e^{\Delta\tau H_0} e^{\Delta\tau H_I} + \mathcal{O}(\Delta\tau)^2. \quad (3.59)$$

A função de partição fica

$$Z \cong \text{Tr} \prod_{i=1}^L e^{-\Delta\tau H_0} e^{-\Delta\tau H_I}. \quad (3.60)$$

Trabalhando agora com o termo quártico

$$H_I = U [n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} - \frac{1}{2} (n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow})], \quad (3.61)$$

usando a transformação de Hubbard-Stratonovich,

$$e^{-\Delta\tau U[n_{0\uparrow}n_{0\downarrow} - \frac{1}{2}(n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow})]} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\lambda s(n_{0\uparrow} - n_{0\downarrow})}, \quad (3.62)$$

transformamos o termo quártico em quadrático, onde  $\cosh\lambda = e^{-\Delta\tau U/2}$  e como consequência da transformação aparecem variáveis tipo Ising, sendo  $s = \pm 1$ . Agora vamos ter  $2^L$  possíveis configurações de spins de Ising, onde cada configuração é do tipo  $\{s\} = \{s_1, s_2, \dots, s_L\}$ , de modo que

$$Z = \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} Tr \prod_{l=1}^L [e^{-\Delta\tau H_0} e^{\lambda s(n_{0\uparrow} - n_{0\downarrow})}], \quad (3.63)$$

$$= \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} \det \mathcal{O}_\uparrow(\{s\}) \det \mathcal{O}_\downarrow(\{s\}), \quad (3.64)$$

$$= \sum_{\{s\}} \rho(\{s\}), \quad (3.65)$$

onde,  $\rho(\{s\}) = \det \mathcal{O}_\uparrow(\{s\}) \det \mathcal{O}_\downarrow(\{s\})$ . Fazendo um procedimento similar encontramos

$$G_0(\tau_{l_1}, \tau_{l_2}) = \frac{1}{2^L} \frac{1}{Z} \sum_{\{s\}} \det \mathcal{O}_\uparrow(\{s\}) \det \mathcal{O}_\downarrow(\{s\}) G_0^{\{s\}}(\tau_{l_1}, \tau_{l_2}), \quad (3.66)$$

$$= \frac{\sum_{\{s\}} \rho(\{s\}) G_0^{\{s\}}(\tau_{l_1}, \tau_{l_2})}{\sum_{\{s\}} \rho(\{s\})}. \quad (3.67)$$

Este cálculo requer uma soma sobre  $2^L$  configurações e cada termo da soma precisa da inversão de uma matriz de  $L \times L$ . Como o número de configurações é muito grande, o cálculo desta soma pode ser feito usando Monte Carlo Quântico [26], com o objetivo de escolher as configurações mais prováveis, e conseguir encontrar a função de Green. Inicialmente uma configuração aleatória é gerada. Então, um processo aleatório é construído tentando inverter spins de maneira sucessiva. Podem-se usar as seguintes

probabilidades de transição  $P$ :

$$\text{Banho térmico; } P(s \rightarrow s') = \frac{\rho'}{\rho + \rho'} \quad (3.68)$$

$$\text{Metropolis; } P(s \rightarrow s') = \begin{cases} 1 & \text{se } \rho' > \rho \\ \frac{\rho'}{\rho} & \text{Em outros casos} \end{cases} \quad (3.69)$$

A implementação do algoritmo requer fazer o cálculo dos determinantes de  $\rho$  e o cálculo das matrizes inversas para calcular  $G$ . Hirsch e Fye conseguiram encontrar uma relação entre configurações de spins diferentes, mediante a equação de Dyson

$$G' = \mathcal{A}^{-1}G \quad (3.70)$$

com

$$\mathcal{A} = 1 + (1 - G)(e^{\nu' - \nu} - 1), \quad (3.71)$$

onde  $e^\nu$  é uma matriz diagonal, cujos elementos são  $e^{\lambda\sigma s}$ . Quando as configurações diferem unicamente por um valor de spin a expressão (A.33) se simplifica e ficamos com uma solução do tipo

$$G'_{l_1, l_2} = G_{l_1, l_2} + (G - 1)_{l_1, l} (e^{V' - V} - 1)_{l, l} (\mathcal{A}_{l, l})^{-1} G_{l, l_2}. \quad (3.72)$$

Neste caso, também pode-se calcular a razão entre os determinantes de maneira simplificada dada por

$$\frac{\rho'}{\rho} = 1 + (1 - G_{l, l}) (e^{\lambda\sigma(s_{l'} - s_l)} - 1). \quad (3.73)$$

Um passo de Monte Carlo quântico consiste em fazer uma varredura sobre toda a rede tentando inverter cada spin de Ising e gerando novas configurações com o algoritmo de Metropolis. Este procedimento é repetido um número “*nsweep*” de vezes, até que o sistema termalize e se possam calcular quantidades físicas com pequeno erro estatístico.

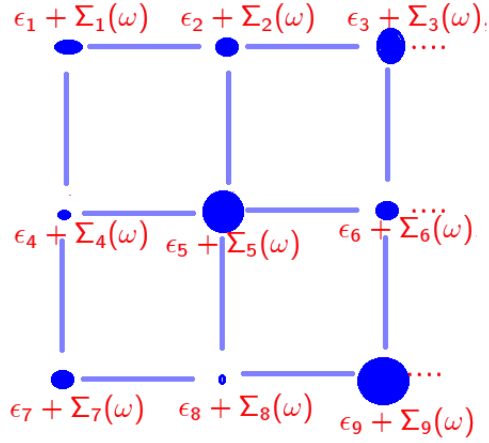


Figura 3.7: No caso da TEDCM as energias  $\epsilon_j$ ,  $\Sigma_j$  são diferentes em cada um dos sítios da rede.

### 3.4.2 Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio

No caso desordenado o modelo de Hubbard pode escrever-se como

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{j\sigma} \epsilon_j c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}, \quad (3.74)$$

onde  $c_{j\sigma}$  é o operador de aniquilação de um elétron no sítio  $j$  com projeção de spin  $\sigma$ ,  $t$  é a amplitude de “hopping” entre primeiros vizinhos,  $\epsilon_j$  é a energia do orbital no sítio  $j$  e  $U > 0$  é a repulsão coulombiana entre elétrons de spins opostos em cada sítio. As energias diagonais  $\epsilon_j$  são diferentes em cada sítio da rede (ver na figura (3.7)) e estão distribuídas segundo uma distribuição de probabilidade  $P(\epsilon)$  (geralmente uniforme ou gaussiana), cuja variância é dada por  $W^2$ .

A abordagem da TEDCM começa por tomar um sítio genérico qualquer da rede, por exemplo  $j$ , e integrar sobre todos os outros para obter uma ação efetiva no sítio. Devido às interações, isso gera acoplamentos de todas as ordens (de dois, três,  $n$  corpos) entre os

elétrons do sítio. A aproximação da TEDCM consiste em reter, além da repulsão local de Hubbard, apenas termos quadráticos. Essa aproximação é motivada pela TDCM. Na generalização para a TEDCM fazemos o mesmo tipo de aproximação, que consiste em reter apenas os efeitos locais de correlação eletrônica. Uma outra simplificação tanto da TDCM quanto da TEDCM é que a auto-energia é diagonal nos sítios [22]. Assim, a ação efetiva do sítio  $j$  para o Hamiltoniano (3.74) é dada por (em tempo imaginário)

$$\begin{aligned}
S_{eff}(j) &= \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau c_{j\sigma}^{\dagger}(\tau) (\partial_{\tau} + \epsilon_j - \mu) c_{j\sigma}(\tau) \\
&+ \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' c_{j\sigma}^{\dagger}(\tau) \Delta_j(\tau - \tau') c_{j\sigma}(\tau') \\
&+ U \int_0^{\beta} d\tau n_{j\uparrow}(\tau) n_{j\downarrow}(\tau),
\end{aligned} \tag{3.75}$$

onde  $n_{j\sigma}(\tau) = c_{j\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}$ . A função de hibridização  $\Delta_j(\tau)$  acima é dada, por

$$\Delta_j(\tau) = t^2 \sum_{l,m=1}^z G_{lm}^{(j)}(\tau), \tag{3.76}$$

onde a soma é sobre os  $z$  vizinhos do sítio  $j$ . A função de Green  $G_{lm}^{(j)}(\tau)$ , por sua vez, é a função de Green para propagação entre os sítios  $l$  e  $m$ , **numa rede em que o sítio  $j$  tenha sido removido** (fato denotado pelo índice  $(j)$ )

$$G_{lm}^{(j)}(\tau) = - \langle T [c_{l\sigma}(\tau) c_{m\sigma}^{\dagger}(0)] \rangle^{(j)}.$$

Essa função de Green pode ser escrita (no espaço de frequências) em termos das funções de Green da rede com o sítio  $j$  incluído

$$G_{lm}^{(j)}(i\omega_n) = G_{lm}(i\omega) - \frac{G_{lj}(i\omega)G_{jm}(i\omega)}{G_{jj}(i\omega)} \tag{3.77}$$

A função de hibridização, que define a ação efetiva (3.75), é função dos propagadores  $G_{lm}$ . A auto-consistência da TEDCM é obtida especificando-se como relacionar esses propagadores com a ação efetiva. Vale notar que a ação efetiva (3.75) corresponde a um modelo de impureza única de Anderson inserida num mar de elétrons de condução descrito pela função de hibridização  $\Delta_j(\tau)$ . Suponhamos agora que podemos achar a função de Green local correspondente à ação (3.75)

$$G_{jj}^{loc}(\tau) = - \left\langle T \left[ c_{j\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(0) \right] \right\rangle_{eff}, \quad (3.78)$$

onde o subíndice *eff* enfatiza que a função de Green deve ser calculada sob a dinâmica ditada pela ação efetiva (3.75). No espaço de frequências de Matsubara, ela pode ser parametrizada pela auto-energia (local)

$$G_{jj}^{loc}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_j + \mu - \Delta_j(i\omega_n) - \Sigma_j(i\omega_n)}. \quad (3.79)$$

Notando que a auto-energia corresponde a um “deslocamento” da energia do sítio (ainda dependente da frequência), postulamos que as funções de Green interagentes sejam obtidas a partir das funções de Green não-interagentes  $G_{lm}^{(0)}$  a partir da substituição

$$G_{lm}^{(j)}(\tau) = G_{lm}^{(0)}[\epsilon_j \rightarrow \epsilon + \Sigma_j]. \quad (3.80)$$

Mais especificamente a função de Green procurada é o elemento de matriz do resolvente

$$\hat{G}(i\omega) = \frac{1}{i\omega_n + \mu + \hat{H}_0[\epsilon_j \rightarrow \epsilon_j + \Sigma_j(i\omega_n)]} \quad (3.81)$$

onde

$$\hat{H}_0[\epsilon_j] = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{j\sigma} \epsilon_j c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \quad (3.82)$$

O resolvente pode ser calculado por inversão matricial. Isto fecha o laço de auto-consistência da TEDCM.

### 3.4.3 Algoritmo na TEDCM

1. Dada uma realização de desordem  $\epsilon_j$ , começamos por uma estimativa inicial para a função de hibridização  $\Delta_j^{(1)}(i\omega_n)$ .
2. Para cada valor de  $\epsilon_j$ , resolvemos o problema definido por (3.75), isto é, achamos a função de Green local (3.78) através de algum método aproximativo (no nosso caso, o Monte Carlo Quântico) e, invertendo (3.79), encontramos as auto-energias  $\Sigma_j^{(1)}(i\omega)$
3. Realizando para cada frequência o deslocamento  $\epsilon_j \rightarrow \epsilon_j + \Sigma_j^{(1)}(i\omega_n)$  dado pela equação (3.80) calculamos a função de Green da rede  $G_{lm}^{(1)} = G_{lm}^0[\epsilon_j \rightarrow \epsilon_j + \Sigma_j^{(1)}]$  através do resolvente (3.81).
4. Utilizando as funções de Green locais da rede, obtemos uma nova atualização da função de hibridização  $\Delta_j^{(2)}(i\omega_n)$ , Eq. (3.79).
5. Voltamos ao item 1 e comparamos as hibridizações  $\Delta^1(\omega)$  e  $\Delta^2(\omega)$  (isto define um loop de auto-consistência) parando o processo de iteração quando é atingida a convergência desejada.





# Capítulo 4

## Resultados

Conforme explicado anteriormente, o Hamiltoniano de Hubbard permite fazer uma boa descrição da transição de Mott de maneira que se pode entender melhor o comportamento dos compostos que apresentam tal transição. No nosso estudo foi considerada uma rede quadrada de  $10 \times 10$  sítios. Além do “*hopping*” entre primeiros vizinhos  $t$  foi preciso considerar um “*hopping*” imaginário entre segundos vizinhos  $t^* = i0.5t$  e o Hamiltoniano de Hubbard torna-se

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - \sum_{\ll i,j \gg \sigma} t^* (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}, \quad (4.1)$$

onde  $\langle i, j \rangle$  denota primeiros vizinhos e  $\ll i, j \gg$ , segundos vizinhos. Foi preciso incluir o “*hopping*” entre segundos vizinhos para eliminar a singularidade de Van Hove que aparece no nível de Fermi no caso sem desordem em semi-preenchimento, ao mesmo tempo em que se preserva a simetria partícula buraco. A presença dessa singularidade dificulta a convergência do método. Na figura 4 é apresentada a densidade de estados para o caso em que é considerado o “*hopping*” imaginário. A semi-largura de banda ( $D$ ) é usada como unidade de energia. Estamos interessados em encontrar os valores

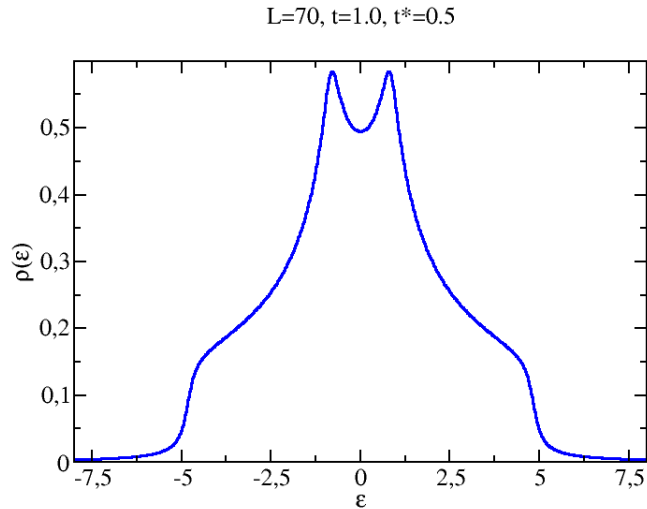


Figura 4.1: Densidade de estados para o caso em que há “*hopping*” imaginário

$U_{c1}$  e  $U_{c2}$  nos quais as fases deixam de ser metaestáveis, as chamadas linhas espinoidais. Esta análise será feita para o caso em que não há desordem no sistema e para o caso onde é adicionada uma desordem de  $W = 0.52D$  para  $T = 0.01298D$  e  $T = 0.02363D$ .

