

Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Instituto de Física Gleb Wataghin - IFGW

*Cálculos numéricos de sistemas
eletrônicos desordenados correlacionados*

Éric de Castro e Andrade

Orientador: Eduardo Miranda

Tese de Doutorado apresentada ao Instituto de Física
como parte dos requisitos para a obtenção do título
de Doutor em Ciências.

Este exemplar corresponde à redação final da tese de Doutorado defendida pelo
aluno Éric de Castro e Andrade e aprovada pela Comissão Julgadora em 19/08/2010.



Campinas, Agosto de 2010

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

An24c Andrade, Eric de Castro e
 Cálculos numéricos de sistemas eletrônicos desordenados
 correlacionados / Eric de Castro e Andrade. -- Campinas, SP :
 [s.n.], 2010.

Orientador: Eduardo Miranda.
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas,
Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1 1. Transições metal-isolante. 2. Sistemas eletrônicos fortemente
2 correlacionados. 3. Sistemas desordenados. 4. Comportamento
3 não-líquido de Fermi. I. Miranda, Eduardo. II. Universidade
4 Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin".
5 III. Título.

6 (vsv/ifgw)

- **Título em inglês:** Numerical calculations in disordered strongly correlated electronic systems
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
 1. Metal-insulator transitions
 2. Strongly correlated electronic systems
 3. Disordered systems
 4. Non-Fermi liquid behavior
- **Área de Concentração:** Física da Matéria Condensada
- **Titulação:** Doutor em Ciências
- **Banca Examinadora:**
 - Prof. Eduardo Miranda
 - Prof. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún
 - Prof. Alex Antonelli
 - Prof. Raimundo Rocha dos Santos
 - Prof. Marcelo Leite Lyra
- **Data da Defesa:** 19-08-2010
- **Programa de Pós-Graduação em:** Física



Secretaria de Pós-Graduação - Tel: (19) 3521-5305 FAX: (19) 3521-4142

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE
ÉRIC DE CASTRO E ANDRADE - RA 008578, APRESENTADA E APROVADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN" DA UNIVERSIDADE
ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 19/08/2010.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Eduardo Miranda – DFMC/IFGW/UNICAMP
(Orientador do Candidato)

Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún – DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Alex Antonelli – DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Raimundo Rocha dos Santos – IF/UFRJ

Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra – DF/UFAL

Agradecimentos

Aos meus pais Neuza e Tadeu, aos meus irmãos Hugo e Heider, aos meus avós maternos Alice e José Faustino e aos meus muitos e queridos tios e primos, que sempre deram apoio irrestrito à minha escolha de carreira profissional, oferecendo todas as condições para que eu viesse estudar em Campinas, apesar de toda a distância de casa.

À Martha pelo seu carinho e compreensão durante esses anos, sempre ficando a meu lado, mesmo que fosse para estudar aos domingos e feriados.

Ao Prof. Eduardo Miranda pela excelente orientação e pela amizade, sempre fornecendo contribuições fundamentais, não apenas para este projeto de doutorado, mas também para minha formação como pesquisador em Física.

Ao Prof. Vlad Dobrosavljević por ter me recebido para um produtivo período de dez meses de doutorado sanduíche na Flórida, pela entusiástica e frutífera colaboração científica e pela amizade.

Aos Profs. Alex Antonelli, Antônio Rubens Britto de Castro, Eduardo Miranda, Fernando Cerdeira, Guillermo Cabrera, Marcus Aguiar, Maria Cristina dos Santos e Orlando Peres pelos excelentes cursos de graduação e de pós-graduação ministrados.

Aos amigos do Cursão 2001 Alex, André, David e Fernando, com os quais tive o privilégio de conviver e discutir Física.

Ao David pelo inestimável suporte computacional, sempre propiciado com sua imensa e habitual boa vontade.

Ao André por ter me recebido e ajudado a me instalar em Tallahassee.

Aos companheiros da sala de estudos do DFMC, pelo convívio agradável e estimulante. Ao Mateus e o Frank pelos cafés e conversas diárias, ao Marcelo pela companhia nos PED's e ao Éverton pelos almoços e jantares no Marcão.

Aos amigos de Tallahassee Anna e Yohannes, com os quais aprendi muito, e que tornaram meu período na Flórida muito mais agradável.

À FAPESP, processo 04/12098-6, e à CAPES, processo 1455/07-9, pelo apoio financeiro.

Resumo

Sistemas eletrônicos fortemente correlacionados desordenados possuem dois mecanismos básicos para a localização eletrônica e a subsequente destruição do estado metálico: o de Mott (causado pela interação elétron-elétron) e o de Anderson (causado pela desordem). Nesta tese, estudamos como estes mecanismos competem dentro da fase metálica e também como afetam o comportamento crítico do sistema, empregando uma generalização para o caso desordenado do cenário de Brinkman-Rice para a transição de Mott.

Investigamos os efeitos de desordem fraca e moderada sobre a transição metal-isolante de Mott a $T = 0$ em duas dimensões. Para desordem suficientemente baixa, a transição mantém sua característica do tipo Mott, na qual temos os pesos de quasipartícula Z_i indo a zero na transição e uma forte blindagem da desordem na região crítica. Em contraste com o comportamento encontrado para $d = \infty$, no nosso caso as *flutuações espaciais* dos pesos de quasipartícula são fortemente amplificadas próximo à transição de Mott de tal forma que eles adquirem uma distribuição do tipo lei de potência $P(Z) \sim Z^{\alpha-1}$, com $\alpha \rightarrow 0$ na transição. Tal comportamento altera completamente as características desta transição com relação ao caso limpo, e é um indício robusto da emergência de uma fase de Griffiths eletrônica precedendo a transição metal-isolante de Mott, com uma fenomenologia surpreendentemente similar àquela do “ponto fixo de desordem infinita” encontrada em magnetos quânticos.

Uma consequência imediata dessas novas características introduzidas pela desordem é que estados eletrônicos próximos à superfície de Fermi tornam-se mais homogêneos na região crítica, ao passo que estados com maiores energias têm o comportamento oposto: eles apresentam uma grande inomogeneidade precisamente nas vizinhanças da transição de Mott. Sugerimos que uma desordem efetiva dependente da interação é uma característica comum a todos os sistemas de Mott desordenados.

Estudamos também como os efeitos bem conhecidos das oscilações de longo alcance de Friedel são afetados por fortes correlações eletrônicas. Primeiramente, mostramos que sua amplitude e alcance são consideravelmente suprimidos em líquidos de Fermi fortemente renormalizados. Posteriormente, investigamos o papel dos espalhamentos elásticos e inelásticos na presença dessas oscilações. Em geral, nossos resultados analíticos mostram que um papel proeminente das oscilações de Friedel é relegado a sistemas fracamente interagentes.

Abordamos, por fim, os efeitos das interações sobre o isolante de Anderson em uma dimensão. Construimos a função de escala $\beta(g)$ e mostramos que a escala de “crossover” g^* , que marca a transição entre o regime ôhmico e o localizado da condutância, é renormalizada pelas interações. Como consequência, embora não haja a emergência de estados verdadeiramente estendidos, o regime ôhmico de g estende-se agora por uma região consideravelmente maior do espaço de parâmetros.

Abstract

Disordered strongly correlated electronic systems have two basic routes towards localization underlying the destruction of the metallic state: the Mott route (driven by electron-electron interaction) and the Anderson route (driven by disorder). In this thesis, we study how these two mechanisms compete in the metallic phase, and also how they change the critical behavior of the system, within a generalization to the disordered case of the Brinkman-Rice scenario for the Mott transition.

We investigate the effects of weak to moderate disorder on the Mott metal-insulator transition at $T = 0$ in two dimensions. For sufficiently weak disorder, the transition retains the Mott character, as signaled by the vanishing of the local quasiparticle weights Z_i and strong disorder screening at criticality. In contrast to the behavior in $d = \infty$, here the local spatial fluctuations of quasiparticle parameters are strongly enhanced in the critical regime, with a distribution function $P(Z) \sim Z^{\alpha-1}$ and $\alpha \rightarrow 0$ at the transition. This behavior indicates the robust emergence of an electronic Griffiths phase preceding the MIT, in a fashion surprisingly reminiscent of the “Infinite Randomness Fixed Point” scenario for disordered quantum magnets.

As an immediate consequence of these new features introduced by disorder, we have that the electronic states close to the Fermi energy become more spatially homogeneous in the critical region, whereas the higher energy states show the opposite behavior: they display enhanced spatial inhomogeneity precisely in the close vicinity to the Mott transition. We suggest that such energy-resolved disorder screening is a generic property of disordered Mott systems.

We also study how well-known effects of the long-ranged Friedel oscillations are affected by strong electronic correlations. We first show that their range and amplitude are significantly suppressed in strongly renormalized Fermi liquids. We then investigate the interplay of elastic and inelastic scattering in the presence of these oscillations. In the singular case of two-dimensional systems, we show how the anomalous ballistic scattering rate is confined to a very restricted temperature range even for moderate correlations. In general, our analytical results indicate that a prominent role of Friedel oscillations is relegated to weakly interacting systems.

Finally, we discuss the effects of correlations on the Anderson insulator in one dimension. We construct the scaling function $\beta(g)$ and we show that the crossover scaling g^* , which marks the transition between the ohmic and the localized regimes of the conductance, is renormalized by the interactions. As a consequence, we show that, although truly extend states do not emerge, the ohmic regime covers now a considerably larger region in the parameter space.

Sumário

1	Introdução	1
2	Modelos e métodos	7
2.1	Modelo de uma impureza de Anderson	8
2.1.1	Aproximação de campo médio de bósons escravos e o limite Kondo	11
2.2	Correlações, desordem e o modelo de Hubbard	15
2.2.1	Teoria de Hartree-Fock	18
2.2.2	Teoria Dinâmica de Campo Médio (TDCM)	20
2.2.3	Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio (TEDCM)	21
2.2.4	Bósons escravos	22
2.2.5	Solução do problema de uma impureza via bósons escravos	23
2.2.6	Solução do problema de rede via bósons escravos	25
3	Fase de Griffiths eletrônica da transição de Mott em $d = 2$	29
3.1	Teoria fenomenológica de Landau das transições de fase	30
3.1.1	Introdução	30
3.1.2	Efeitos da desordem nas transições de fase	31
3.1.2.1	Desordem média e critério de Harris	31
3.1.2.2	Regiões raras e as singularidades de Griffiths	32
3.1.2.3	Transições de fase quânticas	32
3.1.2.4	Singularidades de Griffiths no caso quântico	33
3.2	Transição metal-isolante de Mott	34
3.2.1	Fenomenologia do caso limpo e o cenário de Brinkman-Rice	35
3.2.2	Efeitos da desordem na transição metal-isolante de Mott	40
3.2.2.1	Blindagem da desordem pela interação	42
3.2.2.2	Blindagem dependente da frequência	45
3.3	Fase de Griffiths eletrônica	48
4	Oscilações quânticas em metais fortemente correlacionados	55
4.1	Teoria dos líquidos de Fermi	55
4.1.1	Formulação Geral	56
4.1.2	Exemplo: Cenário de Brinkman-Rice para a transição de Mott	58
4.2	Condutividade em sistemas metálicos	59
4.2.1	Formalismo de Kubo	60
4.2.2	Condutividade dentro da Teoria Dinâmica de Campo Médio	61
4.3	Impurezas em sistemas fortemente correlacionados: solução analítica	62
4.3.1	Definição do problema	62
4.3.2	Quantidades físicas	64
4.3.2.1	Limites de fraco e forte acoplamento	65
4.4	Correções de baixas temperaturas para a resistividade	70
4.4.1	Motivação experimental	71

4.4.2	Inclusão dos “cutoffs” inelásticos	72
4.4.3	Cálculo da taxa de espalhamento	74
4.4.3.1	Cálculo das integrais	75
4.4.3.2	Límite $T/T_F \ll 1$	78
4.4.3.3	Região de relevância da correção linear de $\rho(T)$ em $2d$	79
5	Localização de Anderson na presença de correlações	83
5.1	Fórmula de Landauer	83
5.1.1	Expressão geral para a corrente	85
5.1.2	Condutância em um modelo de rede	87
5.1.3	Aproximação de banda larga e inclusão das interações	88
5.2	Aplicações iniciais do formalismos de Landauer	89
5.2.1	Transição de Mott na presença dos contatos	89
5.2.2	Teoria de escala e a transição de Anderson	89
5.2.2.1	Transição de Anderson em $3d$	91
5.2.2.2	Localização de Anderson em $1d$	92
5.3	Localização de Anderson na presença de correlações em $1d$	95
5.3.1	Correlações espaciais na energia renormalizada v_i	97
5.3.2	Função de escala $\beta(g)$	99
6	Conclusão	103
A	Métodos numéricos utilizados	105
A.1	Passo 1	105
A.2	Passo 2	105
A.3	Passo 3	108
A.4	Passo 4	109
B	Alguns resultados para integrais funcionais	111
C	Métodos para o cálculo e propriedades do expoente α	113
D	Expansão das equações de campo médio	115
D.1	Termos de primeira ordem	115
D.2	Termos de segunda ordem	117
E	Matrizes de polarização	119
E.1	Somas de Matsubara e definição das matrizes $\Pi_{\mathbf{q}}^{(i)}$	119
E.2	Límite assintótico	122
F	Função de Lindhard em $1d$ e $2d$	125
F.1	Função de Lindhard em $1d$ para uma dispersão tight-binding	125
F.2	Transformadas de Fourier da função de Lindhard em $1d$	126
F.3	Transformadas de Fourier da função de Lindhard em $2d$	129

Introdução

As últimas décadas têm vivenciado avanços espetaculares no campo da ciência e tecnologia de materiais, levando à invenção, e subsequente difusão, de uma enorme gama de equipamentos, que engloba desde os portáteis como telefones celulares até máquinas hospitalares, como as de ressonância magnética nuclear. Em parte desses equipamentos, os avanços foram baseados em materiais que estão nas proximidades da transição entre um metal e um isolante. As propriedades destes materiais são fáceis de serem ajustadas, pois nesta região há a competição entre vários estados fundamentais possíveis [1].