O primeiro que será mostrado é como identificar um metal e um isolante. Em seguida vamos explicar a maneira como é estudada a transição de Mott. Nesse caso, será identificada a região de coexistência.

O nosso maior interesse está no estudo do efeito da desordem na transição de Mott, que traz consequências diretas nos valores de  $U_{c1}$ ,  $U_{c2}$ . No caso com desordem, cada sítio da rede apresenta um comportamento diferente. Portanto, cada sítio tem sua própria curva de histerese que é diferente das encontradas para os outros sítios da rede. Mesmo assim, veremos como será possível identificar as fases globais do sistema.

## Como identificar o comportamento metálico?

Um sistema metálico é caracterizado por ter uma densidade de estados diferente de zero no nível de Fermi a temperatura zero. O critério usado quando temos um metal é que  $ImG(i\omega_n \rightarrow 0) \neq 0$ , como é ilustrado na figura (4.2a), e  $Im\Sigma(i\omega_n \rightarrow 0) = 0$ , como na figura (4.2b), com  $T = 0.01298D$  e  $U = 2.213D$ . Para estudar o carácter metálico usaremos a primeira frequência de Matsubara como indicativa do comportamento em função da frequência, como na figura (4.3).

## Como é o comportamento isolante?

Os isolantes de Mott apresentam densidade de estados zero no nível de Fermi a temperatura zero. Encontra-se que a parte imaginária da função de Green em função da frequência  $ImG(i\omega_n \rightarrow 0) = 0$ , como é ilustrado na figura (4.4a), e a autoenergia  $Im\Sigma(i\omega_n \rightarrow 0) \rightarrow \infty$ , como é mostrado na figura (4.4b), com  $T = 0.01298D$  e  $U = 2.313D$ . Para estudar o carácter isolante será feita a análise do comportamento da primeira frequência de Matsubara, que deve apresentar valores próximos a zero.

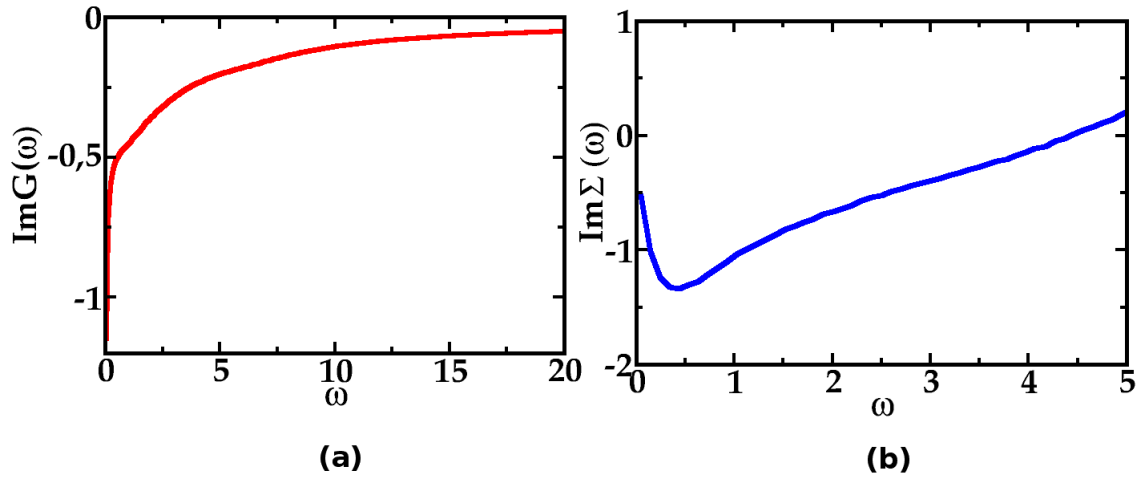


Figura 4.2: (a)Parte imaginária da função de Green característica de um sistema metálico. Neste caso  $\text{Im}G(0) \neq 0$  (b) Parte imaginária da autoenergia, nesta caso  $\text{Im}\Sigma(0) = 0$ . Os dois casos foram feitos para uma temperatura  $T = 0.01298D$  com  $U = 2.213D$

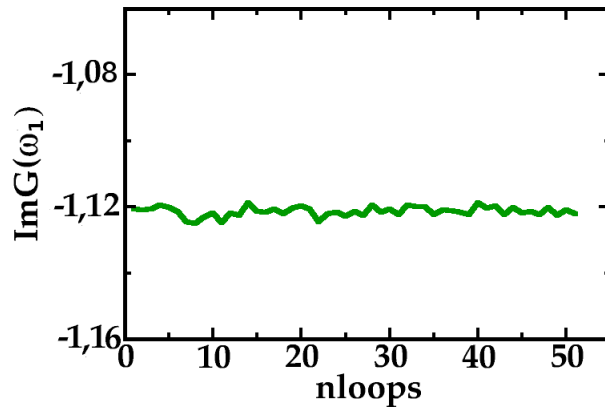


Figura 4.3: Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações para  $T = 0.01298D$ ,  $U = 2.213D$ , no caso metálico.

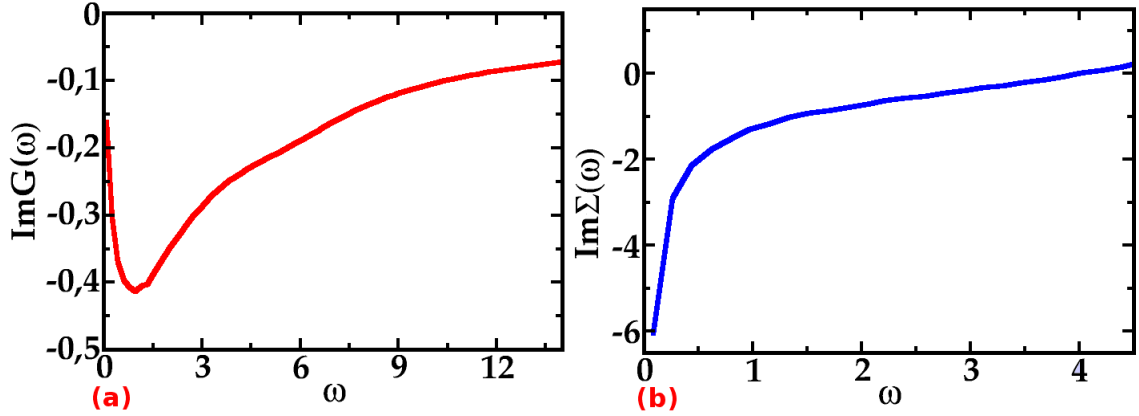


Figura 4.4: Comportamento isolante: (a) Parte imaginária da função de Green em função da frequência. (b) Autoenergia em função da frequência para  $T = 0.01298D$  e  $U = 2.313D$

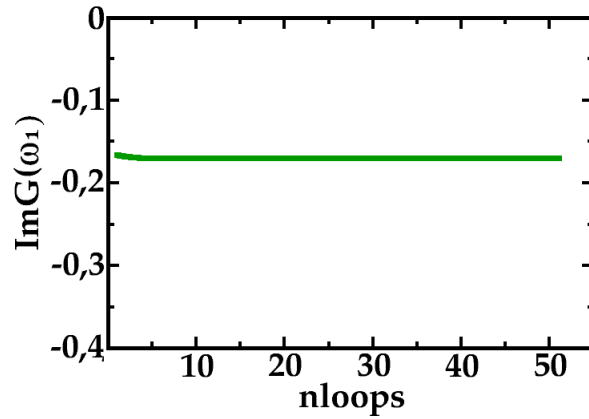


Figura 4.5: Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara onde  $T = 0.01298D$ ,  $U = 2.313D$ , para o caso isolante.

## 4.1 Transição de Mott

Um dos objetivos deste trabalho é observar a transição de Mott entre isolante paramagnético e metal paramagnético. O primeiro que deve ser feito é preparar o sistema como metal ou isolante de maneira que para um valor inicial  $U_0$  em cada um dos casos são encontradas a parte imaginária da função de Green, a autoenergia e o comportamento da primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações, todos convergidos, como nas figuras (4.2-4.5). O próximo valor a ser analisado corresponde a  $U_1 = U_0 + \Delta U$  (indo de metal para isolante) ou  $U_1 = U_0 - \Delta U$  (indo de isolante a metal) com  $\Delta U = 0.008D$ , o qual é resolvido usando como entrada os resultados obtidos para  $U_0$ . Em seguida, para este novo valor são encontradas as soluções do sistema e novamente são usadas como entrada para o próximo valor  $U_2 = U_1 + \Delta U$  (indo de metal a isolante) ou  $U_2 = U_1 - \Delta U$  (indo de isolante a metal). O procedimento continua desta maneira até se encontrar os valores  $U_{c1}$  ou  $U_{c2}$  nos quais a solução da fase anterior não é mais estável. Estas são as linhas espinoidais. Os valores de  $U_{c1}$  e  $U_{c2}$  definem as fronteiras da região de coexistência, onde as soluções para um valor de  $U$  vindo do isolante apresenta comportamento isolante, e para o mesmo valor de  $U$ , se o sistema foi preparado como metal, apresenta comportamento metálico, conforme mostrado na figura (4.6). Portanto, nesta região temos as duas soluções (metálica e isolante). Isto é importante porque este é justamente o critério adotado para se determinar quando um valor de  $U$  está dentro da região de coexistência. Na figura (4.6) temos a parte imaginária da função de Green para  $U = 2.2296D$  apresentando comportamento isolante e metálico com  $T = 0.02363D$ . A consequência para a parte imaginária da função de Green na primeira frequência de Matsubara está no fato de que para o valor de  $U$  dentro da região de coexistência pode apresentar valores convergidos diferentes como é observado na figura (4.6a).

## Região de coexistência

$$U=2.2296D, T=0.02363D, W=0$$

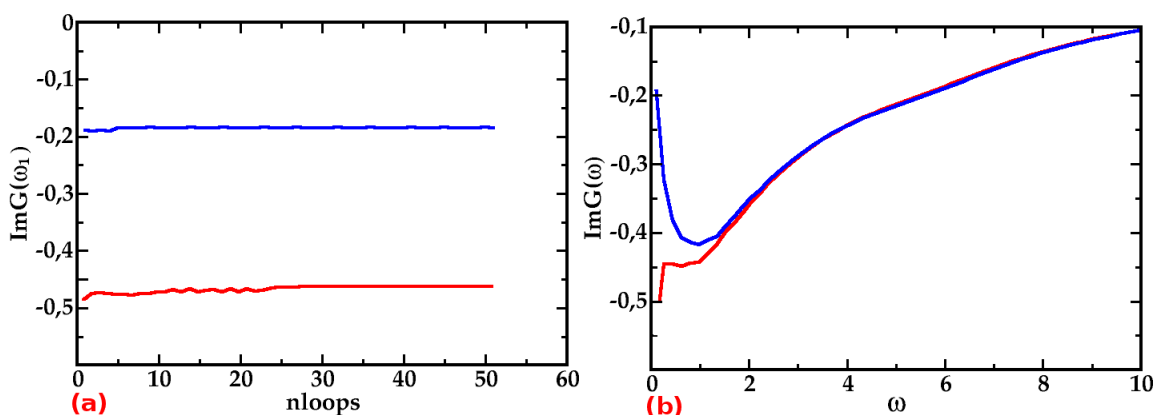


Figura 4.6: a) Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações, para  $U = 2.2296D$  e  $T = 0.02363D$ . A linha azul descreve o caso no qual o sistema é preparado inicialmente como isolante, e a linha vermelha corresponde ao caso no qual temos o sistema preparado como metal. Dessa maneira para qualquer valor de  $U$  dentro da região de coexistência devem ser encontradas as duas soluções bem convergidas. b) Para um valor de  $U$  dentro da região de coexistência é encontrada a parte imaginária da função de Green em função da frequência apresentando comportamento como metal (curva vermelha) e como isolante (curva azul).

## Fora da região de coexistência

$$U=2.2878D, T=0.02363D, W=0$$

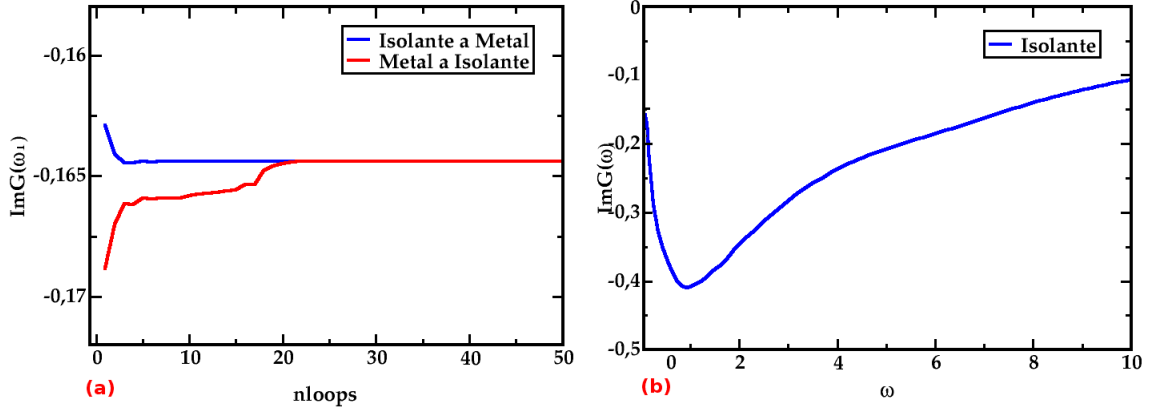


Figura 4.7: Para  $U = 2.2878D$  com  $T = 0.02363D$ , fora da região de coexistência, independentemente de se o sistema inicialmente foi preparado como isolante ou como metal a solução obtida corresponde à solução isolante.