Na vizinhança de uma transição metal-isolante, muitas quantidades físicas apresentam características não usuais [2], que são difíceis de serem compreendidas através de ideias e abordagens convencionais [3, 4]. Recentemente, uma enorme quantidade de resultados experimentais tem, contudo, apontado em uma direção que não pode ser ignorada: os efeitos significativos das inhomogeneidades espaciais no comportamento dos materiais, Figs. (1.1) e (1.2).

Diante deste cenário, fica claro que, para entendermos as interessantes propriedades desses materiais, devemos atacar o difícil problema da transição de fase quântica [8] entre um metal e um isolante, na presença tanto da repulsão Coulombiana entre os elétrons quanto dessas inhomogeneidades espaciais. A abordagem tradicional para este problema foi desenvolvida na década de 1980, na qual se assumiu uma teoria do tipo líquido de Fermi para o metal, descrevendo os efeitos da desordem perturbativamente [9, 10]. Apesar de sua elegância matemática e de possuírem uma grande semelhança com a descrição usual para transições de fase [11], estas teorias mostraram-se inadequadas, por exemplo, para o estudo de fenômenos que são dominados por configurações raras de desordem, como a formação de momentos magnéticos localizados em um metal desordenado correlacionado [12, 13].

De modo mais geral, podemos nos perguntar quais são os efeitos da desordem sobre uma transição de fase quântica. Em um trabalho pioneiro, Griffiths [14] descobriu que configurações raras de desordem podem produzir correções não analíticas para quantidades termodinâmicas, como o calor específico e a susceptibilidade magnética. Ocorre que, para as transições de fase clássicas (térmicas) que ele considerou, estas singularidades são muito fracas para serem observadas experimentalmente [15], e o comportamento crítico permanece basicamente inalterado. Já para o caso quântico, estas configurações raras de desordem provaram ser muito mais importantes. Em alguns sistemas elas dão origem às “fases de Griffiths quânticas” [16, 17], associadas à fenomenologia do “ponto fixo de desordem infinita” [18], onde a resposta termodinâmica é singular não apenas no ponto crítico, mas em toda uma região ao seu redor. Fisicamente, este cenário significa que o sistema parece cada vez mais inhomogêneo ao se aproximar do ponto crítico. Todas essas novas ideias deixam claro que os efeitos de desordem não podem ser ignorados, reforçando os argumentos enfatizados pela primeira vez em um trabalho seminal de Anderson [19].

Já o nosso entendimento acerca dos efeitos da interação elétron-elétron experimentou considerável avanço nos últimos vinte anos, devido à teoria dinâmica de campo médio (TDCM) [20, 21, 22, 23]. Esta é uma abordagem não perturbativa na interação, que descreve exatamente a dinâmica de um único sítio da rede embebido em um campo médio dinâmico gerado por todos os outros sítios, e que se torna exata no limite de infinitas dimensões [23]. A TDCM não é capaz de descrever os efeitos de localização de Anderson, pois trata a desordem na média, como na aproximação do potencial coerente (do inglês “Coherent Potential Approximation (CPA)”) [24]. Generalizações desta teoria, como a teoria estatística dinâmica de campo médio (TEDCM) [25] e a teoria do campo médio típico [26, 27, 28, 29], têm sido desenvolvidas de modo a incorporarem os dois mecanismos fundamentais para a localização dos elétrons: o de Mott [30] (causado pela interação) e o de Anderson [19] (causado pela desordem).

Dado que existem estes dois mecanismos para a localização dos elétrons e consequente destruição do estado

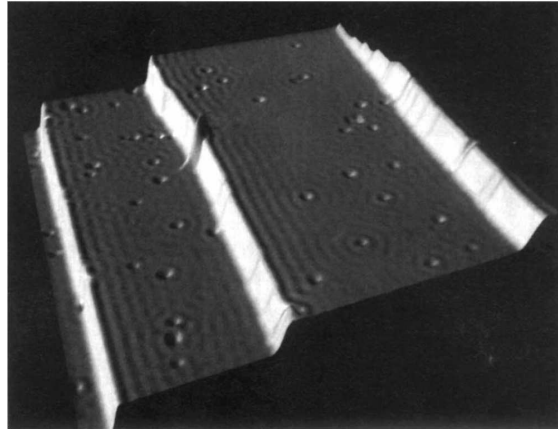


Figura 1.1: Imagem da densidade de estados locais no nível de Fermi na superfície do Cu(111) em uma área de $500\text{\AA} \times 500\text{\AA}$, obtida por espectroscopia de tunelamento por varredura. Retirada da Ref. [5]. As ondas estacionárias que aparecem aqui são as oscilações de Friedel [6], que são causadas tanto por defeitos pontuais quanto pelos degraus da superfície, e são uma manifestação direta do caráter ondulatório dos elétrons.

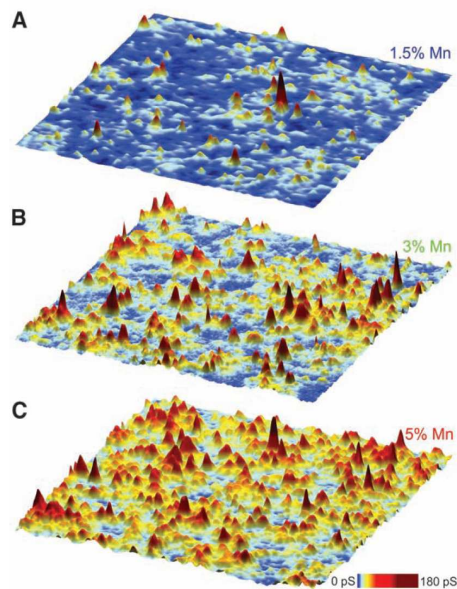


Figura 1.2: Variação espacial da densidade de estados locais no nível de Fermi (normalizada por seu valor médio) para $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ em uma escala nanométrica, área de $700\text{\AA} \times 700\text{\AA}$, obtida por espectroscopia de tunelamento por varredura. Retirada da Ref. [7]. Para os valores de dopagem mostrados aqui, estamos nas proximidades de uma transição metal-isolante, sendo que em (A), temos $\text{Ga}_{0.985}\text{Mn}_{0.015}\text{As}$ (“fracamente” isolante); em (B), $\text{Ga}_{0.97}\text{Mn}_{0.03}\text{As}$, e em (C), $\text{Ga}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{As}$ (“relativamente” condutor). Devido à presença de interações eletrônicas, os valores locais da densidade eletrônica são correlacionados no espaço.

metálico, é natural que nos perguntemos qual deles domina o comportamento crítico do sistema, ou ainda, como eles competem dentro da fase metálica. Dentro desta perspectiva geral, gostaríamos agora de listar brevemente os assuntos discutidos em cada um dos capítulos desta tese, bem como suas principais conclusões.

No Capítulo (2), expomos os modelos que utilizamos em nosso trabalho: modelo de Hubbard [31, 32, 33] desordenado ou modelo de Hubbard-Anderson, e o modelo de uma impureza de Anderson [34]. Discutimos seus limites triviais e mostramos que eles capturam a física que buscamos descrever. Introduzimos também as aproximações que empregamos em suas soluções. Toda essa discussão é feita dentro do formalismo de integrais funcionais, para o qual apresentamos uma breve revisão no Apêndice (B).

No Capítulo (3), estudamos a transição metal-isolante de Mott, a $T = 0$, em duas dimensões, na presença de desordem fraca e moderada dentro do cenário de Brinkman-Rice [35]. Mostramos que uma fase de Griffiths eletrônica precede esta transição metal-isolante [36]. Para tornar o assunto deste capítulo autocontido, incluímos uma breve discussão acerca da teoria de Landau das transições de fase, e também de como a desordem as alteram, dando origem às chamadas fases de Griffiths. Estas fases de Griffiths eletrônicas [17, 25, 37] foram propostas para sistemas desordenados correlacionados com base na TEDCM. Antes de nosso trabalho, elas só haviam sido identificadas em redes de Bethe e nas vizinhanças da transição metal-isolante de Anderson, e, em particular, apenas para desordem forte.

Nossos resultados mostram que [36, 38]: (i) para desordem suficientemente fraca, a transição de Mott mantém seu caráter de segunda ordem, com os elétrons gradualmente se transformando em momentos magnéticos localizados; (ii) inhomogeneidades espaciais induzidas pela desordem dão origem a uma fase de Griffiths eletrônica, acompanhada de um ponto crítico de desordem infinita; (iii) a desordem renormalizada vista pelas quasipartículas é fortemente blindada apenas para baixas energias, resultando em uma pronunciada dependência com a energia para as funções espectrais. Experimentos recentes em supercondutores de altas temperaturas, utilizando espectroscopia de tunelamento por varredura [39, 40], encontraram que, mesmo na presença de impurezas, a densidade de estados local é surpreendentemente homogênea para baixas energias, Fig. (1.3). Nossa teoria é focada apenas nos efeitos locais da correlação, e não inclui qualquer física relacionada à formação de pares supercondutores, o que nos parece um forte indício de que inhomogeneidades dependentes da energia são, de fato, uma característica robusta e geral para sistemas de Mott desordenados [38].

Já no Capítulo (4), investigamos como os efeitos das oscilações de longo alcance de Friedel são afetados por correlações ao sairmos do bem conhecido limite fracamente interagente em direção ao limite fortemente interagente nas vizinhanças da transição de Mott. Para tal, consideramos os efeitos de uma única impureza rígida e não magnética colocada em um metal paramagnético fortemente correlacionado. Neste caso, a análise é mais simples e transparente, mas este tema também é de importância fundamental para o entendimento do regime difusivo [41]. Oscilações de Friedel são uma manifestação direta do caráter ondulatório dos elétrons, sendo que exemplos vívidos delas aparecem também em imagens de espectroscopia de tunelamento por varredura [5, 42], como aquela reproduzida na Fig. (1.1). Incluímos neste capítulo, por completeza, uma discussão geral acerca da teoria de Landau dos líquidos de Fermi, bem como sobre o cálculo da resistividade (condutividade) dentro da TDCM. Detalhes dos cálculos contidos neste capítulo estão nos Apêndices (D) e (E). Já uma discussão sobre a origem matemática das oscilações está presente no Apêndice (F).

Nossos resultados, em sua maioria analíticos, demonstram que [43]: (i) para correlações suficientemente fracas, recuperamos os resultados da aproximação de Hartree-Fock, na qual o potencial efetivo de espalhamento gerado pela impureza é dado pelas oscilações de longo alcance de Friedel; (ii) ao nos aproximarmos da transição de Mott, contudo, essas oscilações têm seu alcance diminuído, na medida em que os efeitos da blindagem da impureza tornam-se cada vez mais locais, correspondendo a um menor “comprimento de cura”, a distância espacial de que o sistema precisa para recuperar-se dos efeitos da impureza, em outra cabal evidência de que sistemas fortemente correlacionados são robustos com relação à desordem [38, 44, 45]. Essa supressão das oscilações de Friedel é reflexo do fato de que, ao nos aproximarmos do isolante de Mott, os elétrons tendem a localizar-se, perdendo assim gradativamente seu caráter ondulatório; (iii) uma combinação desta “cura” pelas correlações com o espalhamento inelástico reduz consideravelmente os efeitos das oscilações de Friedel, mesmo para correlações moderadas; (iv) simultaneamente, uma nova escala de comprimento emerge no sistema, caracterizando o decaimento exponencial do peso de quasipartícula nas proximidades da transição de Mott, em claro contraste com o regime de correlações fracas onde o peso de quasipartícula também apresenta oscilações do tipo Friedel. Para o caso singular de duas dimensões, mostramos que o termo balístico anômalo para a resistividade [41] fica restrito a temperaturas muito baixas mesmo para correlações modestas, o que levanta dúvidas sobre sua aplicabilidade para a interpretação de resultados experimentais em gases de elétrons bidimensionais [46, 47].

No Capítulo (5), passamos a discutir os efeitos das correlações sobre a transição de Anderson. O estudo

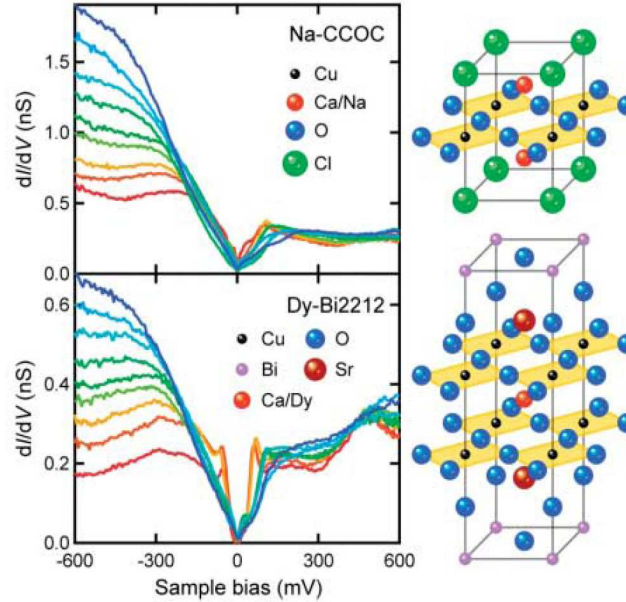


Figura 1.3: Densidade de estados locais como função da energia obtida para os cupratos levemente dopados $\text{Ca}_{1.88}\text{Na}_{0.12}\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ (cima) e $\text{Bi}_2\text{Si}_2\text{Dy}_{0.2}\text{Cu}_{0.8}\text{O}_2\text{Cl}_{8+\delta}$ (baixo) por espectroscopia de tunelamento por varredura realizada no plano CuO_2 . Cada uma das curvas corresponde a uma posição diferente neste plano. Retirada da Ref. [40]. Vemos que a densidade de estados é basicamente independente da posição no espaço (desordem) para baixas energias em ambos compostos. Devido ao arranjo experimental, as maiores variações são medidas para energias negativas.

da competição entre interações e desordem ganhou um novo impulso a partir da segunda metade da década de 1990, quando foi observada uma transição metal-isolante em sistemas eletrônicos bidimensionais [47, 48, 49]. Este resultado veio como uma grande surpresa, pois, de acordo com a teoria de escala para a localização de Anderson [50], todos os estados eletrônicos são localizados em duas dimensões. Embora obtido para um gás de elétrons não interagente, o resultado parece permanecer válido mesmo para interações fracas [9]. Guiados pela teoria de escala, também utilizamos a condutância g como a quantidade fundamental de nosso estudo. Para calcularmos g , empregamos o formalismo de Landauer [51, 52, 53, 54, 55], sobre o qual incluímos uma breve discussão, e também aplicações a sistemas já bem conhecidos.

Sistemas unidimensionais são o foco deste trabalho, pois neles podemos conduzir um estudo sistemático com o tamanho L da rede, e, conseqüentemente, construir a função de escala $\beta(g)$ [50]. Embora em $1d$ todos os estados eletrônicos sejam localizados, esperamos que já possamos captar aí a física básica de nosso modelo. Nossos resultados mostram que: (i) o comprimento de localização ξ é consideravelmente aumentado na presença de interações, fazendo com que os estados eletrônicos tornem-se mais estendidos; (ii) a escala de “crossover” g^* , que marca a transição entre o regime ôhmico ($g(L) \propto \sigma L^{-1}$) e o localizado ($g(L) \propto e^{-L/\xi}$), também é renormalizada pelas interações. Deste modo, embora não haja a emergência de estados verdadeiramente estendidos, o regime ôhmico de g estende-se agora por uma região bem maior do espaço de parâmetros, podendo eventualmente tornar irrisória a região na qual g entra no regime localizado. Cenários análogos ao descrito por este resultado já foram encontrados tanto numericamente [56, 57] quanto experimentalmente, Fig. (1.4).

Além de relegarmos vários detalhes dos cálculos para os Apêndices (C)-(F), também incluímos o Apêndice (A), no qual detalhamos os métodos numéricos empregados para obtermos os resultados apresentados nesta tese. A TEDCM é uma técnica completa que descreve exatamente os efeitos da desordem e trata as interações de modo não perturbativo dentro de uma abordagem local (TDCM). Contudo, ela demanda um grande esforço computacional, que só é aumentado pelo fato de precisarmos coletar várias amostras (realizações de desordem) para podermos construir distribuições e calcular valores médios. Tentamos dar uma visão global de nossa técnica, descrevendo tanto os pacotes e métodos numéricos quanto as otimizações que foram essenciais para o andamento dos projetos, como, por exemplo, o uso de programação em paralelo.

Por último, gostaríamos de explicitar que, durante toda esta tese, com algumas poucas exceções, adotaremos

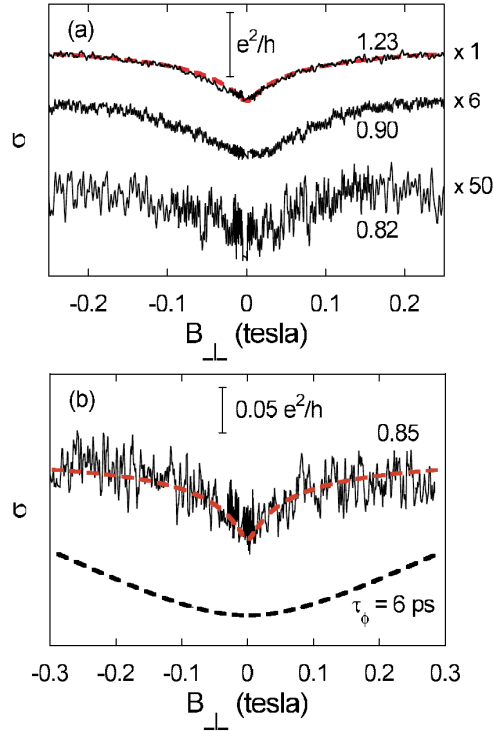


Figura 1.4: Magnetocondutividade em um gás de elétrons bidimensional fracamente desordenado. As medidas foram feitas a $T = 42\text{mK}$ e as densidades eletrônicas são indicadas ao lado das figuras em unidades de 10^{11}cm^{-2} , sendo que a densidade crítica na qual a transição metal-isolante ocorre é dada por $n_c = 0.82 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$. Retirado da Ref. [58]. Surpreendentemente, mesmo ao nos aproximarmos da transição, em uma região na qual as correlações são a escala de energia dominante para o problema [49], a forma das curvas continua basicamente a mesma, com relação àquela do regime fracamente interagente, apenas havendo a mudança de sua amplitude (dada pelo fator à direita de cada uma delas em (a), e 10 em (b)). As curvas vermelhas tracejadas são ajustes dos dados experimentais utilizando-se o resultado teórico obtido dentro da teoria de localização fraca [9], confirmando que elas possuem a forma do regime fracamente interagente.

$\hbar = 1$, $k_B = 1$ e $a = 1$, onde \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , k_B é a constante de Boltzmann e a é o espaçamento de rede (trabalhamos com redes quadradas e unidimensionais).

Modelos e métodos

Muito de nosso conhecimento acerca de sistemas eletrônicos fortemente correlacionados vem do estudo de Hamiltonianos modelos. Geralmente, estes modelos não possuem soluções exatas para dimensões maiores do que um, o que nos leva a empregar uma variedade de técnicas para o seu estudo como teoria de perturbação [59, 60], grupo de renormalização [61, 62], Monte Carlo [63, 64] e teorias de campo médio [35, 65, 20].

Em nosso trabalho, nos concentraremos em abordagens de campo médio. Um conceito bastante útil para discutirmos tais teorias é o de integrais funcionais, que introduzimos no Apêndice (B). Este formalismo é extremamente poderoso e o utilizaremos para calcularmos quantidades termodinâmicas como a energia livre F , bem como quantidades espectrais como a função de Green G . Como exemplo, investigaremos o modelo de uma impureza de Anderson [34] dentro desta abordagem, discutindo com detalhes sua solução no chamado limite Kondo, que ocorre para temperaturas menores do que a temperatura Kondo T_K . T_K marca o “crossover” entre a física de momentos magnéticos localizados de altas temperaturas e a física de um líquido de Fermi paramagnético fortemente renormalizado a baixas temperaturas [66, 67].

Na seção (2.2), apresentamos uma motivação acerca do nosso estudo de materiais correlacionados e introduzimos o modelo de Hubbard [32, 68, 69]. Discutimos a solução deste modelo em alguns de seus limites simples, mostrando que ele descreve a transição metal-isolante de Mott. Uma solução exata deste modelo só é conhecida em uma dimensão. Para dimensões superiores, lançamos mão de alguma aproximação. Uma delas é a Teoria Dinâmica de Campo Médio (TDCM) [20], discutida na seção (2.2.2). Esta aproximação tem como ideia central mapear o problema de uma rede interagente em problemas de uma impureza de Anderson interagindo com um banho externo, sendo este a ser determinado de maneira autoconsistente. A TDCM assume que trabalhamos no limite $d \rightarrow \infty$, o que faz com que todos os sítios tenham o mesmo banho externo, congelando assim as flutuações espaciais e limitando sua aplicabilidade para sistemas desordenados. Para contornarmos esta limitação e estudarmos o modelo de Hubbard desordenado, trabalhamos com uma generalização da TDCM conhecida com Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio (TEDCM) [25], discutida na seção (2.2.3), que trata a desordem exatamente. Essa abordagem leva a uma autoenergia eletrônica que é local, mas que pode apresentar fortes flutuações sítio a sítio, sendo assim capaz de acompanhar a competição entre desordem e interações.

Os problemas de uma impureza de Anderson auxiliares introduzidos pela TDCM ainda são problemas de muitos corpos. Para resolvê-los, utilizamos a técnica de campo médio de bósons escravos [65], descrita nas seções (2.2.4) e (2.2.5). A ideia por trás desta aproximação é aumentarmos o espaço de Hilbert, através da introdução de quatro novos bósons, impondo vínculos, de maneira a eliminarmos todos os estados não físicos deste novo espaço de Hilbert aumentado.

2.1 Modelo de uma impureza de Anderson

O modelo de uma impureza de Anderson [34] descreve uma banda eletrônica condutora com uma dispersão de energias $\epsilon_{\mathbf{k}}$, hibridizada com um orbital localizado de energia ϵ_f . O Hamiltoniano do problema é

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger f_\sigma + h.c. \right) \\
 &+ U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} + \epsilon_f \sum_{\sigma} f_\sigma^\dagger f_\sigma,
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde $c_{\mathbf{k}\sigma}$ é o operador de destruição para os elétrons condutores, f_σ é o operador de destruição para o elétron no orbital localizado, $n_{f\sigma} = f_\sigma^\dagger f_\sigma$, $V_{\mathbf{k}}$ é o termo de hibridização entre os estados localizados e os estados da banda de condução, e U é o termo de repulsão Coulombiana local, que existe apenas quando dois elétrons ocupam o orbital localizado.