Fora da região de coexistência, independentemente de se o sistema foi preparado inicialmente como metal ou isolante, as soluções vão dar conta unicamente de um caráter ou metálico ou isolante, como é mostrado na figura (4.7), onde foi analisado o caso particular em que  $U = 2.2878D$  para  $T = 0.02363D$ . Neste caso, a parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara nos dois casos converge para o mesmo valor sendo a curva vermelha correspondente ao caso no qual o sistema inicialmente foi preparado como metal e a curva azul está associada com o caso contrário. A parte imaginária da função de Green em função da frequência apresenta unicamente comportamento isolante, como se observa na figura (4.7).



### 4.1.1 Construção da curva de histerese

Para construir a curva de histerese devem ser identificados os valores de  $U$  nos quais as soluções metálica e isolante coexistem. Para cada um dos valores de  $U$  é tomado o valor convergido da função de Green para a primeira frequência de Matsubara  $ImG(\omega_1)$  para as duas temperaturas,  $T = 0.01298D$  e  $T = 0.02363D$ . Nas figuras (4.8) e (4.9), são apresentados os gráficos da parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de loops para  $T = 0.01298D$  no sistema sem desordem. Na figura (4.8) o sistema inicialmente é preparado como metal. Encontra-se que a transição de metal a isolante ocorre em  $U_{c2} = (2.317 \pm 0.003)D$ . Na figura (4.9) o sistema inicialmente é preparado como isolante e apresenta transição de isolante a metal em  $U_{c1} = (2.250 \pm 0.003)D$ . Para  $T = 0.02363D$  e  $W = 0$  preparando o sistema inicialmente como metal como na figura (4.10), encontra-se que  $U_{c2} = 2.267D \pm 0.003D$ . Se inicialmente temos um isolante, o valor da transição de isolante a metal é  $U_{c1} = (2.225 \pm 0.003)D$  como pode-se ver na figura (4.11). A curva de histerese para as duas temperaturas está na figura (4.12). Na figura (4.13) temos o diagrama de fases  $T \times U$ .

No artigo de Oudovenko [27] é feito um estudo da região de coexistência para o modelo de Hubbard com semipreenchimento, o modelo de Monte Carlo Quântico foi usado para resolver as equações da Teoria Dinâmica de Campo Médio. Foram encontradas as linhas espinoidais da transição metal-isolante de Mott entre  $2 < U < 3$ , como na figura (4.14) e o ponto crítico de segunda ordem perto de  $T_c = 0.025$ . Observase que a uma concordância na forma que apresenta o diagrama de fase para as temperaturas estudadas nesta tese. A região de coexistência que nos encontramos esta dentro do rango de valores que foram obtidos para o modelo estudado por Oudovenko.

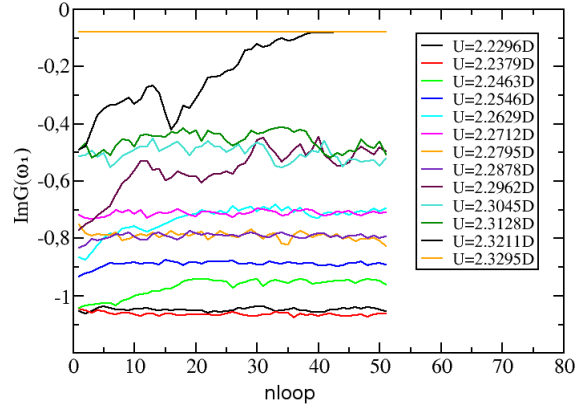


Figura 4.8: Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações para  $T = 0.01298D$ . O sistema foi inicialmente preparado como metal. A transição de Mott ocorre em  $U_{c2} = (2.317 \pm 0.003)D$

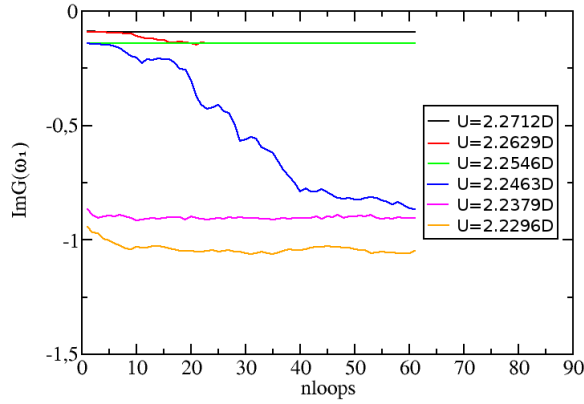


Figura 4.9: Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara, quando  $T = 0.01298D$ . O sistema inicialmente é preparado como isolante e a transição de Mott ocorre em  $U_{c1} = (2.250 \pm 0.003)D$

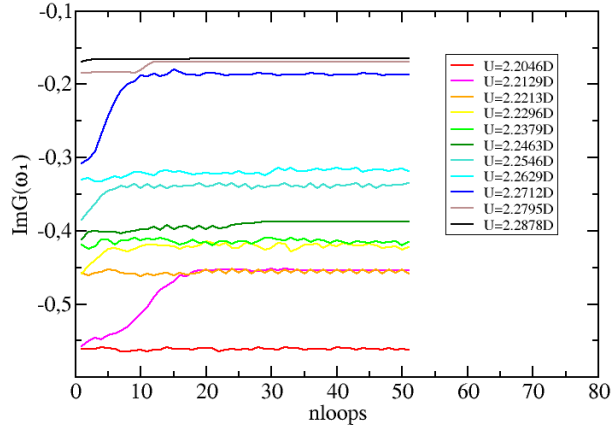


Figura 4.10: Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função de número de loops para  $T=0.02363D$ , quando o sistema é inicialmente preparado como metal. É encontrado  $U_{c2} = (2.267 \pm 0.003)D$ .

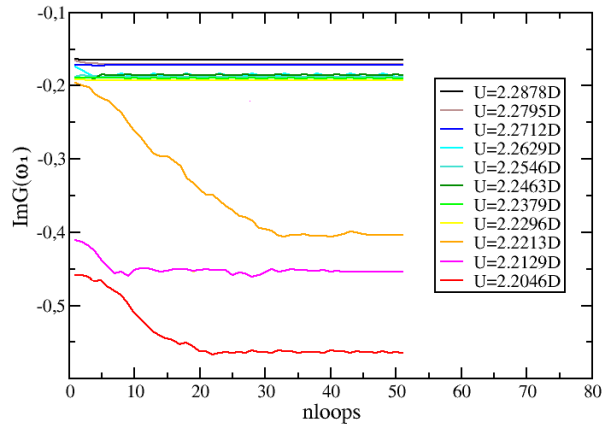


Figura 4.11: Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função de número de loops para  $T=0.02363D$ , quando o sistema inicialmente foi preparado como isolante, sendo  $U_{c1} = (2.225 \pm 0.003)D$ .

# Curvas de histerese

$W=0$

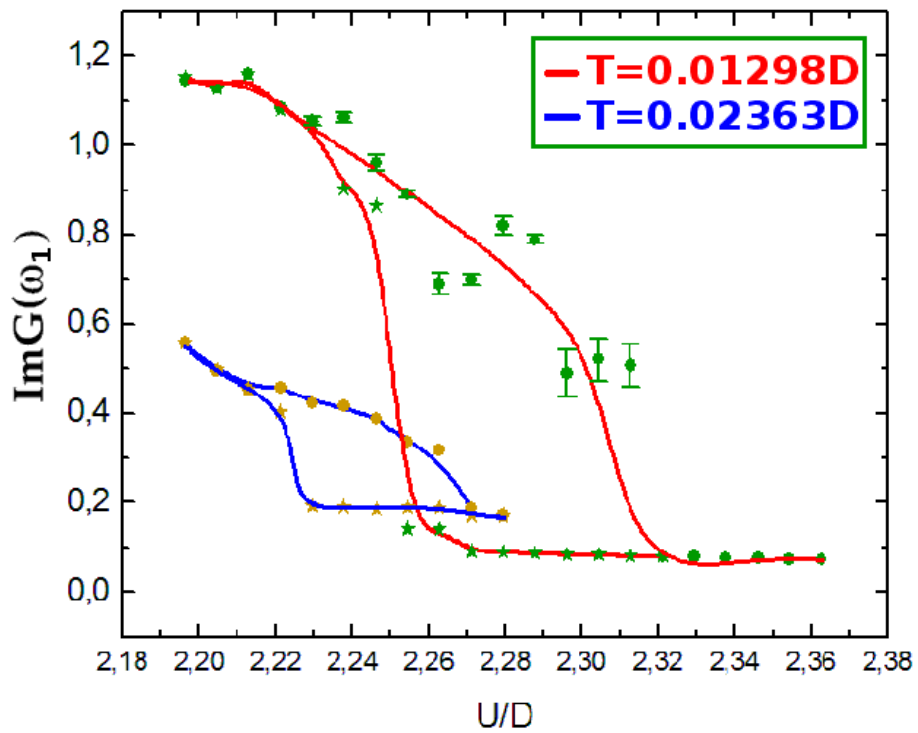


Figura 4.12: Curva de histerese para  $T = 0.01298D$  (curva vermelha), onde  $U_{c1} = (2.250 \pm 0.003)D$  e  $U_{c2} = (2.317 \pm 0.003)D$ . Se  $T = 0.02363D$ , que corresponde à curva azul, temos  $U_{c1} = (2.225 \pm 0.003)D$ ,  $U_{c2} = (2.267 \pm 0.003)D$ .

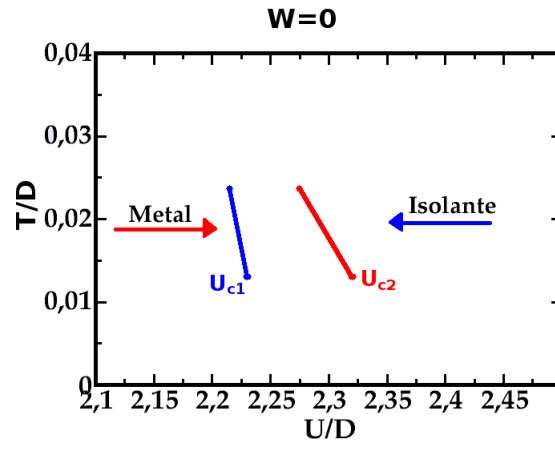


Figura 4.13: Diagrama de fases  $T \times U$ . Neste caso são mostrados os valores de  $U_{c1}$  e  $U_{c2}$ , para as duas temperaturas estudadas.

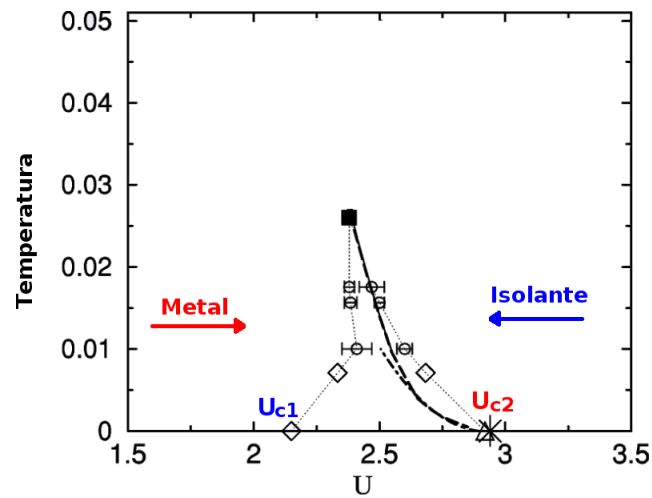


Figura 4.14: Diagrama de fases calculado por Oudovenko et al. [27], os resultados representados por círculos foram obtidos usando Monte Carlo Quântico para resolver as equações da TDCM.

## 4.2 Caso desordenado

Estamos interessados em ver como a desordem influencia a transição metal-isolante de Mott. Em particular, queremos ver como são modificados as linhas espinodais<sup>1</sup> encontradas no caso limpo para  $T = 0.01298D$  e  $T = 0.02363D$ .

Vamos introduzir desordem no Hamiltoniano de Hubbard, pela introdução de variáveis aleatórias para a energia por sítio  $\epsilon_i$ , dadas por uma distribuição uniforme no intervalo  $[-W/2, W/2]$  com  $W = 0.52D$ , de modo que

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - \sum_{\ll i,j \gg \sigma} t^* (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{i,\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}, \quad (4.2)$$

onde  $\langle i, j \rangle$  denota primeiros vizinhos e  $\ll i, j \gg$ , segundos vizinhos. O valor de desordem é pequeno porque se a desordem for muito grande não se pode observar a transição e a região de coexistência, nas temperaturas estudadas.

### 4.2.1 Sistema em $T=0.02363D$

Para estudar a transição de Mott, vamos acompanhar a evolução da primeira frequência de Matsubara. Serão feitas análises do sistema, para diferentes valores de  $U$ , indo de isolante para metal e de metal para isolante. É apresentado o comportamento da função  $ImG(\omega_1)$  na região de coexistência e fora da região de coexistência. A curva de histerese nesta temperatura é comparada com aquela obtida no caso limpo.