Este modelo possui dois limites que o permitem resolver exatamente. Um deles é o limite atômico, que corresponde a $V_{\max}/U = 0$, onde $V_{\max} = \max(V_{\mathbf{k}})$, e descreve a física de um íon isolado com um único estado f

$$H_{\text{atômico}} = U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} + \epsilon_f \sum_{\sigma} f_\sigma^\dagger f_\sigma. \tag{2.2}$$

Este limite possui o mecanismo básico para descrever a formação de momentos magnéticos localizados [34, 67]. Os quatro estados quânticos do modelo atômico dado pela Eq. (2.2), bem como suas respectivas energias, são, assumindo que $\epsilon_f \leq 0$ e que $\epsilon_f + U \geq 0$,

$$\begin{aligned}
 |2\rangle & \quad E(2) = 2\epsilon_f + U, \text{ não magnético;} \\
 |0\rangle & \quad E(0) = 0, \text{ não magnético;} \\
 |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle & \quad E(1) = \epsilon_f, \text{ magnético.}
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

Em um estado fundamental magnético, o preço para se introduzir uma flutuação de valência (ou de carga) ao adicionarmos ou tirarmos um elétron do estado $|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$ é sempre positiva

$$\begin{aligned}
 E(0) - E(1) &= -\epsilon_f > 0 \text{ (remoção),} \\
 E(2) - E(1) &= \epsilon_f + U > 0 \text{ (adição).}
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Por estas condições, um momento magnético local é bem definido, desde que a temperatura seja menor que a escala de flutuação de valência $T_{FV} = \min(-\epsilon_f, \epsilon_f + U)$.

Passamos agora ao limite não interagente, no qual $U/V_{\max} = 0$. Faremos a discussão deste limite dentro do formalismo de integração funcional, que é descrito no Apêndice (B). Utilizando a Eq. (B.11), podemos calcular a ação para a Eq. (2.1) como

$$\begin{aligned}
 S &= \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_{\mathbf{k},\sigma} \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) (\partial_\tau - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) + \sum_{\sigma} \bar{f}_\sigma(\tau) (\partial_\tau - \mu + \epsilon_f) f_\sigma(\tau) \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{\mathbf{k},\sigma} [V_{\mathbf{k}} \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) f_\sigma(\tau) + V_{\mathbf{k}}^* \bar{f}_\sigma(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)] + U n_{f\uparrow}(\tau) n_{f\downarrow}(\tau) \right\}
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

$$S = S^{(0)} + U \int_0^\beta d\tau n_{f\uparrow}(\tau) n_{f\downarrow}(\tau), \tag{2.6}$$

onde $S^{(0)}$ é a ação não interagente. Vale a pena ressaltar que $c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)(\bar{c}_{\mathbf{k},\sigma}(\tau))$ e $f_\sigma(\tau)(\bar{f}_\sigma(\tau))$ não são operadores, e sim variáveis de Grassmann (ou suas respectivas conjugadas, denotadas aqui por barras). Neste limite, estamos interessados apenas na parte livre da ação $S^{(0)}$, que escreveremos no espaço de frequências.

Utilizando as seguintes definições

$$a_\alpha(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} a_\alpha(i\omega_n), \quad (2.7)$$

$$a_\alpha(i\omega_n) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} a_\alpha(\tau), \quad (2.8)$$

$$\delta_{n,m} = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta e^{i\tau(\omega_n - \omega_m)}, \quad (2.9)$$

com n e m sendo números inteiros, e as frequências discretas de Matsubara dadas por

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}, \quad (2.10)$$

obtemos

$$\begin{aligned} S^{(0)} = \sum_{n,\sigma} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) (-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) + \bar{f}_\sigma(i\omega_n) (-i\omega_n - \mu + \epsilon_f) f_\sigma(i\omega_n) \right. \\ \left. + \sum_{\mathbf{k}} [V_{\mathbf{k}} \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) f_\sigma(i\omega_n) + V_{\mathbf{k}}^* \bar{f}_\sigma(i\omega_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)] \right\}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Deixando a condição de contorno implícita, a função partição neste caso é dada por

$$\mathcal{Z}_0 = \int \mathcal{D}(\bar{c}_{\mathbf{k},\sigma}(i\omega_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)) \mathcal{D}(\bar{f}_\sigma(i\omega_n) f_\sigma(i\omega_n)) e^{-S^{(0)}}, \quad (2.12)$$

lembrando que $S^{(0)}$ é dada pela Eq. (2.11). Utilizando a Eq. (B.4), podemos integrar nas variáveis $\bar{c}_{\mathbf{k},\sigma}(i\omega_n)$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)$, o que nos dá

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_0 = \det[-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}] \int \mathcal{D}(\bar{f}_\sigma(i\omega_n) f_\sigma(i\omega_n)) \exp \left[\sum_{n,\mathbf{k},\sigma} \frac{(-V_{\mathbf{k}} f_\sigma(i\omega_n)) (-V_{\mathbf{k}}^* \bar{f}_\sigma(i\omega_n))}{-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}} \right] \\ \times \exp \left[- \sum_{n,\sigma} \bar{f}_\sigma(i\omega_n) (-i\omega_n - \mu + \epsilon_f) f_\sigma(i\omega_n) \right], \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_0 = \det[-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}] \int \mathcal{D}(\bar{f}_\sigma(i\omega_n) f_\sigma(i\omega_n)) \\ \times \exp \left[- \sum_{n,\sigma} \bar{f}_\sigma(i\omega_n) (-i\omega_n - \mu + \epsilon_f + \Delta(i\omega_n)) f_\sigma(i\omega_n) \right], \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\mathcal{Z}_0 = \det[-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}] \det[-i\omega_n - \mu + \epsilon_f + \Delta(i\omega_n)], \quad (2.15)$$

onde

$$\det[A] = e^{\text{tr}[\ln(A)]} \quad (2.16)$$

e

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}. \quad (2.17)$$

$\Delta(i\omega_n)$ é conhecida como função de hibridização.

Com a igualdade dada pela Eq. (2.16), podemos explicitar os cálculos dos determinantes presentes na Eq. (2.15). Por exemplo, para o primeiro determinante,

$$\det[-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}] = \exp \left[\sum_{n, \mathbf{k}, \sigma} \ln(-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}) \right]. \quad (2.18)$$

Contudo, não utilizaremos a Eq. (2.18) para avaliarmos os determinantes, pois estamos interessados no cálculo da função de Green $\mathcal{G}_{ff}^{(0)}(i\omega_n)$, e como veremos a seguir, eles se cancelam.

A função de Green procurada é dada por

$$\mathcal{G}_{ff}^{(0)}(i\omega_l) = -\frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int \mathcal{D}(\bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)) \mathcal{D}(\bar{f}_{\sigma}(i\omega_n) f_{\sigma}(i\omega_n)) f_{\rho}(i\omega_l) \bar{f}_{\rho}(i\omega_l) e^{-S^{(0)}}. \quad (2.19)$$

Devemos notar que a integral sobre as variáveis $\bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)$ não muda com relação àquela feita para o cálculo de \mathcal{Z}_0 . Já para realizarmos a integral sobre $f_{\sigma}(i\omega_n)$ e $\bar{f}_{\sigma}(i\omega_n)$, introduziremos o seguinte termo de fonte (corrente) na ação: $\sum_{m, \lambda} \{ \bar{J}_{m, \lambda} f_{\lambda}(i\omega_m) + \bar{f}_{\lambda}(i\omega_n) J_{m, \lambda} \}$ (naturalmente, tomando o limite \bar{J} , $J \rightarrow 0$ ao final dos cálculos).

Após a integração sobre $\bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)$ e a introdução do termo extra em $S^{(0)}$, ficamos com

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{ff}^{(0)}(i\omega_l) &= -\lim_{\bar{J}, J \rightarrow 0} \frac{\det[-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}]}{\mathcal{Z}_0} \frac{\delta^2}{\delta \bar{J}_{l, \rho} \delta J_{l, \rho}} \int \mathcal{D}(\bar{f}_{\sigma}(i\omega_n) f_{\sigma}(i\omega_n)) \\ &\quad \times \exp \left[-\sum_{n, \sigma} \bar{f}_{\sigma}(i\omega_n) (-i\omega_n - \mu + \epsilon_f + \Delta(i\omega_n)) f_{\sigma}(i\omega_n) \right] \\ &\quad \times \exp \left[\sum_{m, \lambda} \{ \bar{J}_{m, \lambda} f_{\lambda}(i\omega_m) + \bar{f}_{\lambda}(i\omega_m) J_{m, \lambda} \} \right], \end{aligned} \quad (2.20)$$

com o símbolo $\delta/\delta \bar{J}_{l, \rho}$ indicando uma derivada funcional. Utilizando a Eq. (B.4), podemos realizar a integração sobre $f_{\sigma}(i\omega_n)$ e $\bar{f}_{\sigma}(i\omega_n)$, donde vem que

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{ff}^{(0)}(i\omega_l) &= -\lim_{\bar{J}, J \rightarrow 0} \frac{\det[-i\omega_n - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}] \det[-i\omega_n - \mu + \epsilon_f + \Delta(i\omega_n)]}{\mathcal{Z}_0} \\ &\quad \times \frac{\delta^2}{\delta \bar{J}_{l, \rho} \delta J_{l, \rho}} \exp \left[\sum_{m, \lambda} \left\{ \frac{\bar{J}_{m, \lambda} J_{m, \lambda}}{-i\omega_m - \mu + \epsilon_f + \Delta(i\omega_m)} \right\} \right]. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Vemos que, pela Eq. (2.15), o termo no numerador é exatamente \mathcal{Z}_0 . Logo, não precisamos avaliar os determinantes, restando-nos assim apenas as derivadas

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{ff}^{(0)}(i\omega_l) &= -\lim_{J, J \rightarrow 0} \sum_{m, \lambda} \delta_{l, m} \delta_{\rho, \lambda} \frac{\exp \left[\sum_{m, \lambda} \bar{J}_{m, \lambda} J_{m, \lambda} [-i\omega_m - \mu + \epsilon_f + \Delta(i\omega_m)]^{-1} \right]}{-i\omega_m - \mu + \epsilon_f + \Delta(i\omega_m)} \\ &\quad \times \left\{ 1 + \frac{\bar{J}_{m, \lambda} J_{m, \lambda}}{-i\omega_m - \mu + \epsilon_f + \Delta(i\omega_m)} \right\}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

e, após tomarmos o limite \bar{J} , $J \rightarrow 0$ temos

$$\mathcal{G}_{ff}^{(0)}(i\omega_l) = \frac{1}{i\omega_l - \mu + \epsilon_f + \Delta(i\omega_l)}. \quad (2.23)$$

Aqui, vemos que o efeito do termo de hibridização é alargar o estado localizado f , produzindo uma ressonância. Para calcularmos a largura desta ressonância, é mais conveniente trabalharmos no eixo real, aplicando a continuação analítica usual [59, 60], $i\omega_n \rightarrow \omega \pm i\eta$. Começamos notando que a função de hibridização dada pela Eq. (2.17) possui um corte de linha no eixo real, uma vez que

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} [\Delta(\omega \pm i\eta)] = \mp \pi \sum_{\mathbf{k}} |V_{\mathbf{k}}|^2 \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}) \equiv \mp \Gamma(\omega). \quad (2.24)$$

Se assumirmos que $V_{\mathbf{k}} = V$, temos

$$\Gamma(\omega) = \pi V^2 \rho_c(\omega), \quad (2.25)$$

onde $\rho_c(\omega)$ é a densidade de estados dos elétrons de condução. Conhecendo a parte imaginária de $\Delta(\omega)$, podemos então escrever $\text{Re}[\Delta(\omega \pm i\eta)]$ em termos de $\Gamma(\omega)$, utilizando a seguinte relação de dispersão [70]

$$\text{Re}[\Delta(\omega \pm i\eta)] = \frac{1}{\pi} P \int d\epsilon \frac{\Gamma(\epsilon)}{\omega - \epsilon \pm i\eta}, \quad (2.26)$$

onde P denota o valor principal da integral.

Geralmente, estamos interessados em energias muito menores que a energia de Fermi dos elétrons da banda de condução. Assumimos assim, por simplicidade, que $\Gamma(\omega) = \Gamma$ para $|\omega| < D$ e $\Gamma(\omega) = 0$ para $|\omega| > D$, onde D é a meia largura de banda (energia de Fermi) dos elétrons de condução. Dentro desta aproximação, podemos tomar $\text{Re}[\Delta(\omega)] \approx 0$ (Eq. (2.26)), e ficamos com

$$\Delta(\omega \pm i\eta) \simeq \mp i\Gamma. \quad (2.27)$$

Nesta aproximação, podemos calcular a densidade de estados local no nível f como

$$\rho_f^{(0)}(\omega) = - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im} [\mathcal{G}_{ff}^{(0)}(\omega + i\eta)] = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega - \epsilon_f)^2 + \Gamma^2}, \quad (2.28)$$

mostrando que a ressonância do estado localizado f é uma Lorentziana de largura Γ centrada na energia ϵ_f deste orbital.

2.1.1 Aproximação de campo médio de bósons escravos e o limite Kondo

Consideraremos agora a solução do modelo de uma impureza de Anderson em um limite especial, no qual fazemos com que a repulsão Coulombiana local $U \gg \Gamma(0)$, com $\Gamma(\omega)$ dado pela Eq. (2.25), de tal forma que a dupla ocupação no orbital localizado seja improvável, $n_f \leq 1$. Para simplificar a discussão, tomaremos o limite $U \rightarrow \infty$ e, diferentemente do limite atômico, mantemos o termo de hibridização finito. Utilizando a notação da Eq. (2.3), podemos reescrever o Hamiltoniano de uma impureza de Anderson como [67]

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger |0\rangle \langle \sigma| + V_{\mathbf{k}}^* |\sigma\rangle \langle 0| c_{\mathbf{k}, \sigma} \right) \\ &+ E(0) |0\rangle \langle 0| + E(1) \sum_{\sigma} |\sigma\rangle \langle \sigma|. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Ocorre que esses novos operadores $|0\rangle \langle 0|$, $|0\rangle \langle \sigma|$, $|\sigma\rangle \langle 0|$ e $|\sigma\rangle \langle \sigma|$ possuem uma álgebra de comutação que não os caracterizam nem como bósons, nem como férmions. Na verdade, eles possuem a álgebra de comutação dos operadores de Hubbard, primeiramente introduzidos na Ref. [68]. De fato, se definirmos

$$X_{\alpha\beta} \equiv |\alpha\rangle \langle \beta|, \quad (2.30)$$

onde $|\alpha\rangle, |\beta\rangle = |0\rangle, |\sigma\rangle$, temos

$$[X_{\alpha\beta}, X_{\gamma\delta}]_{\pm} = \delta_{\beta\gamma} X_{\alpha\delta} \pm \delta_{\alpha\delta} X_{\gamma\beta}, \quad (2.31)$$

onde $[A, B]_{\pm} = AB \pm BA$.

O motivo por trás da emergência desses operadores de álgebra incomum é que correlações fortes limitam consideravelmente o espaço de Hilbert (por exemplo, excluindo os estados duplamente ocupados) e impõem vínculos à dinâmica eletrônica de baixas energias. Essa interpretação fica mais clara ao introduzirmos uma representação dos operadores X em termos de operadores fermiônicos e bosônicos usuais. Uma representação conveniente é dada em termos dos chamados bósons escravos [71, 72]

$$\begin{aligned} X_{00} &= b^\dagger b & , & & X_{\sigma 0} &= \tilde{f}_\sigma^\dagger b, \\ X_{0\sigma} &= \tilde{f}_\sigma b^\dagger & , & & X_{\sigma\sigma} &= \tilde{f}_\sigma^\dagger \tilde{f}_\sigma, \end{aligned} \quad (2.32)$$

onde

$$[b, b^\dagger]_- = 1 \quad , \quad [\tilde{f}_\sigma, \tilde{f}_\sigma^\dagger]_+ = \delta_{\sigma\sigma}, \quad (2.33)$$

desde que trabalhemos no subespaço determinado pelo seguinte vínculo

$$\sum_{\sigma} \tilde{f}_\sigma^\dagger \tilde{f}_\sigma + b^\dagger b = 1. \quad (2.34)$$

O operador bosônico b^\dagger (b) cria (destrói) um buraco no orbital localizado, ao passo que o operador fermiônico \tilde{f}_σ^\dagger (\tilde{f}_σ) cria (destrói) um estado de ocupação simples com spin σ .

Em termos destes operadores de bósons escravos, a Eq. (2.29) pode ser reescrita como

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \tilde{f}_\sigma b^\dagger + V_{\mathbf{k}}^* \tilde{f}_\sigma^\dagger b c_{\mathbf{k}, \sigma} \right) + \epsilon_f \sum_{\sigma} \tilde{f}_\sigma^\dagger \tilde{f}_\sigma. \quad (2.35)$$

Escrevemos agora a ação associada a esta Hamiltoniana, utilizando a Eq. (B.11). O vínculo descrito pela Eq. (2.34) é imposto ao introduzimos o termo contendo um multiplicador de Lagrange $i\lambda(\tau)$ $\left[\sum_{\sigma} \tilde{f}_\sigma^\dagger(\tau) \tilde{f}_\sigma(\tau) + \bar{b}(\tau) b(\tau) - 1 \right]$ à ação

$$\begin{aligned} S &= \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) (\partial_\tau + \epsilon_{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) + \sum_{\sigma} \bar{\tilde{f}}_\sigma(\tau) (\partial_\tau + \epsilon_f + i\lambda(\tau)) \tilde{f}_\sigma(\tau) \right. \\ &+ \left. \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[V_{\mathbf{k}} \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \tilde{f}_\sigma(\tau) \bar{b}(\tau) + V_{\mathbf{k}}^* \bar{\tilde{f}}_\sigma(\tau) b(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \right] + \bar{b}(\tau) (\partial_\tau + i\lambda(\tau)) b(\tau) - i\lambda(\tau) \right\}, \quad (2.36) \end{aligned}$$

onde assumimos explicitamente que $\epsilon_{\mathbf{k}}$ e ϵ_f são medidos com relação ao nível de Fermi.

Neste ponto, introduziremos a aproximação de ponto de sela, ou de campo médio, na qual substituímos os campos bosônicos $b(\tau)$ e $i\lambda(\tau)$ por seus valores médios estáticos. Esta abordagem cai em uma classe geral conhecida como limite de N grande [71, 72, 73, 74]. Métodos similares de N grande já foram aplicadas com sucesso a outras áreas da física, como fenômenos críticos [75] e teoria de campos [76]. A ideia aqui é generalizarmos nosso problema para um no qual o orbital localizado f possua uma degenerescência de spin dada por $N = 2j + 1$ (e não mais $N = 2$), tomando em seguida o limite artificial no qual $N \rightarrow \infty$. Neste limite extremo, a física do sistema é descrita por uma teoria de campo médio, e propriedades de N finito são obtidas através de uma expansão no parâmetro pequeno $1/N$ [71, 72, 73, 74]. Utilizando a notação convencional

$$\langle b \rangle = r, \quad (2.37)$$

$$i \langle \lambda \rangle = \tilde{\epsilon}_f - \epsilon_f, \quad (2.38)$$

reescrevemos a Eq. (2.36) como

$$S_0 = \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) (\partial_\tau + \epsilon_{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) + \sum_{\sigma} \bar{\tilde{f}}_\sigma(\tau) (\partial_\tau + \tilde{\epsilon}_f) \tilde{f}_\sigma(\tau) \right\}$$

$$+ \left. \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[rV_{\mathbf{k}}\bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)\tilde{f}_{\sigma}(\tau) + rV_{\mathbf{k}}^*\tilde{f}_{\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \right] + (r^2 - 1)(\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_f) \right\}. \quad (2.39)$$

O próximo passo é calcularmos a função partição Z_0 do sistema através das Eqs. (B.8) e (B.9)

$$Z_0 = \int \mathcal{D}(\bar{c}_{\mathbf{k},\sigma}(i\omega_n)c_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)) \mathcal{D}(\bar{f}_{\sigma}(i\omega_n)\tilde{f}_{\sigma}(i\omega_n)) e^{-S_0}. \quad (2.40)$$

Como a ação acima não contém termos de dois corpos, o cálculo é similar àquele do caso não interagente, Eqs. (2.13)-(2.15). Assim, integramos os graus de liberdade dos elétrons de condução e geramos uma ação efetiva S_{eff} , dada por

$$Z_0 = Z_c \int \mathcal{D}(\bar{f}_{\sigma}(i\omega_n)\tilde{f}_{\sigma}(i\omega_n)) e^{-S_{eff}}, \quad (2.41)$$

onde

$$Z_c = \det[-i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{k}}], \quad (2.42)$$

e

$$S_{eff} = \sum_{n,\sigma} \bar{f}_{\sigma}(i\omega_n)(-i\omega_n + \tilde{\epsilon}_f + r^2\Delta(i\omega_n))\tilde{f}_{\sigma}(i\omega_n) + \beta(r^2 - 1)(\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_f), \quad (2.43)$$

com a função de hibridização dada pela Eq. (2.17), com $\mu = 0$, uma vez que agora medimos $\epsilon_{\mathbf{k}}$ com relação ao nível de Fermi. A função partição Z_0 é, então, dada por

$$Z_0 = Z_c \exp \left[\sum_{n,\sigma} \ln(-i\omega_n + \tilde{\epsilon}_f + r^2\Delta(i\omega_n)) - \beta(r^2 - 1)(\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_f) \right], \quad (2.44)$$

e a energia livre, lembrando que $F_0 = -T \ln Z_0$,

$$F_0 = -T \sum_{n,\sigma} \ln(-i\omega_n + \tilde{\epsilon}_f + r^2\Delta(i\omega_n)) + (r^2 - 1)(\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_f). \quad (2.45)$$

A extremização da energia livre acima, com relação a r e $\tilde{\epsilon}_f$, leva-nos às equações de campo médio

$$2T \sum_n \tilde{G}_f(i\omega_n) = 1 - r^2, \quad (2.46)$$

$$2T \sum_n \tilde{G}_f(i\omega_n) \Delta(i\omega_n) = (\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_f), \quad (2.47)$$

onde a função de Green $\tilde{G}_f(i\omega_n)$ dos férmions f é dada por

$$\tilde{G}_f(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \tilde{\epsilon}_f - r^2\Delta(i\omega_n)}. \quad (2.48)$$

Naturalmente, a função de Green dos elétrons localizados é dada por $G_f(i\omega_n) = r^2\tilde{G}_f(i\omega_n)$. Comparando esta equação com a Eq. (2.23), e utilizando a Eq. (2.28), vemos que mesmo neste modelo fortemente interagente ainda temos a formação de uma ressonância. Ela é agora localizada ao redor da energia renormalizada deste orbital $\tilde{\epsilon}_f$ e sua largura é dada por $r^2\Delta(i\omega_n)$, sendo, portanto, renormalizada por r^2 .

Com as Eqs. (2.46)-(2.48) terminamos o problema autoconsistentemente, pois dados os parâmetros ϵ_f e $\Delta(\omega)$, calculamos os valores médios estáticos dos bósons escravos r^2 e $\tilde{\epsilon}_f$. Notamos ainda que a Eq. (2.46) nada mais é do que a imposição do vínculo (2.34) na média, uma vez que a soma de Matsubara $2T \sum_n \tilde{G}_f(i\omega_n)$ dá precisamente n_f [59, 60].

Para ilustrarmos o conteúdo dessas equações de autoconsistência, vamos resolvê-las no chamado limite Kondo. Em seu trabalho original [34], Anderson mostrou, utilizando uma teoria de campo médio de Hartree-Fock, que acima de um valor crítico de interação $U_c \sim \pi\Gamma$, onde Γ é a largura da ressonância do estado f (Eq. (2.25)), o

momento localizado adquire uma magnetização $M = \langle n_{f\uparrow} \rangle - \langle n_{f\downarrow} \rangle$ finita. Contudo, essa solução ignora flutuações quânticas de spin que fazem com que este momento localizado tunele, em uma lenta escala de tempo $\tau_{\uparrow\downarrow}$, entre os estados atômicos degenerados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, Eq. (2.2). São precisamente estas flutuações quânticas que estão por trás do efeito Kondo [67], que faz com que o momento localizado seja blindado pelos elétrons de condução através da formação de um singlete. Introduzimos uma temperatura T_K , a temperatura Kondo, associada a esse tempo de tunelamento $T_K \sim 1/\tau_{\uparrow\downarrow}$, e que também dá a largura da ressonância na Eq. (2.48). A temperatura Kondo marca o “crossover” entre um comportamento do tipo Curie para a susceptibilidade magnética $\chi \sim 1/T$ a altas temperaturas e um comportamento paramagnético $\chi \sim 1/T_K$ a baixas temperaturas.

No limite Kondo, temos $n_f \simeq 1$ e, pela Eq. (2.46), podemos escrever $n_f = 1 - r^2$, o que implica que $r^2 \rightarrow 0$. Como $U \rightarrow \infty$, a dupla ocupação está descartada, contudo, não basta supormos que o nível de Fermi dos elétrons da banda de condução μ , com $\mu = 0$, seja maior do que ϵ_f , para que o estado f esteja sempre com ocupação simples. Além disso, precisamos que $|\epsilon_f| \gg \Gamma$ para que não haja hibridização entre o elétron localizado f e aqueles da banda de condução. Por fim, consideraremos como constante a densidade de estados dos elétrons da banda de condução

$$\rho_c(\omega) = \begin{cases} 1/2D, & |\omega| \leq D \\ 0, & |\omega| > D \end{cases}, \quad (2.49)$$

onde D é a meia largura de banda. Consideramos também que apenas o valor da função de hibridização na superfície de Fermi seja importante

$$\Delta(\omega) = \Delta(0) = \Phi + i\Gamma, \quad (2.50)$$

naturalmente com $\Phi = \text{Re}[\Delta(0)]$ e $\Gamma = \text{Im}[\Delta(0)]$, este último novamente dado pela Eq. (2.25).