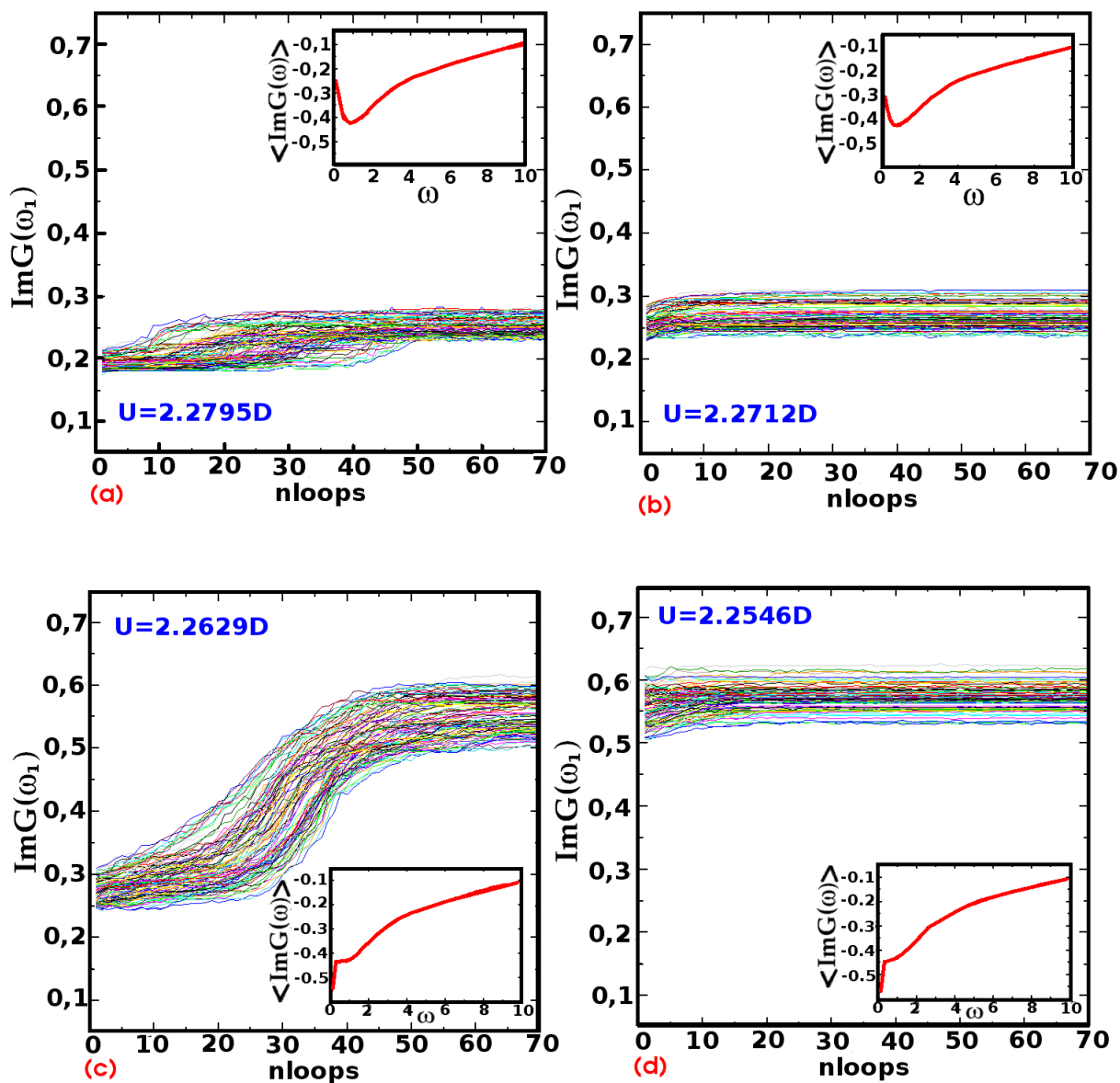


Figura 4.15: Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara, para todos os sítios da rede de  $10 \times 10$ . O comportamento da média geométrica da parte imaginária da função de Green é apresentada no gráfico inserido. O sistema está evoluindo de isolante a metal. Isto está relacionado com a diminuição do valor de  $U$ . Estima-se que  $U_{c1} = 2.267 \pm 0.004D$  <sup>51</sup>

## Transição de isolante para metal

São apresentados nesta seção quatro casos, onde os valores de  $U$  de um caso para outro diferenciam de  $\Delta U = 0.008D$ . Cada um dos sítios apresenta um comportamento diferente para qualquer um dos valores de  $U$  estudados, como é observado nos gráficos (4.15). Neste caso temos 100 curvas diferentes da parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações. Além de  $ImG(\omega_1)$  na figura (4.15), para cada valor de  $U$ , é calculada a média geométrica da parte imaginária da função de Green como função da frequência de Matsubara (gráfico inserido).

Quando  $U = 2.2795D$ , a parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara é inferior a 0.3. Os valores de  $ImG(\omega_1)$  na figura (4.15.a) estão no limiar da transição de Mott. Como se espera, a média geométrica da parte imaginária da função de Green tem comportamento típico de sistemas isolantes. Para  $U = 2.2712D$  também observamos um comportamento isolante, contudo neste caso as curvas de  $ImG(\omega_1)$  estão ligeiramente mais próximas da região de transição, como se pode observar na figura (4.15.b).

Para  $U = 2.2629D$  é observado um salto de  $ImG(\omega_1)$ , quando o número de iterações aumenta. Este comportamento representa a transição de isolante para metal, como é observado na figura (4.15.c). A média geométrica da parte imaginária da função de Green em função da frequência já apresenta comportamento característico de um metal.

No gráfico (4.15.d) foi utilizado o valor de  $U = 2.2546D$ . O sistema nesse caso é metálico, com  $ImG(\omega_1) \geq 0.5$ .

O comportamento de  $ImG(\omega_1)$  para cada sítio da rede e para cada valor de  $U$  é

---

<sup>1</sup>linhas definidas pelos valores de  $U_{c1}$  e  $U_{c2}$



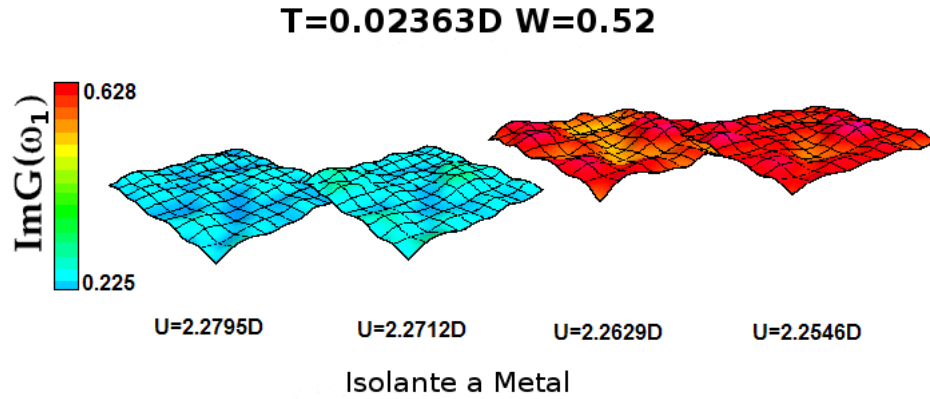


Figura 4.16: Evolução do sistema de isolante a metal. A cor azul reflete o comportamento isolante e a cor vermelha representa o comportamento metálico.

ilustrado na figura (4.16), onde foram considerados os valores convergidos<sup>2</sup>. Utilizamos nesse gráfico uma escala de cores para representar o intervalo  $0.225 < ImG(\omega_1) < 0.628$  onde os valores menores correspondem à cor azul e os valores maiores à cor vermelha. Uma variação considerável de  $ImG(\omega_1)$  é observada entre  $U = 2.2712D$  que é isolante e  $U = 2.2629D$  que é metálico. Portanto  $U_{c1} = 2.267 \pm 0.004D$ .

## Transição de metal para isolante

Foram escolhidos quatro valores de  $U$  na vizinhança da região de transição de metal para isolante de Mott.

Para  $U = 2.2712D$  foi calculada a parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara, que apresenta comportamento metálico, como se observa na figura (4.17.a), sendo  $ImG(\omega_1)$  maior que 0.45 e a média geométrica da

<sup>2</sup>neste caso o número de iterações é 70.

parte imaginária da função de Green característica do metal.

No gráfico (4.17.b) o valor da interação local estudado anteriormente foi incrementado em  $\Delta U = 0.008D$ , mas ainda observamos comportamento metálico.  $ImG(\omega_1)$  diminui levemente para este valor de  $U$  e estamos nos aproximando da região da transição de Mott.

Em  $U = 2.2879D$  é observado um salto de  $ImG(\omega_1)$ . O sistema que inicialmente tinha comportamento metálico apresenta comportamento como isolante, quando aumenta o número de iterações, como é observado na figura (4.17.c). A média geométrica da parte imaginária da função de Green apresenta comportamento isolante. Este caráter é mantido para valores de  $U$  maiores. Na figura (4.17.d) temos a solução isolante para  $U = 2.2962D$ , onde os valores obtidos para  $ImG(\omega_1)$  estão abaixo de 0.3.

Um gráfico do comportamento sítio a sítio da parte imaginária da função  $ImG(\omega_1)$  oferece uma visão geral da transição de metal a isolante de Mott, como é mostrado na figura (4.18), onde foi escolhida uma escala de cores entre  $0.16 < ImG(\omega_1) < 0.605$ . Encontramos que a transição de Mott ocorre quando  $U_{c2} = 2.284 \pm 0.004D$ .

Até agora para o caso no qual é adicionado desordem no sistema, foi possível observar a transição de Mott. Foram obtidos os valores  $U_{c1} = (2.267 \pm 0.004)D$  no qual a solução isolante deixa de existir e  $U_{c2} = (2.284 \pm 0.004)D$  em que o caráter metálico desaparece. Os valores  $U_{c1}$  e  $U_{c2}$  definem as fronteiras da região de coexistência, que será estudada no que segue.

## **Análise da região de coexistência**

Dentro da região de coexistência deve-se encontrar para um mesmo valor de  $U$  as soluções metálica e isolante bem convergidas. Esta região está constituída pelos valores  $U_{c1} < U < U_{c2}$ . Aqui será feita a análise para um caso particular,  $U = 2.2712D$ . Na

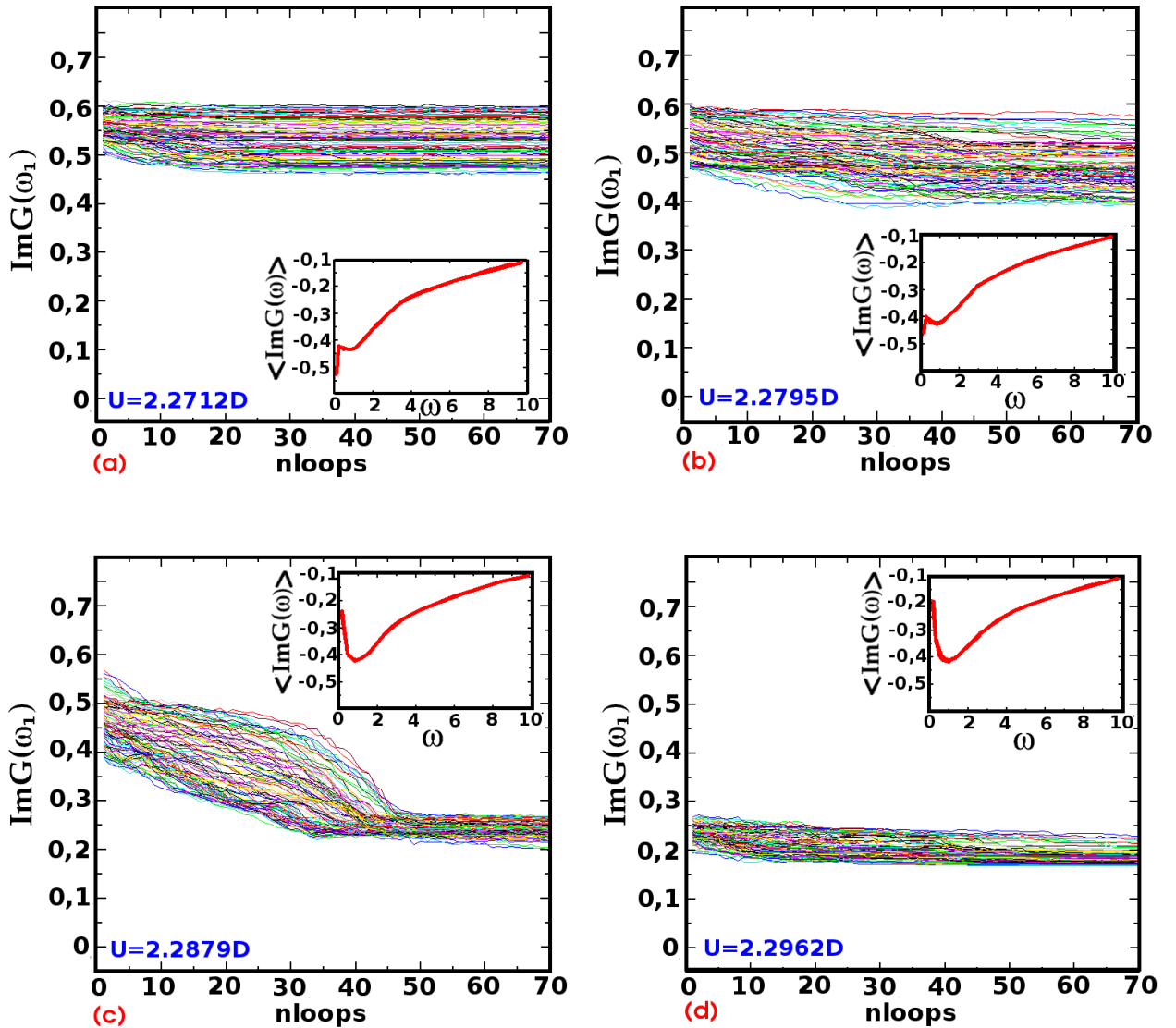


Figura 4.17: Parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara, para todos os sítios da rede  $10 \times 10$ , em função do número de iterações perto da região de coexistência. No gráfico inserido é observado o comportamento da média geométrica da parte imaginária da função de Green como função da frequência. Estima-se que  $U_{c2} = 2.284 \pm 0.004D$

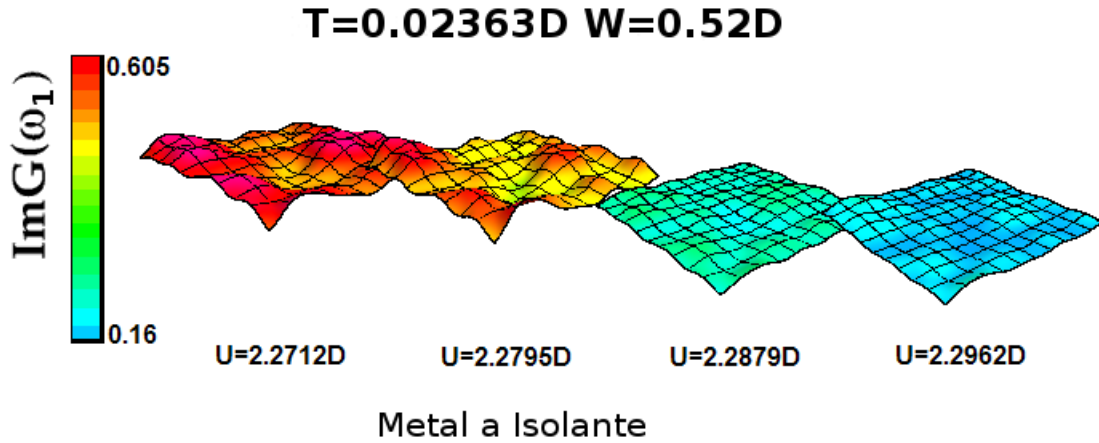


Figura 4.18: Evolução do sistema de metal a isolante. A cor azul reflete o comportamento isolante e a cor vermelha o comportamento metálico.

figura (4.19.a) está o gráfico da média geométrica da parte imaginária da função de Green, quando o sistema vai de isolante a metal (curva azul característica da solução isolante), e de metal a isolante (curva vermelha associada com a solução metálica).

A parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara é mostrada na figura (4.19.b). Os valores de  $ImG(\omega_1)$  menores que 0.3 correspondem à solução isolante. No caso metálico,  $ImG(\omega_1)$  é maior que 0.45.

Usando o resultado convergido da parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara é possível estudar o comportamento para cada sítio da rede. Os gráficos de  $ImG(\omega_1)$  são apresentados na figura (4.20). Na parte central foram colocadas as duas soluções na mesma escala. Isto permite ter uma visão geral da diferença entre os valores de  $ImG(\omega_1)$  para as duas soluções. A solução metálica é representada pela cor vermelha. Na parte esquerda da figura (4.20), são ressaltadas as variações dos sítios ao se fazer a análise em uma escala menor. Os valores de

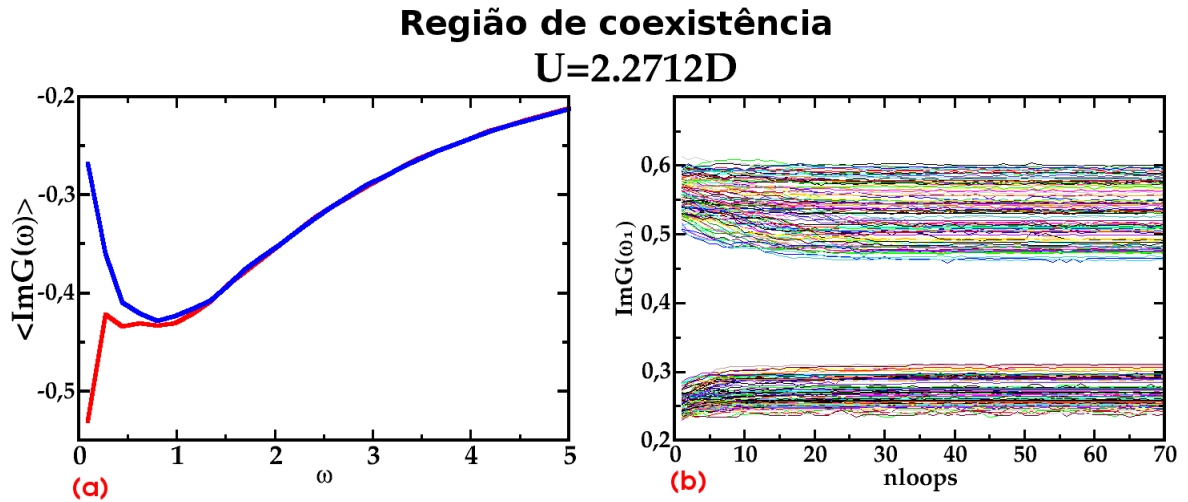


Figura 4.19: Dentro da região de coexistência, são encontradas as soluções metálica e isolante bem convergidas. a) Média geométrica da função de Green como função da frequência. A curva vermelha representa a solução metálica e a azul, o isolante. b) Para cada sítio foi calculada  $\text{Im}G(\omega_1)$ , para o mesmo valor de  $U$ .

$\text{Im}G(\omega_1)$  estão no intervalo  $0.605 < \text{Im}G(\omega_1) < 0.453$ . Do lado direito da figura (4.20) está o resultado na fase isolante. Os valores de  $\text{Im}G(\omega_1)$  estão no intervalo  $0.23 < \text{Im}G(\omega_1) < 0.316$ . Esta diferença nos valores obtidos nos dois casos para  $\text{Im}G(\omega_1)$  mostra claramente a existência das duas soluções para um mesmo valor de  $U$ .

Além do estudo da região de coexistência é interessante saber o que acontece quando os valores de  $U$  estão fora do intervalo  $U_{c1} < U < U_{c2}$ . Neste caso só uma solução deve ser encontrada, a solução isolante ou a solução metálica. Na continuação será feita uma análise para dois valores de  $U$ , um deles tendo solução metálica e outro solução isolante, fora da região de coexistência.

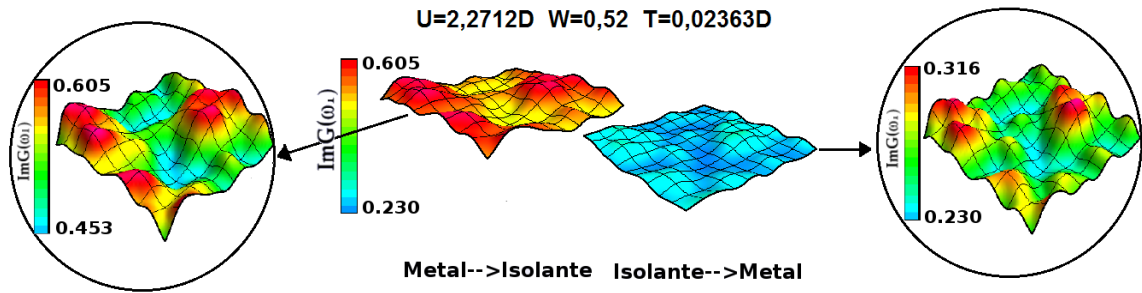


Figura 4.20: Parte central: as soluções metálica e isolante são apresentadas na mesma escala. A cor azul corresponde ao caso isolante, enquanto a cor vermelha representa o caso metálico. Nos detalhes dentro dos círculos, as soluções metálica e isolante estão numa escala que enfatiza as flutuações espaciais.

## Análise fora da região de coexistência

Fora da região de coexistência, para um valor de  $U$ , unicamente é encontrada uma solução, isolante ou metal. Para  $U = 2.3047D$ , indo de isolante para metal ou de metal para isolante, é encontrado um comportamento isolante, o qual se vê refletido na figura (4.21.a), onde temos a média geométrica da parte imaginária da função de Green com o comportamento típico do isolante. Na figura (4.21.b) foram escolhidos alguns sítios da rede, e pode-se observar que indo de isolante para metal (linha grossa) ou de metal para isolante (símbolos), as duas soluções convergem exatamente para os mesmos valores, sítio a sítio.  $ImG(\omega_1)$  está no intervalo  $0.16 < ImG(\omega_1) < 0.23$  para a solução isolante.

Para cada sítio da rede, indo de metal para isolante e de isolante para metal, é mostrada  $ImG(\omega_1)$  na figura (4.22). Observa-se que nos dois casos é obtida a mesma solução isolante. Isto significa que para cada sítio da rede obtemos os mesmos resultados, independentemente de como for preparado o sistema inicialmente.

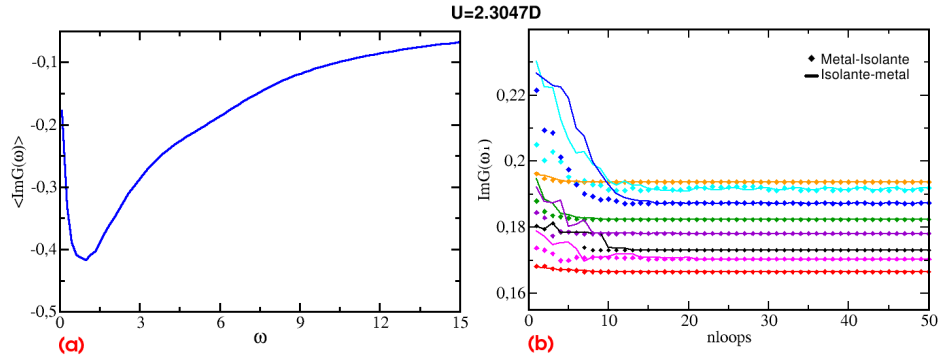


Figura 4.21: (a) Média geométrica da parte imaginária da função de Green em função da frequência e (b) parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações, fora da região de coexistência, no caso isolante.

Para  $U = 2.20546D$ , encontra-se que o sistema apresenta solução metálica. Na figura (4.23.a) é mostrada a média geométrica da parte imaginária da função de Green, que corresponde ao comportamento metálico. Ao fazer a análise de  $\text{Im}G(\omega_1)$ , para alguns sítios da rede, indo de isolante para metal ou de metal para isolante, encontra-se, como indica a figura (4.23.b), que convergem sempre para os mesmos valores. O gráfico de  $\text{Im}G(\omega_1)$  para cada sítio da rede para  $U = 2.20546D$  é apresentado na figura (4.24). Independentemente de como for preparado o sistema inicialmente, este apresenta um comportamento metálico sítio a sítio. Uma vez feita a análise fora da região de coexistência, vamos agora determinar as curvas de histerese.

## Curvas de histerese

Estamos interessados em ver como a adição de desordem modifica a curva de histerese e os valores de  $U_{c1} = (2.225 \pm 0.003)D$  e  $U_{c2} = (2.267 \pm 0.003)D$  encontrados no caso

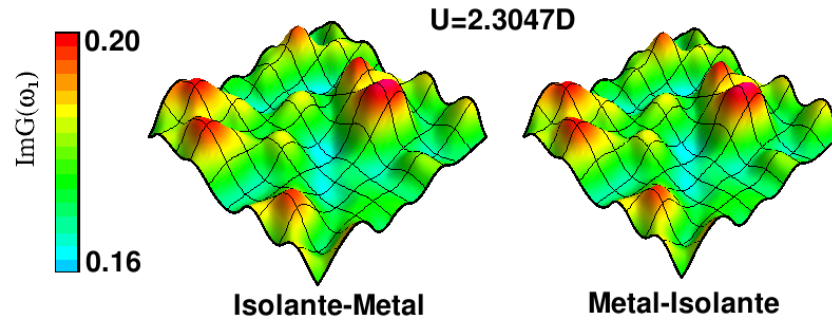


Figura 4.22: Gráfico de  $ImG(\omega_1)$  para cada sítio da rede, para os casos nos quais vamos de isolante a metal e de metal a isolante.

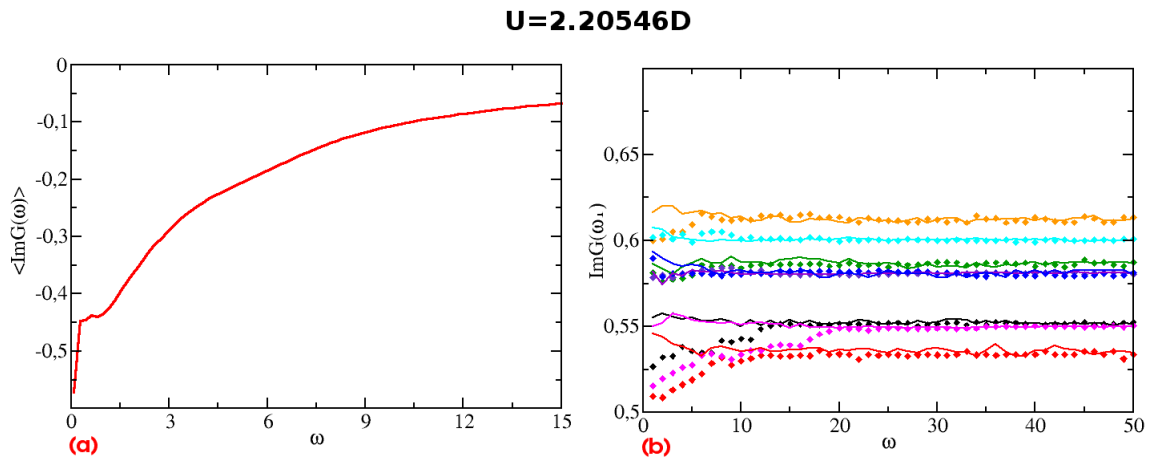


Figura 4.23: (a) Média geométrica da parte imaginária da função de Green em função da frequência e (b) parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações. Pode-se observar que independentemente de como for preparado o sistema inicialmente este converge para os mesmos valores sítio a sítio.