Utilizamos agora os resultados do Apêndice (A) para reescrevemos as equações de campo médio (2.46) e (2.47) no limite $T \rightarrow 0$

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \text{Re}[\tilde{G}_f(i\omega)] d\omega = -\frac{r^2}{2}, \quad (2.51)$$

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \text{Re}[\Delta_f(i\omega) \tilde{G}_f(i\omega)] d\omega = (\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_f). \quad (2.52)$$

Olhamos primeiramente a Eq. (2.51). Utilizando as Eqs. (2.48), (2.49) e (2.50), temos

$$-\frac{(\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi)}{\pi} \int_0^D \frac{1}{(\omega - r^2\Gamma)^2 + (\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi)^2} d\omega = -\frac{r^2}{2}. \quad (2.53)$$

Devemos considerar, em um primeiro momento, o limite superior da integral como a largura de banda D , pois é na região $|\omega| \leq D$ que temos $\Gamma \neq 0$, Eq. (2.25). Contudo, como o integrando cai com $1/\omega^2$ para $\omega \rightarrow \infty$, podemos neste caso fazer $D \rightarrow \infty$ para simplificar o cálculo da integral, donde vem que

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \arctan \left[\frac{\omega}{\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi} \right]_{-r^2\Gamma}^\infty &= -\frac{r^2}{2}, \\ -\frac{1}{\pi} \left\{ \frac{\pi}{2} - \arctan \left[\frac{-r^2\Gamma}{\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi} \right] \right\} &= -\frac{r^2}{2}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Como $r^2 \rightarrow 0$, devemos ter o lado esquerdo da equação acima tendendo a zero, o que implica que podemos expandir o arco-tangente com o seu argumento indo para infinito, o que equivale a $\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi \rightarrow 0^-$, donde obtemos

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \left\{ -\frac{\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi}{r^2\Gamma} \right\} &= -\frac{r^2}{2}, \\ \tilde{\epsilon}_f &= -r^2\Phi - \frac{\pi\Gamma r^4}{2}, \end{aligned} \quad (2.55)$$

e vemos que, de fato, a condição $\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi \rightarrow 0^-$ é satisfeita. A equação acima mostra que, no limite Kondo, $r^2 \rightarrow 0$, a energia renormalizada do orbital localizado aproxima-se da energia de Fermi, independe do valor inicial da energia despida ϵ_f . Isso faz com que a ressonância da Eq. (2.48) esteja, assim, centrada na energia de Fermi e

possua largura $r^2\Gamma$. Tal ressonância no nível de Fermi é conhecida como ressonância Kondo [67], e sua largura é dada pela temperatura Kondo, $T_K = r^2\Gamma$.

Passamos agora a solução da segunda equação de campo médio

$$-\frac{2}{\pi} \int_0^D \frac{\Phi(\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi)}{(\omega - r^2\Gamma)^2 + (\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi)^2} d\omega + \frac{2}{\pi} \int_0^D \frac{\Gamma(\omega - r^2\Gamma)}{(\omega - r^2\Gamma)^2 + (\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi)^2} d\omega = (\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_f). \quad (2.56)$$

A primeira equação é idêntica àquela associada à primeira equação de campo médio, Eq. (2.53), e restringimo-nos ao cálculo da segunda integral. Note que, neste caso, não podemos tomar o limite $D \rightarrow \infty$, pois o integrando cai apenas com $1/\omega$, e, assim, a semilargura de banda D entra como um limite para os valores de frequência. Diante dessas considerações, temos que

$$-r^2\Phi + \frac{\Gamma}{\pi} \ln \left[\frac{(D - r^2\Gamma)^2 + (\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi)^2}{(r^2\Gamma)^2 + (\tilde{\epsilon}_f + r^2\Phi)^2} \right] = (\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_f). \quad (2.57)$$

Neste ponto, utilizamos a Eq. (2.55) para escrever $\tilde{\epsilon}_f = -r^2\Phi$, desprezando termos de ordem superior. Além disso, temos que $D \gg r^2\Gamma$, donde vem que

$$\begin{aligned} \frac{2\Gamma}{\pi} \ln \left[\frac{D}{r^2\Gamma} \right] &= |\epsilon_f|, \\ T_K = r^2\Gamma &= D e^{-\pi|\epsilon_f|/2\Gamma}, \end{aligned} \quad (2.58)$$

e vemos assim que, embora a ressonância sempre ocorra na energia de Fermi, sua largura depende exponencialmente de ϵ_f .

No caso de U finito, podemos estimar a temperatura Kondo utilizando essa expressão acima. Para tal, consideramos o modelo de Anderson simétrico, no qual $\epsilon_f = -U/2$, e assim escrevemos a temperatura Kondo como [67]

$$T_K = D e^{-\pi U/8\Gamma}. \quad (2.59)$$

Esta dependência exponencial de T_K com U pode ser obtida¹, por exemplo, utilizando-se a teoria de campo médio de bósons escravos de Kotliar e Ruckenstein, como discutida na seção (2.2.4).

2.2 Correlações, desordem e o modelo de Hubbard

Nosso trabalho é centrado no estudo de sistemas fortemente correlacionados. O termo correlação, como usado em nosso trabalho, possui o mesmo sentido daquele mais usual utilizado em matemática, e expressa simplesmente o fato de que o valor esperado de um produto de quantidades quaisquer A e B (função de correlação) é, de maneira geral, diferente do produto dos valores esperados de cada uma das quantidades separadamente

$$\langle AB \rangle = \langle A \rangle \langle B \rangle + \text{Correlações}. \quad (2.60)$$

Baseado nesta definição, podemos pensar nas correlações como descrevendo efeitos que vão além de aproximações obtidas pela fatoração das funções de correlação. Tais aproximações são conhecidas como aproximações de campo médio estáticas como, por exemplo, a aproximação de campo médio de Weiss para o modelo de Ising [11], ou a aproximação de Hartree-Fock para o modelo de Hubbard [60].

Em materiais reais, correlações são especialmente importantes quando dois elétrons (com spins opostos) ocupam o mesmo orbital estreito d ou f . Podemos estimar seu grau de correlação da seguinte forma. Os elétrons movem-se em um metal com uma velocidade $v \approx v_F$, onde $v_F = \epsilon_F/\hbar k_F$ é a velocidade de Fermi e k_F é o vetor de onda de Fermi. Escrevendo $k_F^{-1} \sim a$ e $\epsilon_F = D$, onde D é a semilargura de banda e a o parâmetro de rede, obtemos $v \sim Da/\hbar$. Por outro lado, podemos definir uma velocidade típica como $v \sim a/\Delta t$, onde Δt é o tempo médio que o elétron passa em um determinado orbital (átomo), donde vem que

$$\Delta t \sim \frac{\hbar}{D}. \quad (2.61)$$

¹Note, contudo, que há um fator extra de $1/2$ no expoente, refletindo o fato que, para U finito, há dois canais de flutuação, Eq. (2.4).

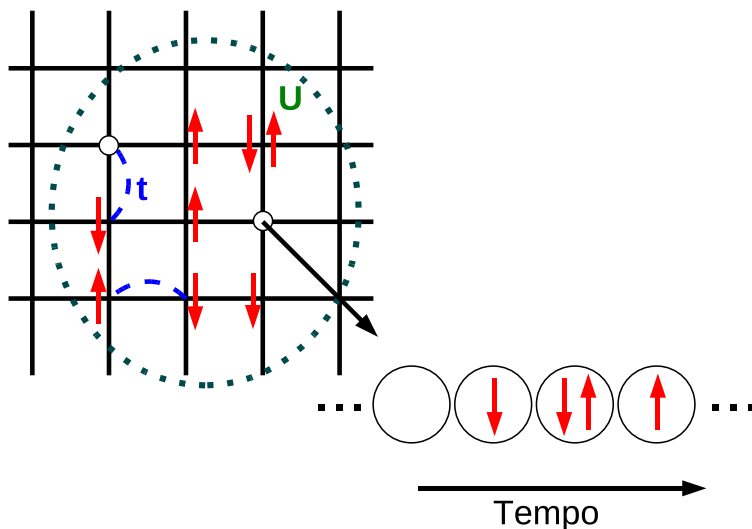


Figura 2.1: Representação do modelo de Hubbard em uma rede quadrada (os íons da rede são assumidos fixos). Os elétrons movem-se de um sítio (íon) da rede para um de seus (quatro) primeiros vizinhos com uma amplitude de “hopping” t . Quando dois elétrons de spins opostos ocupam o mesmo sítio da rede, eles pagam uma energia U devido à repulsão Coulombiana existente entre eles. Analisando a dinâmica de um único sítio, vemos que, como função do tempo, sua ocupação muda, podendo ele estar vazio, com ocupação simples ou dupla.

Vemos assim que, quanto mais estreita é a banda de um orbital, mais tempo o elétron passa em um determinado átomo e mais ele sente a presença dos outros elétrons. Nesta classe de materiais que apresentam bandas estreitas figuram elementos que possuem as camadas d ou f parcialmente preenchidas, como, por exemplo, os metais de transição V , Fe , Ni e seus óxidos, ou as terras raras, como Ce e Eu . Este confinamento espacial dos elétrons aumenta os efeitos da repulsão Coulombiana entre eles, fazendo com que se tornem fortemente correlacionados.

O modelo mais simples para tratarmos as correlações é o modelo de Hubbard [31, 32, 33]

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2.62)$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) cria (destrói) um elétron com spin σ no sítio i , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ dá o número de elétrons com spin σ no sítio i , t é amplitude de “hopping” entre os sítios *vizinhos* i e j e U é o termo de repulsão Coulombiana local que existe apenas quando dois elétrons ocupam um mesmo sítio i . O primeiro termo de H é o termo de energia cinética, pois descreve o movimento dos elétrons através da rede pela sua destruição (criação) em sítio i e sua criação (destruição) no sítio j . Se olharmos a ocupação de um determinado sítio como função do tempo, ele poderá estar tanto vazio ($|0\rangle$), com ocupação simples ($|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$) ou dupla ($|2\rangle$), Fig. (2.1).

Apesar de sua aparente simplicidade, o modelo de Hubbard só possui solução exata em uma dimensão [77]. Para dimensões superiores, precisamos empregar alguma aproximação para resolvê-lo. Há, contudo, dois limites nos quais podemos resolvê-lo facilmente.

O primeiro é o regime não interagente, no qual $U = 0$. Neste caso, a diagonalização da Eq. (2.62) pode ser feita por uma simples transformada de Fourier e geramos uma banda de dispersão $\varepsilon(\mathbf{k})$. Para uma rede hiper-cúbica em d dimensões, com dimensão linear L e sujeita a condições periódicas de contorno, podemos escrever

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t \sum_{i=1}^d \cos(k_i), \quad (2.63)$$

com $k_i = 2\pi n_i/L$ e $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(L/2 - 1), L/2$. A semilargura de banda D é, então,

$$D = zt = 2dt, \quad (2.64)$$

onde z é número de coordenação ou número de primeiros vizinhos, que em uma rede hiper-cúbica é dado simplesmente por $z = 2d$. Os autovetores são estados estendidos de Bloch

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{L^d}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} |\mathbf{i}\rangle, \quad (2.65)$$

onde $|\mathbf{i}\rangle$ é o estado associado ao sítio i , que está situado na posição \mathbf{r}_i . A função de onda $\langle \mathbf{r} | \mathbf{i} \rangle$ é centrada ao redor do sítio i e decai à medida em que dele nos distanciamos. Um conjunto de funções que apresenta essa característica são as funções de Wannier [3]. Neste regime, o modelo sempre descreverá um metal, desde que a ocupação dos sítios $n = N/L^d$, onde N é o número de elétrons, seja diferente de 0 (banda completamente vazia) ou 2 (banda completamente cheia).

O outro limite é o limite atômico, no qual temos $t = 0$. Aqui o problema reduz-se a um problema de um único sítio. Os quatro estados quânticos deste limite, bem como suas respectivas energias, são

$$\begin{aligned} |2\rangle & E(2) = U; \\ |0\rangle & E(0) = 0; \\ |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle & E(1) = 0; \end{aligned} \quad (2.66)$$

Conhecendo o espectro podemos, por exemplo, calcular a função partição de cada sítio,

$$Z = \sum_{\alpha} \langle \alpha | e^{-\beta(H-\mu N)} | \alpha \rangle = 1 + 2e^{\beta\mu} + e^{-\beta(U-2\mu)}, \quad (2.67)$$

onde $\beta = 1/T$ e μ é o potencial químico, bem como sua energia livre

$$f = \frac{F}{L^d} = -T \ln \left(1 + 2e^{\beta\mu} + e^{-\beta(U-2\mu)} \right), \quad (2.68)$$

ou sua ocupação

$$n = \frac{N}{L^d} = \frac{1}{Z} \left(2e^{\beta\mu} + 2e^{-\beta(U-2\mu)} \right) = 2 \left(e^{\beta\mu} + e^{-\beta(U-2\mu)} \right) \left(1 + 2e^{\beta\mu} + e^{-\beta(U-2\mu)} \right)^{-1}. \quad (2.69)$$

Desta última equação vemos que o caso de semipreenchimento, $n = 1$, corresponde a $\mu = U/2$. Embora obtida no limite atômico, essa relação é válida mesmo para $t \neq 0$, desde que tenhamos simetria partícula-buraco [60].

Considerando agora o caso especial de semipreenchimento, vemos que, para $U/t \ll 1$, o sistema se comporta como um metal, uma vez que o termo de energia cinética é o dominante e tende a delocalizar os elétrons, Eq. (2.65). Já no limite em que $U/t \gg 1$, o sistema comporta-se como isolante, dado que o termo de interação é o dominante e a dupla ocupação torna-se energeticamente desfavorável, Eq. (2.66). Isso faz com que o sistema minimize a energia localizando os elétrons. Portanto, deve haver algum valor crítico de interação U_c no qual haja uma transição de um metal para um isolante. Tal transição metal-isolante induzida por correlações é conhecida transição metal-isolante de Mott [30].

Além das correlações, as propriedades de materiais correlacionados são influenciadas pela presença de desordem. Por desordem entendemos qualquer desvio da periodicidade da rede, como defeitos pontuais (impurezas, vacâncias ou interstícios) e discordâncias [3]. Modelaremos a desordem por meio da introdução de um nível de energia ε_i para cada um dos sítios da rede [19], chegando ao modelo de Hubbard desordenado

$$H = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (2.70)$$

Consideramos que estas energias ε_i são descorrelacionadas entre sítios e especificadas por uma distribuição de probabilidade $P(\varepsilon)$ (geralmente uniforme ou Gaussiana), cuja variância é dada por W^2 . Deste modo, W caracteriza a força da desordem.

Também podemos estudar alguns limites simples deste modelo, como fizemos para o caso em que $W = 0$. Considere o limite de desordem forte e não interagente no qual $U = 0$ e $W \gg t$. Neste caso, temos uma coleção de sítios independentes, cada um com sua energia dada por ε_i associada ao estado $|\mathbf{i}\rangle$. Aplicando teoria de perturbação [78] no “hopping”, podemos calcular a correção para os autoestados como

$$|\Psi_{\mathbf{i}}\rangle^{(1)} = \sum_{\mathbf{j} \neq \mathbf{i}} \frac{t_{ij}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} |\mathbf{j}\rangle. \quad (2.71)$$

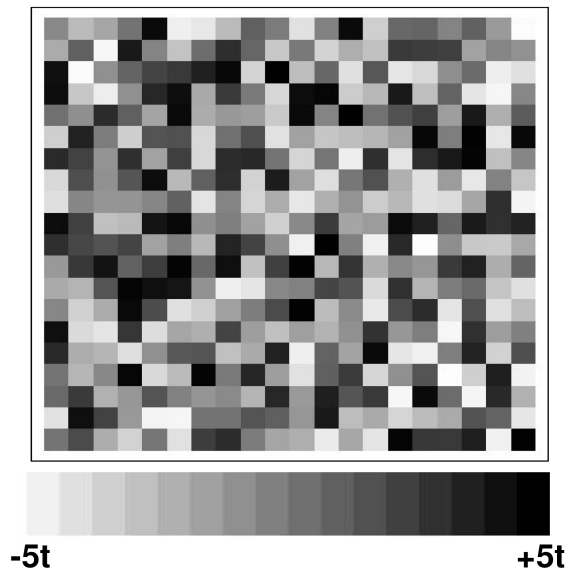


Figura 2.2: Distribuição espacial das energias dos sítios em uma rede quadrada. Como estas energias não possuem correlações espaciais, sítios vizinhos possuem energias tipicamente muito diferentes.

Como a desordem é muito grande, temos, de forma geral, que sítios vizinhos possuem energias tipicamente muito diferentes, o que faz com esta correção para os autoestados seja pequena, Fig. (2.2). Portanto, vemos que neste limite os estados eletrônicos são localizados, mesmo para $t \neq 0$. Como vimos que no limite em que $W/t \ll 1$ os estados eletrônicos são estendidos, Eq. (2.65), esperamos que haja um valor crítico de desordem W_c para o qual esta transição ocorra. Tal transição metal-isolante, que é causada pela desordem, é conhecida como transição metal-isolante de Anderson.

Por último, investigaremos os efeitos da desordem na transição de Mott no limite atômico, $t = 0$. Sem a presença da desordem, cada sítio da rede possui dois níveis de energia, Eq. (2.66): $E(1) = 0$ e $E(2) = U$. Se o sistema está em semipreenchimento ($\mu = E_F = U/2$), cada sítio possui apenas um elétron, permanecendo os níveis $E(2)$ vazios. Temos assim um momento magnético para cada sítio, e um “gap” igual a U para excitações de carga, vide Fig.2.3.

Quando adicionamos desordem ao sistema, cada um desses níveis de energia sofre um deslocamento por uma energia ε_i , que é aleatoriamente distribuída no intervalo $[-W/2, W/2]$. Para $W < U$ a situação não muda, pois todos os níveis $E'_i(2) = \varepsilon_i + U$ permanecem vazios. Para $W > U$, aqueles sítios com $\varepsilon_i > U/2$ possuem o nível $E'_i(1) = \varepsilon_i + 0 > E_F$ e estão vazios. Igualmente, aqueles sítios com $\varepsilon_i < -U/2$ possuem o nível excitado $E'_i(2) = \varepsilon_i + U < E_F$ e estão duplamente ocupados.

Portanto, no regime em que $W > U$, há sítios que podem estar vazios ou com ocupação dupla. Aqui também temos o “gap” de Mott fechado (estados com ocupação dupla e vazios coexistem), embora uma parcela dos sítios permaneça com momentos magnéticos localizados. Os autores da Ref. [79] descrevem esse estado como uma mistura não homogênea de isolantes de Mott e de Anderson e o chamam de dois fluidos.

Para valores arbitrários de U , W e t , necessitamos de alguma aproximação para resolvermos o modelo de Hubbard. Utilizaremos aqui as chamadas teorias de campo médio. Como implementada aqui, esta abordagem consiste em concentrarmos toda nossa atenção na dinâmica de um único sítio inserido em um campo médio criado por todos os outros sítios, sendo que tal campo médio, ou efetivo, é determinado de maneira autoconsistente. Discutiremos abaixo exemplos deste formalismo.

2.2.1 Teoria de Hartree-Fock

A abordagem de campo médio mais simples para o modelo de Hubbard é a teoria de Hartree-Fock. Na verdade, como o termo de interação no modelo de Hubbard é puramente local, o termo de troca não aparece e a teoria de Hartree-Fock reduz-se imediatamente à teoria de Hartree. Essa abordagem começa assumindo que a ocupação de

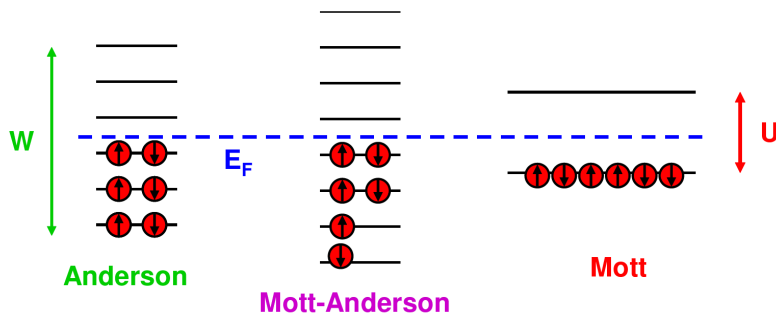


Figura 2.3: Ocupação dos níveis de energia no limite atômico para um isolante de Anderson (esquerda), Mott (direita) e Mott-Anderson (centro). Retirado da Ref. [79]. No isolante de Mott-Anderson, a desordem W é comparável à interação U , e surge um comportamento de dois fluidos. Os spins dos momentos localizados presentes nesta fase estão orientados aleatoriamente, indicando que não há ordenamento magnético. A energia de Fermi E_F está indicada pela linha tracejada.

cada sítio pode ser escrita como seu valor médio mais flutuações ao redor dessa média

$$n_{i\uparrow} = \langle n_{i\uparrow} \rangle + \Delta_{i\uparrow}, \quad (2.72)$$

$$n_{i\downarrow} = \langle n_{i\downarrow} \rangle + \Delta_{i\downarrow}. \quad (2.73)$$

Reescrevendo o termo de interação local da Eq. (2.70) em termos da definição acima, temos

$$n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} = \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle + \Delta_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle + \langle n_{i\uparrow} \rangle \Delta_{i\downarrow} + \mathcal{O}(\Delta^2), \quad (2.74)$$

onde ignoramos os termos quadráticos nas flutuações. Reescrevendo a Eq. (2.74) em termos das variáveis originais, temos

$$n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} = n_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle + n_{i\downarrow} \langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle. \quad (2.75)$$

A Eq. (2.70) fica agora

$$H_{HF} = \sum_{i\sigma} E_{i\sigma} n_{i\sigma} - t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - UN \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle, \quad (2.76)$$

onde N é o número de sítios e

$$E_{i\sigma} = \varepsilon_i + U \langle n_{i-\sigma} \rangle. \quad (2.77)$$

A Eq. (2.76) descreve agora uma rede desordenada não interagente, cujas energias dos sítios são dadas pela Eq. (2.77). Naturalmente, para complementarmos a solução, precisamos suplementar estas equações com uma condição de autoconsistência para encontrarmos os valores médios da ocupação. Para tal, diagonalizamos o Hamiltoniano efetivo (2.76) e com seus autovalores e autovetores obtemos $\langle n_{i\uparrow} \rangle$ e $\langle n_{i\downarrow} \rangle$. Iteramos este procedimento até que a convergência seja atingida.

Pela Eq. (2.75), fica claro que a teoria de Hartree-Fock se baseia na fatoração do termo quártico de interação. Olhando, por exemplo, o limite fortemente interagente em que $U \gg D$, vemos que a ocupação dupla é fortemente

suprimida, pois é energeticamente desfavorável. Veja, por exemplo, as Eqs. (2.66). Nesta situação temos claramente que $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle \neq \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$, e assim não podemos fatorar o termo de interação na Eq. (2.62), sob pena de, já de início, excluirmos fenômenos associados a fortes correlações, como a transição de Mott. Isso faz com que a aproximação de Hartree-Fock seja restrita a pequenos valores de U ou a baixos valores da densidade eletrônica n (longe do semipreenchimento).

2.2.2 Teoria Dinâmica de Campo Médio (TDCM)

Uma abordagem não perturbativa em U para o estudo de sistemas correlacionados é dada pela teoria dinâmica de campo médio. Para facilitar nossa discussão, consideraremos primeiramente o caso limpo, $W = 0$. Como estamos sempre interessados em estudar a transição de Mott, restringimo-nos à solução paramagnética, na qual $\langle n_{i\uparrow} \rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle$. Seguindo o espírito usual das teorias de campo médio, a ideia central da TDCM consiste em mapear o problema de uma rede interagente em problemas de uma única impureza magnética embebida em um meio (banho) efetivo, meio este a ser determinado de maneira autoconsistente [20, 21, 22]. Em formulações mais avançadas, esta única impureza é trocada por um “cluster” de impurezas magnéticas [80, 81, 82, 83].

Essa teoria começa tomando um sítio genérico da rede, digamos, o sítio l , e integrando sobre todos os outros, gerando uma ação efetiva para l . A aproximação da TDCM, que é exata quando a dimensão $d \rightarrow \infty$ [23], consiste em reter, além da repulsão local de Hubbard, apenas termos quadráticos nos operadores de criação e aniquilação. A ação efetiva para o sítio l fica

$$S_{eff} = - \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\sigma} \bar{c}_{l\sigma}(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{l\sigma}(\tau') + U \int_0^{\beta} d\tau n_{l\uparrow}(\tau) n_{l\downarrow}(\tau). \quad (2.78)$$

A função $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ fornece a amplitude efetiva para um férmion ser criado no sítio isolado l no tempo τ (vindo do banho externo) e ser destruído no tempo τ' (voltando para o banho).