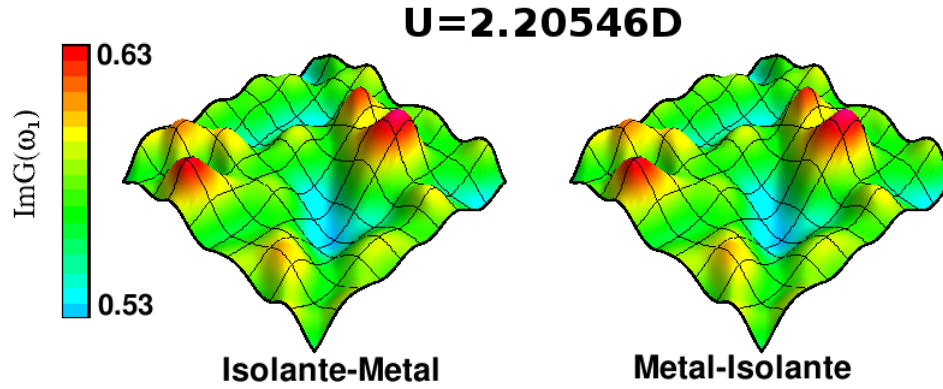


Figura 4.24: Gráfico de  $ImG(\omega_1)$  para cada sítio da rede, para os casos nos quais vamos de isolante a metal e de metal a isolante. Aqui foi encontrada uma solução metálica que coincide sítio a sítio nos dois casos.

limpo. Inicialmente, para uma dada realização de desordem, o sistema é preparado como isolante (metal) diminuindo (aumentando) o valor de  $U$  de maneira gradual, com  $\Delta U = 0.008D$ , até encontrar que o comportamento isolante (metálico) desaparece. Ao fazer o gráfico de  $ImG(\omega_1)$  como função de  $U$ , para cada sítio da rede, são obtidas as curvas de histerese da figura (4.25). Como cada sítio da rede apresenta comportamento diferente de  $ImG(\omega_1)$ , obtemos 100 curvas de histerese. Comparamos estes resultados com o obtido no caso limpo, como apresentado na figura (4.25). Observa-se que, devido à presença de desordem, os valores  $U_{c1}$  e  $U_{c2}$  são aumentados. Isto acontece porque a desordem faz com que seja mais difícil localizar os elétrons. Fisicamente, isto reflete o fato de que a desordem age como um potencial químico local que tende a dopar localmente elétrons e buracos, delocando a posição do gap. Assim, torna-se necessário um maior valor de  $U$  para que um gap maior possa conter o valor local do potencial químico.

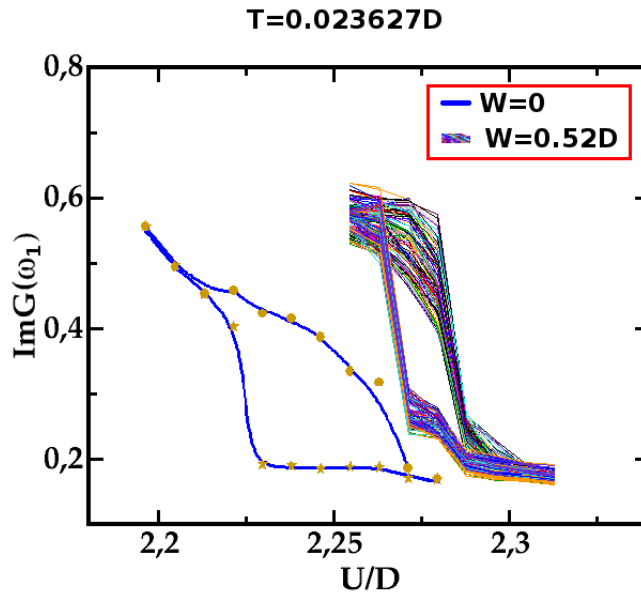


Figura 4.25: Curvas de histerese comparando o caso limpo e desordenado

Os resultados obtidos até aqui correspondem a  $T = 0.2363D$ . A pergunta que agora deve ser feita é o que acontece quando o valor de temperatura muda?.

#### 4.2.2 Sistema em $T=0.01298D$

Agora queremos fazer a análise do efeito da desordem para o caso em que a temperatura é  $T = 0.01298D$ . Em particular queremos ver como são modificadas as linhas espinoidais, encontradas no caso limpo. Para o caso em que  $W = 0.52D$ , para cada sítio da rede encontra-se um comportamento diferente de modo que são encontradas 100 curvas diferentes para  $ImG(\omega_1)$  como pode-se ver na figura (4.26), onde é apresentado o caso particular em que  $U = 2.3294D$ . Este valor está dentro da região de coexistência onde as duas soluções metálica e isolante estão presentes. Na figura

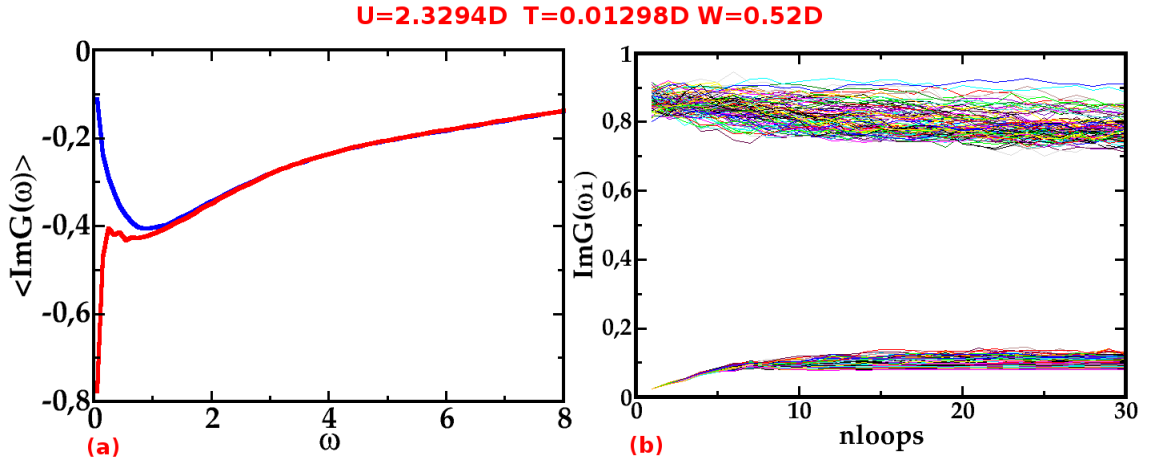


Figura 4.26: Dentro da região de coexistência, são encontradas as soluções metálica e isolante bem convergidas. a) Média geométrica da função de Green como função da frequência. A curva vermelha representa a solução metálica e a azul, o isolante. b) Para cada sítio foi calculada  $ImG(\omega_1)$ , para o mesmo valor de  $U$ .

(4.26.a) está o gráfico da média geométrica da parte imaginária da função de Green. A curva vermelha indica o comportamento metálico e a curva azul, o isolante. Na figura (4.26.b) é mostrado  $ImG(\omega_1)$  como função de interações. Temos as duas soluções: o isolante apresenta  $ImG(\omega_1) \lesssim 0.1$  e o metal  $ImG(\omega_1) \gtrsim 0.7$ . Usando o resultado da parte imágina da função de Green para a primeira frequência de Matsubara é possível estudar o comportamento para cada sítio da rede. Os gráficos de  $ImG(\omega_1)$  são apresentados na figura (4.27). Na parte central foram colocadas as duas soluções na mesma escala. Isto permite ter uma visão geral da diferença entre os valores de  $ImG(\omega_1)$  para as duas soluções. A solução metálica é representada pela cor vermelha. À direita da figura (4.27), são ressaltadas as variações dos sítios ao se fazer a análise em uma escala menor. Os valores de  $ImG(\omega_1)$  estão no intervalo  $0.72 < ImG(\omega_1) < 0.92$ .

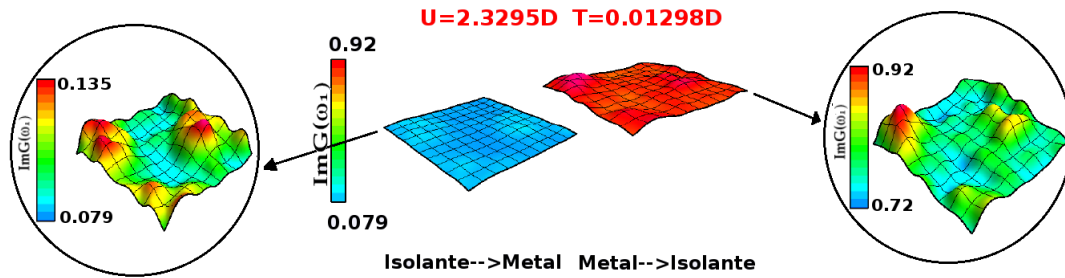


Figura 4.27: Parte central: as soluções metálica e isolante são apresentadas na mesma escala. A cor azul corresponde ao caso isolante, enquanto a cor vermelha representa o caso metálico. Nos detalhes dentro dos círculos, as soluções metálica e isolante estão numa escala que enfatiza as flutuações espaciais.

Na parte esquerda da figura (4.27) está o resultado da fase isolante. Os valores de  $ImG(\omega_1)$  estão no intervalo  $0.079 < ImG(\omega_1) < 0.135$ . Esta diferença nos valores obtidos nos dois casos para  $ImG(\omega_1)$  mostra claramente a existência das duas soluções para o mesmo valor de  $U$ . Fora da região de coexistência as soluções para cada sítio coincide de maneira individual independentemente de como for preparado o sistema inicialmente é obtida unicamente uma solução metal ou isolante. Na figura (4.28) estão os gráficos das curvas de histerese para  $T = 0.01298D$  no caso limpo e desordenado. No caso sem desordem  $U_{c1} = (2.250 \pm 0.003)D$  e  $U_{c2} = (2.317 \pm 0.003)D$ , mas na presença de desordem  $U_{c1} = (2.313 \pm 0.004)D$  e  $U_{c2} = (2.387 \pm 0.004)D$ . Portanto, a desordem faz com que os valores de  $U_{c1}$  e  $U_{c2}$  nos quais ocorre a transição de Mott aumentem.

### 4.2.3 Comparando as duas temperaturas

A partir das curvas de histerese encontradas para os casos  $T = 0.02363D$  e  $T = 0.01298D$  com desordem no sistema é obtido o gráfico da figura (4.29). Na figura

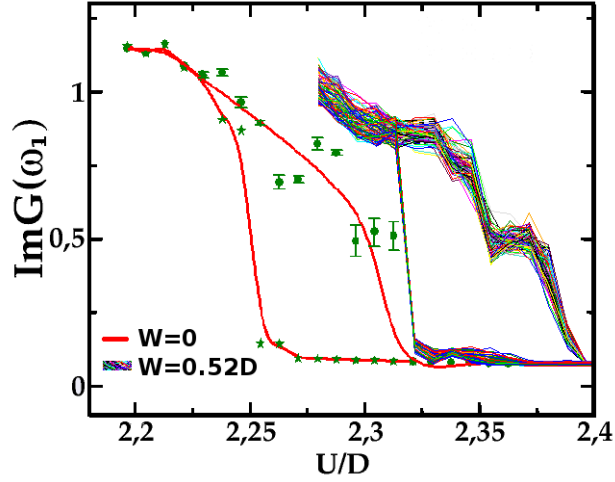


Figura 4.28: Curvas de histerese comparando o caso limpo e desordenado.

(4.30) temos o diagrama de fases  $T \times U$  para os casos com e sem desordem. Aqui novamente se ressalta que na presença de desordem as linha espinoidais movem-se para valores maiores de  $U$ . Como já se argumentamos a introdução de desordem atua no sentido de dopar portadores e metalizar o sistema, portanto é preciso um valor de  $U$  maior para haver a transição de Mott.

No artigo [28], foi analisado o diagrama de fases para a transição metal-isolante de Mott, na presença de desordem moderada, com a aproximação da Teoria Dinâmica de Campo Médio. São apresentados resultados que descrevem a evolução da região de coexistência, mostrando que a desordem geralmente reduz o seu tamanho, como pode se observar na figura (4.31). Uma outra coisa que se pode observar é que as linhas espinoidais se movem para valores maiores de  $U$ , similarmente com o que foi obtido para nossas duas temperaturas, ao adicionar desordem. Observa-se também como a desordem faz com que o valor da temperatura crítica diminua com a desordem. Assim, os resultados da TEDCM e TDCM para o diagrama de fases  $T \times U$  são similares.

# Curvas de histerese

$W=0.52D$

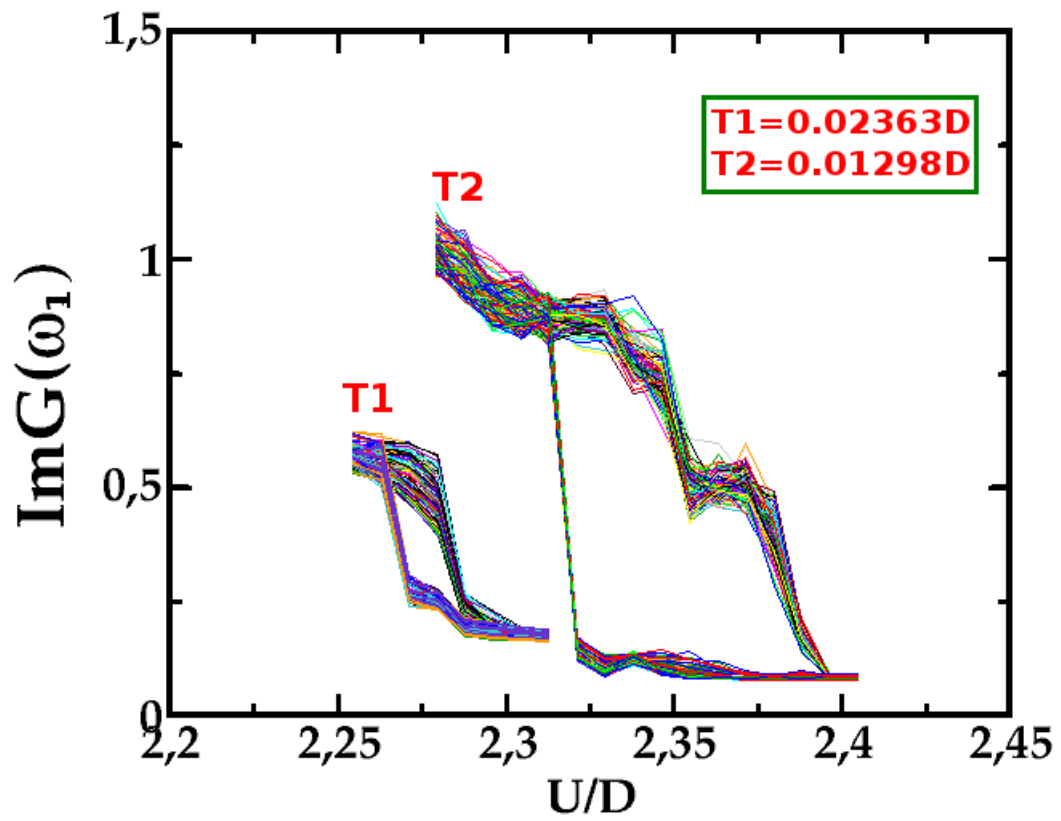


Figura 4.29: Curvas de histerese para as duas temperaturas  $T = 0.01298D$  e  $T = 0.02363D$ , com  $W = 0.52D$

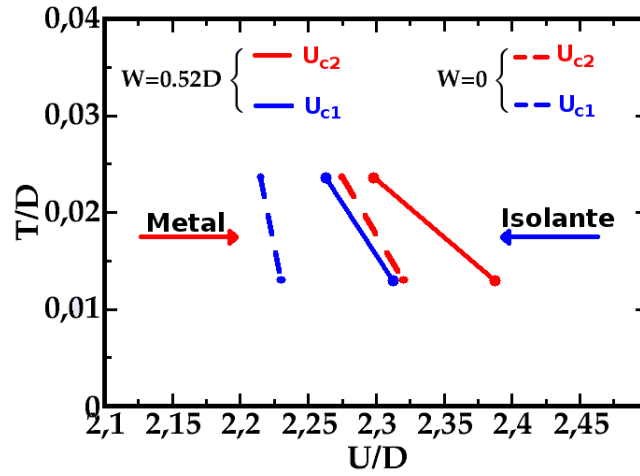


Figura 4.30: Diagrama de fases  $T \times U$  para o sistema com e sem desordem.

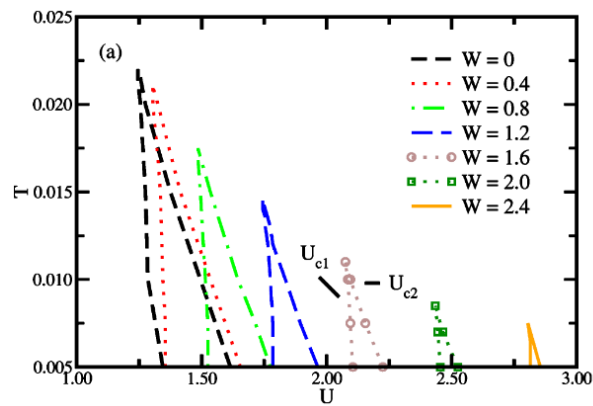


Figura 4.31: Diagrama de fases obtido para diferentes valores de desordem, através da TDCM [28].





# Capítulo 5

## Conclusões

Nesta tese foi analisado o efeito da desordem na transição metal-isolante de Mott. O problema foi estudado para o modelo de Hubbard bidimensional com “*hopping*” entre primeiros e segundos vizinhos. No caso limpo é usada a Teoria Dinâmica de Campo Médio que permite mapear o problema da rede no problema de uma impureza embebida num banho de elétrons de condução determinado de maneira auto-consistente. Quando é adicionada desordem no sistema usamos a Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio. A desordem no sistema foi introduzida colocando valores de energia diferentes para cada sítio da rede, dados por uma distribuição de probabilidade uniforme no intervalo  $[-W/2, W/2]$ , sendo  $W = 0.52D$ . Este valor de desordem foi escolhido porque permite observar a região de coexistência, a qual desaparece para desordem grande. Consideramos só uma realização de desordem. Se o número de realizações e incrementado é possível obter uma melhor estatística das quantidades locais mas isto é computacionalmente custoso. As dimensões da rede estiveram limitadas a uma rede de  $10 \times 10$  sítios. Trabalhar com redes maiores permite estudar efeitos de dimensão finita. Entretanto, isso não foi feito porque o alto custo computacional a as limitações

de tempo não permitiram.

Os problemas de uma impureza foram determinados usando o método de Monte Carlo Quântico para  $T = 0.01298D$  e  $T = 0.02363D$ . Estas duas temperaturas foram escolhidas porque queríamos garantir que ao adicionar desordem no sistema ainda seria possível observar a região de coexistência. Temperaturas menores requerem um esforço computacional maior, portanto não foram consideradas. Este trabalho é o primeiro que faz o estudo da transição metal-isolante de Mott para um sistema desordenado usando TEDCM e Monte Carlo Quântico para resolver os problemas de uma impureza. Foi paralelizado o programa na parte que resolve o problema de uma impureza para cada sítio da rede porque os cálculos da função de Green para a impureza são custosos.

Para identificar a transição de Mott, para as temperaturas acima, foi preciso acompanhar a evolução da parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função do número de iterações. O número de passos de Monte Carlo Quântico requeridos para que o sistema termalize e forneça um pequeno erro estatístico foi de 100000. Isto faz com que o nosso cálculo precise de um grande tempo computacional. Um valor pequeno de passos não permitiu obter a região de coexistência no caso limpo.

Para nosso sistema identificamos a região de coexistência onde as duas soluções, metálica e isolante, estão presentes. Para cada sítio foi possível observar as flutuações locais usando gráficos da parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em função de cada sítio no metal e no isolante. Fora da região de coexistência apenas uma solução foi obtida, metálica ou isolante.

Encontramos que adicionar desordem num sistema faz com que as linhas espinoidais que caracterizam a transição de Mott, se movimentem em direção a valores de interação maiores. Fisicamente isto reflete o fato de que a desordem tende a metalizar o sistema

localmente de modo que é preciso um valor maior para a interação local que possa fazer com que seja obtida a transição metal-isolante de Mott.

Fazer outros valores de desordem permite obter uma visão mais completa do efeito da desordem na transição metal-isolante de Mott e neste caso esperamos obter uma diminuição gradual da região de coexistência. Outros valores de temperatura podem ajudar a obter o diagrama de fases completo para diferentes valores da desordem. Nesse caso esperamos que o valor do ponto crítico diminua com o aumento do valor da desordem [28]. Entretanto, esses cálculos adicionais requerem um gasto computacional muito grande.



# Apêndice A

## Algoritmo de Hirsch-Fye

O método de Monte-Carlo Quântico para resolver o problema geral de uma impureza é devido a Hirsch e Fye [29]. Os efeitos quânticos são observados porque diferentes termos do Hamiltoniano não comutam. O Hamiltoniano que é usado nesta descrição é o Hamiltoniano de Anderson do modelo geral de uma impureza ( $H_{AIM}$ ).

$$H_{AIM} = \sum_{p,\sigma} \epsilon_p a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + \sum_{p,\sigma} V_p (a_{p\sigma}^+ d_\sigma + d_\sigma^+ a_{p\sigma}) + \epsilon_d \sum_{\sigma} d_\sigma^+ d_\sigma + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}, \quad (\text{A.1})$$

onde temos dois tipos distintos de elétrons: de condução, que ocupam estados estendidos, e elétrons localizados. O primeiro termo no Hamiltoniano representa a energia dos elétrons de condução, onde  $a_{p\sigma}$  dá conta da aniquilação de elétrons de condução, com spin  $\sigma$  e momento  $p$ . O terceiro termo representa a energia dos elétrons localizados, onde  $d_\sigma$  e  $d_\sigma^\dagger$  são os operadores de criação e aniquilação de elétrons localizados, com spin  $\sigma$ . O segundo termo representa a hibridização entre estados estendidos e localizados, sendo  $V_k$  o potencial de hibridização. O último termo representa a interação Coulombiana entre dois elétrons localizados onde,  $n_{d\sigma} = d_\sigma^\dagger d_\sigma$  é o operador número, e  $U$

o potencial de interação. Neste caso a interação de Coulomb está presente unicamente nos elétrons localizados e não nos elétrons de condução. O Hamiltoniano (A.1) pode ser escrito como uma soma de dois termos

$$H = H^0 + H^i, \quad (\text{A.2})$$

onde  $H^0$  apresenta termos de segunda ordem nos operadores fermiônicos

$$H^0 = \sum_{p \geq 2, \sigma} \epsilon_p a_{p\sigma}^\dagger a_{p\sigma} + \sum_{p \geq 2, \sigma} V_p (a_{p\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger a_{p\sigma}) + (\epsilon_d + \frac{U}{2}) \sum_{\sigma} n_{d\sigma}, \quad (\text{A.3})$$

e  $H^i$  é o termo de interação

$$H^i = U [n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} - \frac{1}{2} (n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow})]. \quad (\text{A.4})$$

O intervalo de tempo imaginário  $[0, \beta]$ , agora é discretizado em  $L$  intervalos, sendo  $\tau_l = l\Delta\tau$  com  $l = 1, \dots, L$  e  $\Delta\tau \equiv \beta/L$ . A função de partição para este Hamiltoniano tem a forma discretizada aproximada

$$Z \cong \text{Tr} e^{-\beta H} = \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau [H^0 + H^i]} \quad (\text{A.5})$$

Usando a fórmula de Trotter [22]:

$$\exp[-\Delta\tau (H^0 + H^i)] \simeq \exp(-\Delta\tau H^0) \exp(-\Delta\tau H^i) + \mathcal{O}(\Delta\tau^2), \quad (\text{A.6})$$

a função de partição discretizada é

$$Z \simeq Z^{\Delta\tau} = \text{Tr} \prod_{l=1}^L \exp(-\Delta\tau H^0) \exp(-\Delta\tau H^i) \quad (\text{A.7})$$

Usando a transformação discreta de Hubbard-Stratonovich para desacoplar a interação quártica em  $H^i$  [30].

$$e^{-\Delta\tau H^i} = \frac{1}{2} \sum_{s \pm 1} e^{\lambda s (n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})}, \quad (\text{A.8})$$

sendo  $\cosh\lambda = \exp(\Delta\tau U/2)$ ,

$$\begin{aligned} Z &= Tr \prod_{l=1}^L [e^{-\Delta\tau H^0} \frac{1}{2} \sum_{s_l = \pm 1} e^{\lambda s_l (n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})}], \\ &= \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} Tr \prod_{l=1}^L [e^{-\Delta s_l H^0} e^{\lambda s_l (n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})}]. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Neste caso  $\{s\}$  são as distintas configurações de variáveis de Ising  $s_l = \pm 1$  para cada intervalo em  $L$ . Podemos reescrever a função de partição em termos do operador  $V^\sigma(l) = \sum_{ii'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i'\sigma} V_{ii'}^\sigma(l)$  onde  $V_{ii'}^\sigma(l) = \frac{1}{\Delta\tau} \lambda \sigma s_l \delta_{ii'}$ , neste caso temos

$$Z^{\Delta\tau} = \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} Tr \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H^0} e^{V^\sigma(l)}. \quad (\text{A.10})$$

E definindo  $e^{-\Delta\tau h^\sigma(l)} = e^{-\Delta\tau H^0} e^{V^\sigma(l)}$  com

$$H^\sigma(l) = \sum_{ij} h_{ij}^\sigma(l) c_i^\dagger c_j. \quad (\text{A.11})$$

Na representação diagonal

$$-\Delta\tau \mathcal{H}^\sigma(l) = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i \quad (\text{A.12})$$

e

$$Tr \left[ \prod_{l=1}^L \exp(-\Delta\tau H^\sigma(l)) \right] = Tr [\exp(-\Delta\tau \mathcal{H}^\sigma(l))], \quad (\text{A.13})$$

$$= Tr \left[ \exp\left(\sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i\right) \right], \quad (\text{A.14})$$

$$= \sum_{N_p=1n_1\dots n_N} \sum_i \delta\left(\sum_i n_i - N_p\right) \times \langle n_1\dots n_N | e^{\sum_i \epsilon_i n_i} | n_1, \dots, n_N \rangle; \quad (\text{A.15})$$

onde  $|n_1, \dots, n_N\rangle$ , são os auto-estados de  $\mathcal{H}^\sigma(l)$  na representação do número de ocupação. A soma sobre todos possíveis números  $N_p$  pode ser transformada e eliminar a função  $\delta$ .

$$\text{Tr} \left[ \prod_{l=1}^L \exp(-\Delta\tau H^\sigma(l)) \right] = \prod_{i=1}^N \sum_{n_i} e^{\epsilon_i n_i}, \quad (\text{A.16})$$

$$= \prod_{i=1}^N (1 + e^{\epsilon_i}), \quad (\text{A.17})$$

$$= \det[1 + \exp(-\Delta\tau H^\sigma(l))], \quad (\text{A.18})$$

$$= \det[1 + \prod_l \exp[-\Delta\tau h^\sigma(l)]], \quad (\text{A.19})$$

$$= \det[1 + B_1^\sigma \dots B_L^\sigma]. \quad (\text{A.20})$$

com  $B_l^\sigma = e^{-\Delta\tau H^0} e^{V^\sigma(l)}$  de maneira que

$$\begin{aligned} Z^{\Delta\tau} &= \frac{1}{2^L} \sum_s \prod_{\sigma, \uparrow, \downarrow} \det[1 + B_1^\sigma \dots B_L^\sigma], \\ &= \frac{1}{2^L} \sum_s \prod_{\sigma, \uparrow, \downarrow} Z_{s_1 \dots s_L}^\Delta. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

onde  $Z_{s_1 \dots s_L}^\Delta = \det[1 + B_1^\sigma \dots B_L^\sigma]$ , sendo  $Z_{s_1 \dots s_L}^\Delta$  a função de partição para uma dada configuração de spin de Ising.

A função de Green associada a  $Z^{\Delta\tau}$  é definida a partir do operador evolução temporal

$$U_{\Delta\tau} = \exp(-\Delta\tau H^0) \exp(-\Delta\tau H^I) \quad (\text{A.22})$$

com um operador evolução em cada intervalo de tempo

$$g_{p_1, p_2}^{\Delta\tau}(\tau_1, \tau_2) = \langle \text{Tr} c_{p_1}(\tau_1) c_{p_2}^\dagger(\tau_2) \rangle, \quad (\text{A.23})$$

$$= \frac{1}{Z^{\Delta\tau}} \text{Tr} [e^{-\beta H} c_{p_1}(\tau_1) c_{p_2}^\dagger(\tau_2)]. \quad (\text{A.24})$$



A função de Green para uma dada configuração de variáveis de spin é da forma

$$g_{p_1, p_2}^{\Delta\tau}(\tau_{l_1}, \tau_{l_2}) = \frac{1}{Z_{s_1 \dots s_L}^{\Delta\tau}} \text{Tr}[\text{Tr} c_{p_1}(\tau_{l_1}) c_{p_2}^\dagger(\tau_{l_2}) \prod_{l=1}^N \prod_{\sigma, \uparrow, \downarrow} e^{-\Delta\tau H^0} e^{V^\sigma(l)}] \quad (\text{A.25})$$

A função de Green total é da forma

$$g_{p_1, p_2}^{\Delta\tau}(\tau_{l_1}, \tau_{l_2}) = \frac{\sum_s g_{p_1, p_2, s}^{\Delta\tau}(\tau_{l_1}, \tau_{l_2}) Z_{s_1 \dots s_L}^{\Delta\tau}}{\sum_s Z_{s_1 \dots s_L}^{\Delta\tau}} \quad (\text{A.26})$$

A função de partição  $Z_{s_1, \dots, s_L}^{\Delta\tau}$ , para uma dada configuração de variáveis de spin pode ser escrita como  $Z_{s_1, \dots, s_L}^{\Delta\tau} = \det \mathcal{O}_{s_1, \dots, s_L}$  onde

$$\mathcal{O}_{s_1, \dots, s_L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & B(s_L) \\ -B(s_1) & 1 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -B(s_2) & 1 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 1 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & -B(s_{l-1}) & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.27})$$

Neste caso  $B(\sigma s) = \exp[-\Delta\tau H^0] \exp[V^\sigma(s)]$ , e  $\mathcal{O}$  escrita como uma matriz  $L \times L$  de matrizes de  $n_s \times n_s$ , da maneira como está definida a matriz  $\mathcal{O}$ , permite ter  $g_{s_1 \dots s_L}^{\Delta\tau} = \mathcal{O}_{s_1, \dots, s_L}^{-1}$ .

O fato crucial notado por Hirsch e Fye é que duas configurações diferentes de spin de Ising  $(s_1, \dots, s_L)$  e  $(s'_1, \dots, s'_L)$ , estão relacionadas pela equação de Dyson.

A matriz em (A.27) pode ser escrita da seguinte maneira

$$\mathcal{O} = (Y + e^{\Delta\tau V}) e^{-\Delta\tau V}, \quad (\text{A.28})$$

onde  $Y e^{-\Delta\tau V}$  é a matriz  $\mathcal{O}_{s_1, \dots, s_L}$ , com zeros na diagonal.  $Y$  é uma matriz que não

depende das variáveis de Ising. Para uma configuração de Ising  $(s'_1, \dots, s'_L)$

$$\mathcal{O}' = (Y + e^{\Delta\tau V'})e^{-\Delta\tau V'}, \quad (\text{A.29})$$

$$= [Y + e^{\Delta\tau V} + (e^{\Delta\tau V'} - e^{-\Delta\tau V})]e^{-\Delta\tau V}e^{-\Delta\tau(V'-V)}, \quad (\text{A.30})$$

$$= [\mathcal{O} + (e^{-\Delta\tau(V-V')} - 1)]e^{-\Delta\tau(V'-V)}, \quad (\text{A.31})$$

$$= \mathcal{O}[1 + g(e^{-\Delta\tau(V-V')} - 1)]e^{-\Delta\tau(V'-V)}. \quad (\text{A.32})$$

De modo que

$$\begin{aligned} g' &= \mathcal{O}^{-1} = e^{\Delta\tau(V'-V)}[1 + g(e^{\Delta\tau(V'-V)} - 1)]^{-1}\mathcal{O}^{-1}, \\ g' &= e^{\Delta\tau(V'-V)}[1 + g(e^{\Delta\tau(V'-V)} - 1)]^{-1}g, \\ g &= [1 + g(e^{\Delta\tau(V'-V)} - 1)]e^{-\Delta\tau(V'-V)}g', \\ g &= e^{-\Delta\tau(V'-V)}g' + g(1 - e^{-\Delta\tau(V'-V)})g', \\ g' &= g' + g - e^{-\Delta\tau(V'-V)}g' - g(1 - e^{-\Delta\tau(V'-V)})g', \\ g' &= g + (g - 1)(e^{(\mathbf{V}' - \mathbf{V})} - 1)g'. \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Esta equação permite descrever o problema de uma impureza e relaciona as funções de Green  $g$  e  $g'$  via o operador de projecção no sítio  $d$ :

$$[\exp(-\Delta\tau(V' - V)) - 1]_{\{i_l, i_s\}, \{i'_l, i'_s\}} \alpha \delta_{i_l, i'_l} \delta_{i_s, 1} \delta_{i'_s, 1}. \quad (\text{A.34})$$

A presença deste operador de projecção permite integrar nos graus de liberdade do banho. Como consequência da equação de Dyson as equações para a função de Green para o sítio  $d$  estão relacionadas com os demais sítios da rede.

Quando  $i_s = 1$ ,  $i'_s = 1$  a equação (A.33) é válida. Então as funções de Green para o sítio  $d$   $G_{s_1, \dots, s_L}^{\Delta\tau}$  satisfazem

$$G' = G + (G - 1)(e^{V' - V} - 1)G', \quad (\text{A.35})$$

que é uma matriz  $L \times L$ . Uma das aplicações da equação de Dyson é no cálculo da função de Green da impureza, caso no qual  $G' = G_{s_1, s_2, \dots, s_L}$ ,  $G = \mathcal{G}_0$ .

$G'_{s'_1, \dots, s'_L}$  para uma configuração de spin  $(s'_1, \dots, s'_L)$  pode obter-se pela inversão de uma matriz  $\mathcal{A}$ , definida como

$$\mathcal{A}G' = G, \quad (\text{A.36})$$

onde

$$\mathcal{A} = 1 + (1 - G)[e^{V' - V} - 1]. \quad (\text{A.37})$$

No caso especial no qual duas configurações diferem só em um valor de spin a forma da matriz  $\mathcal{A}$  é

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \mathcal{A}_{1l} & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \mathcal{A}_{2l} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \mathcal{A}_{ll} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \mathcal{A}_{Ll} & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.38})$$

Neste caso  $\det \mathcal{A} = \mathcal{A}_{ll} = 1 + (1 - G_{ll})[\exp(V'_l - V_l) - 1]$ .

Expandindo  $\mathcal{A}^{-1}$  podemos encontrar que:

$$(\mathcal{A}^{-1})_{lk} = 0; \quad \text{para}; \quad k \neq l \quad (\text{A.39})$$

De maneira que:

$$G'_{l_1, l_2} = G_{l_1, l_2} + (G - 1)_{l, l} e^{V'_l - V} (\mathcal{A}_{ll})^{-1} G_{ll} \quad (\text{A.40})$$

para unicamente um valor de spin. Isto constitui a fórmula especial de Shermann-Morri [31] A partir da fórmula (A.33) podemos mostrar que:

$$\frac{\det \mathcal{O}'}{\det \mathcal{O}} = \frac{\det G}{\det G'} = \det \mathcal{A} = 1 + (1 - G_{ll}[\exp(V'_l - V_l) - 1]). \quad (\text{A.41})$$

Fisicamente a função de Green é calculada como uma média das funções de Green que dependem do spin.

Para obter a função de Green  $G_\sigma$ , temos que somar sobre todas as possíveis configurações de Ising

$$G_\sigma = \frac{\sum_{\{s\}} G_\sigma^{\{s\}} Z[\{s\}]}{\sum_{\{s\}} Z[\{s\}]} \quad (\text{A.42})$$

Como o número de configurações é muito grande, usando o método de Monte Carlo, podem-se escolher as configurações mais prováveis. Para fazer isso consideramos que inicialmente temos uma configuração de spin zero  $\{s\} = (s_1 = s_2 = \dots s_L = 0)$  para a função de Green não interagente. Uma nova configuração de spin é gerada e usando a expressão (A.36) encontramos a função de Green associada à nova configuração. Agora, de maneira aleatória é escolhido um intervalo de tempo imaginário  $l$  e invertemos ou não o spin dependendo de certa probabilidade, duas formas muito utilizadas para essa probabilidade de transição  $P$  são:

$$\text{Banho térmico; } P(s \rightarrow s') = \frac{\rho'}{\rho + \rho'}, \quad (\text{A.43})$$

ou

$$\text{Metropolis; } P(s \rightarrow s') = \begin{cases} 1 & \text{se } \rho' > \rho \\ \frac{\rho'}{\rho} & \text{Em outros casos.} \end{cases} \quad (\text{A.44})$$

Se o spin muda, pode usarse (A.36) para encontrar a nova função de Green. Seguidamente é escolhido outro spin de maneira aleatória e o procedimento é repetido. Fazendo isso várias vezes encontramos (A.42). Um passo de Monte Carlo quântico consiste em fazer uma varredura sobre toda a rede tentando inverter cada spin de Ising e gerando novas configurações com o algoritmo de Metropolis. Este procedimento é repetido um número “*nsweep*” de vezes, até que o sistema termalize e se possam calcular quantidades físicas com pequeno erro estatístico.

# Bibliografia

- [1] N. D. Mermin e N. W. Aschcroft, *Solid State Physics*, Saunders College, (1988).
- [2] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Addison-Wesley, Reading. MA (1969).
- [3] N. F. Mott, *The Basis Of the Electron Theory of Metals with Special Reference to the Transition Metals*, Proc. Phys. Soc., 416–422, **62**, (1949).
- [4] J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands. III. An Improved Solution*, Proc. Roy. Soc. (London), 401–419, **281**, (1964).
- [5] W. F. Brinkman, T. M. Rice, *Application of Gutzwiller’s Variational Method to the Metal-Insulator Transition*, Phys. Rev. B, 4302–4304, **2**, (1970).
- [6] D. B. McWhan, A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman, and T. M. Rice, *Metal-Insulator Transition in Pure and Doped  $V_2O_3$* , Phys. Rev. B., 1920–1932, **7**, (1973).
- [7] P. Limelette, A. Georges, D. Jérôme, P. Wzietek, P. Metcalf, J. M. Honig, *Universality and Critical Behavior at the Mott Transition*, Science, 89–92, **302**, (2003).

- [8] S. Lefebvre, P. Wzietek, S. Brown, C. Bourbonnais, D. Jerome, C. Mzire, M. Fourmigu, and P. Batail, *Mott Transition, Antiferromagnetism, and Unconventional Superconductivity in Layered Organic Superconductors*, Phys. Rev. Lett., 5420–5423, **85**, (2000).
- [9] Y. Sekine, H. Takahashi, N. Môri, T. Matsumoto, and T. Kosaka, Physica B **237**, 148 (1997).
- [10] S. Miyasaka, H. Hiraka, K. Yamada, and Y. Endoh, J. Phys. Soc. Jpn **69**, 1503 (2000).
- [11] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor and Francis, (1974)
- [12] D. B. McWhan, J. P. Remeika, T. M. Rice, W. F. Brinkman, J. P. Maita, and A. Menth, *Electronic Specific Heat of Metallic Ti-Doped  $V_2O_3$* , Phys. Rev. Lett., 941–943, **27**, (1971).
- [13] Imada, Fujimori, and Tokura, *Metal-Insulator transitions*, Rev. Mod. Phys., 1039–1263, **70**, (1998).
- [14] Julius Feinleib, William Paul, *Semiconductor-To-Metal Transition in  $V_2O_3$* , Phys. Rev., 841–850, **155**, (1967).
- [15] David Adler, *Mechanisms for Metal-Nonmetal Transitions in Transition-Metal Oxides and Sulfides*, Rev. Mod. Phys., 714–736, **40**, (1968).
- [16] D. Fournier, M. Poirier, M. Castonguay, and K. D. Truong, *Mott Transition, Compressibility Divergence, and the P-T Phase Diagram of Layered Organic Superconductors: An Ultrasonic Investigation*, Phys. Rev. Lett., 127002-1–127002-4, **90**, (2003).

- [17] J. Mazzaferro, H. Ceva, and B. Alascio, *Intermediate-valence effects on the phase diagram of  $NiS_{2-x}Se_x$* , Phys. Rev. B., 353–358, **22**, (1980).
- [18] Shigeki Miyasaka, Hidenori Takagi, Yoshiaki Sekine, Hiroki Takahashi, Nobuo Mōri and Robert J. Cava, *Metal-Insulator Transition and Itinerant Antiferromagnetism in  $NiS_{2-x}Se_x$  Pyrite*, J. Phys. Japan, 3166–3169, **69**, (2000).
- [19] D. M. Edwards, A. C. HEWSON, *Comment on Hubbard’s Theory of the Mott Transition*, Rev. Mod. Phys., 810–811, **40**, (1968).
- [20] W. Metzner, D. Vollhardt, *Correlated Lattice Fermions in  $d = \infty$  Dimensions* Phys. Rev. Lett. 324–327, **62**, (1989).
- [21] X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg, and G. Kotliar, *Mott transition in the  $d = \infty$  Hubbard model at zero temperature*, Phys. Rev. Lett., 1666–1669, **70**, (1993).
- [22] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth and Marcelo Rozenberg, *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions*, Rev. Mod. Phys, 13–125, **68**, (1996).
- [23] A. George, G. Kotliar, *Hubbard model in infinite dimensions*, Phys. Rev. B., 6479–6483, **45**, (1992).
- [24] Gabriel Kotliar, Dieter Vollhardt, *Strongly Correlated Materials: Insights from Dynamical Mean-Field theory*, Physics. Today, 53–59, **57**, (2004).
- [25] John W. Negele and Henri Orland, *Quantum Many-Particle Systems*, PERSEUS BOOKS, (2001).
- [26] Raimundo R. dos Santos, *Introduction to Quantum Monte Carlo Simulations for Fermionic Systems*, Brazilian Journal of Physics, 193102, **64**, (2003).

- [27] Jaewook Joo, Viktor Oudovenko, *Quantum Monte Carlo calculation of the finite temperature Mott-Hubbard transition*, Proc. Rev. B., 416–422, **62**, (1999).
- [28] M. C. Aguiar et. al, *Effects of disorder on the non-zero temperature Mott transition*, Phys. Rev. B., 205115–205122, **71**, (2005).
- [29] J. E. Hirsch, R. M. Fye, *Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals*, Phys. Rev. Lett., 2521–2524, **56**, (1986).
- [30] Katsuhiko Takegahara, *Quantum Monte Carlo Study of the Degenerate Anderson Model with Cubic Crystal Field*, Journal of the Physical Society of Japan., 1736–1744, **62**, (1993).
- [31] Wolfgang von der Linden, *A Quantum Monte Carlo approach to many-body physics*, Physics Reports, 55–162, **1**, (1992).