Ressaltamos que o campo médio visto pelo sítio l , representado aqui por $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$, é, na verdade, uma função do tempo, em vez de um campo médio estático, como no caso da teoria de Hartree-Fock discutida anteriormente. Isto faz com que a ação efetiva S_{eff} ainda seja um problema de muitos corpos, pois dá conta das flutuações quânticas que descrevem transições entre os quatro estados quânticos possíveis do sítio l ($|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ e $|2\rangle$), através da troca de elétrons com o restante da rede, descrita aqui como um banho externo, Fig. (2.4). Esta ação efetiva é equivalente àquela do problema de uma impureza de Anderson [84]. A TDCM é uma aproximação ideal para uma teoria dos líquidos de Fermi local [85], pois descreve uma física que é consideravelmente não local no tempo, Eq. (2.61), mas local no espaço.

O fato de a ação efetiva para o sítio l ser idêntica àquela do modelo de uma impureza de Anderson permite que utilizemos os resultados da seção (2.1). Em particular, utilizando a Eq. (2.23) podemos escrever $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)$ em termos da função de hibridização $\Delta(i\omega_n)$

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n), \quad (2.79)$$

sendo que $\Delta(i\omega_n)$ descreve a hibridização entre o elétron, ou elétrons, no sítio l e o restante da rede. Contudo, notamos que, enquanto no modelo de Anderson original (Eq. (2.1)) há dois tipos de elétrons, os de condução e os do orbital localizado, neste caso há apenas um tipo de elétron, que faz as vezes tanto da impureza magnética, quanto dos elétrons do banho.

Um conjunto completo de equações de campo médio é obtido adicionando-se à Eq. (2.78) uma expressão que relacione $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$, ou, equivalentemente, $\Delta(i\omega_n)$, com quantidades calculadas diretamente de S_{eff} . Para iniciarmos esta construção, devemos notar que no contexto da TDCM a autoenergia dos elétrons é puramente local no espaço [20], ou seja

$$\Sigma_{i,j}(i\omega_n) = \delta_{i,j} \Sigma(i\omega_n), \quad (2.80)$$

o que implica que a sua transformada de Fourier independe de \mathbf{k} , $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \Sigma(i\omega_n)$.

Podemos calcular a função de Green local interagente partindo direto da ação efetiva dada pela Eq. (2.78)

$$G(\tau - \tau') \equiv - \left\langle T_{\tau} \left[c_l(\tau) c_l^{\dagger}(\tau') \right] \right\rangle_{S_{eff}}, \quad G(i\omega_n) = \int_0^{\beta} d\tau G(\tau) e^{i\omega_n \tau}, \quad (2.81)$$

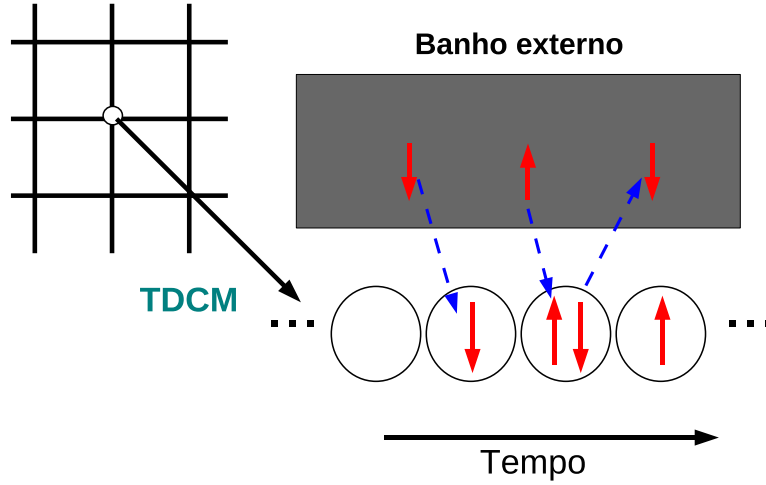


Figura 2.4: Visão esquemática da teoria dinâmica de campo médio. Esta teoria mapeia o problema de férmions interagentes em uma rede para um problema no qual temos apenas um sítio desta rede inserido em um banho externo gerado por todos os outros sítios. Embora local no espaço, esta teoria descreve a dinâmica temporal dos elétrons na medida em que eles entram e saem do banho externo.

sendo que no espaço de frequência podemos parametrizá-la da seguinte forma

$$G^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n) - \Sigma(i\omega_n), \quad (2.82)$$

A condição de autoconsistência que buscamos é atingida ao impormos que $G(i\omega_n)$, definida na Eq. (2.81), coincida com $G_{ll}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau [c_l(\tau) c_l^\dagger(\tau')] \rangle$, que é a função de Green local interagente de um corpo para o sítio l calculada diretamente da ação completa do sistema, e não de S_{eff} . Como a autoenergia é local, Eq. (2.80), a função de Green da rede G_{ll} é calculada como

$$G_{ll}(i\omega_n) = G_{ll}^{(0)}[\varepsilon_l \rightarrow \varepsilon_l + \Sigma(i\omega_n)], \quad (2.83)$$

onde $G_{ll}^{(0)}$ é a função de Green do Hamiltoniano de Hubbard (Eq. (2.62)) não interagente. Notamos que uma relação similar (Equação de Dyson) relaciona exatamente a função de Green da rede interagente com aquela não interagente. Contudo, nessa formulação exata, a autoenergia possui uma dependência não local no espaço, ou, equivalentemente, com o momento \mathbf{k} . Aplicando agora a condição de autoconsistência, obtemos que

$$\begin{aligned} G(i\omega_n) &\equiv G_{ll}(i\omega_n), \\ \Delta(i\omega_n) &= i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \frac{1}{G_{ll}(i\omega_n)}. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Logo, iniciamos o algoritmo de solução para o problema com um palpite inicial para $\Delta(i\omega_n)$, que utilizamos para resolver o problema de uma impureza associado, obtendo assim $\Sigma(i\omega_n)$. Com esta autoenergia, utilizamos a Eq. (2.83) para calcularmos a função de Green da rede $G_{ll}(i\omega_n)$, que, quando colocada na Eq. (2.84), fornece um novo valor para a função de hibridização, permitindo-nos reiniciar o ciclo.

2.2.3 Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio (TEDCM)

Gostariamos agora de incluir efeitos da desordem na abordagem de campo médio desenvolvida acima. O nosso objetivo é descrever exatamente todos os efeitos da desordem, continuando a tratar as interações dentro do espírito de TDCM. Isso é alcançado dentro da teoria estatística dinâmica de campo médio (TEDCM) [25].

Como na TDCM, fixamo-nos em um sítio particular da rede l e integramos sobre todos os outros, mantendo apenas os termos quadráticos nos operadores fermiônicos. Devido à desordem, os banhos gerados não são mais os mesmos para todos os sítios, sendo introduzidas assim flutuações espaciais no sistema. A ação efetiva para um sítio l é então

$$S_{eff}^{(l)} = \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \bar{c}_{l\sigma}(\tau) (\partial_{\tau} + \varepsilon_l - \mu) c_{l\sigma}(\tau) + \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \bar{c}_{l\sigma}(\tau) \Delta_l(\tau - \tau') c_{l\sigma}(\tau') + U \int_0^{\beta} d\tau n_{l\uparrow}(\tau) n_{l\downarrow}(\tau), \quad (2.85)$$

já utilizando a equivalência entre S_{eff} e a ação do problema de uma impureza de Anderson. Neste formalismo, a autoenergia eletrônica $\Sigma_l(i\omega)$ permanece local, embora passe agora a depender do sítio devido à introdução de desordem [25], ou seja

$$\Sigma_{i,j}(i\omega_n) = \delta_{i,j} \Sigma_i(i\omega_n). \quad (2.86)$$

Chamaremos de função de Green local aquela função de Green associada à ação efetiva (2.85), $G_l^{(loc)}(\tau - \tau') = -\langle T_{\tau} [c_l(\tau) c_l^{\dagger}(\tau')] \rangle_{S_{eff}}$, que é dada por

$$G_l^{(loc)}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_l - \Delta_l(i\omega_n) - \Sigma_l(i\omega_n)}. \quad (2.87)$$

A função de Green da rede é obtida novamente por um deslocamento das energias dos sítios, com a diferença de que agora, além de depender da frequência, este deslocamento varia sítio a sítio

$$G_{ll}(i\omega_n) = G_{ll}^{(0)}[\varepsilon_l \rightarrow \varepsilon_l + \Sigma_l(i\omega_n)], \quad (2.88)$$

onde $G_{ll}^{(0)}$ é a função de Green do Hamiltoniano de Hubbard desordenado (Eq. (2.70)) não interagente. Aplicando a condição de autoconsistência $G_{ll}(\omega) \equiv G_l^{(loc)}(\omega)$, ou seja, igualando as Eqs. (2.87) e (2.88), vem que

$$\Delta_l(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \varepsilon_l - \Sigma_l(i\omega_n) - \frac{1}{G_{ll}(i\omega_n)}. \quad (2.89)$$

O algoritmo da TEDCM pode ser sistematizado da seguinte forma:

1. Começamos com um palpite inicial para a função de hibridização $\Delta_l^{(antigo)}(\omega)$;
2. Resolvemos os problemas de uma impureza associados a cada um dos sítios da rede, Eq. (2.85), para encontrarmos a autoenergia $\Sigma_l^{(antigo)}(\omega)$ e as funções de Green $G_l^{(loc)(antigo)}(\omega)$ locais (Eq. (2.87));
3. Utilizando $\Sigma_l^{(antigo)}(\omega)$, calculamos as funções de Green locais da rede interagente $G_{ll}^{(antigo)}(\omega)$, Eq. (2.88);
4. Aplicando a condição de autoconsistência da TEDCM $G_{ll}^{(antigo)}(\omega) \equiv G_l^{(loc)(antigo)}(\omega)$ a cada um dos sítios da rede, calculamos os novos valores da função de hibridização $\Delta_l^{(novo)}(\omega)$, através da Eq. (2.89). Comparamos agora os valores de $\Delta_l^{(antigo)}(\omega)$ e $\Delta_l^{(novo)}(\omega)$ e retornamos ao passo 1, caso a condição de convergência não tenha sido atingida.

No Apêndice (A), discutimos a implementação numérica do algoritmo.

2.2.4 Bósons escravos

Começaremos discutindo como a técnica de bósons escravos se aplica ao Hamiltoniano de Hubbard, Eq. (2.62). Em seguida, utilizaremos esta técnica para resolver os problemas de uma impureza associados definidos por (2.85).

A ideia aqui é aumentarmos o espaço de Hilbert em cada sítio para que contenham, além dos férmions originais, um conjunto de quatro operadores bosônicos, e_i (e_i^{\dagger}), d_i (d_i^{\dagger}) e $p_{i\sigma}$ ($p_{i\sigma}^{\dagger}$), que estão associados respectivamente a

sítio vazio, ocupação dupla e ocupação simples [65]. Este novo espaço de Hilbert possui muito mais estados que o antigo. Para eliminarmos estes estados não físicos, impomos os seguintes vínculos

$$\sum_{\sigma} p_{i\sigma}^{\dagger} p_{i\sigma} + e_i^{\dagger} e_i + d_i^{\dagger} d_i = 1, \quad (2.90)$$

$$c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} = p_{i\sigma}^{\dagger} p_{i\sigma} + d_i^{\dagger} d_i. \quad (2.91)$$

O primeiro vínculo estabelece que só há quatro alternativas para a ocupação de um sítio: vazio, ocupação simples ou ocupação dupla. O segundo vínculo reforça que há duas maneiras de contarmos a ocupação de um sítio: ou olhamos para o número de férmions $(c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma})$ ou para o número de bósons $(p_{i\sigma}^{\dagger} p_{i\sigma} + d_i^{\dagger} d_i)$.

Definiremos agora o Hamiltoniano dado pela Eq. (2.62) em termos dos operadores de bósons escravos. Para isso, devemos fazer as transformações $c_{i\sigma} \rightarrow b_{i\sigma} f_{i\sigma}$ e $c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} = f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma}$, com $f_{i\sigma} (f_{i\sigma}^{\dagger})$ sendo o novo operador fermiônico de destruição (criação) de um elétron no sítio i . Daí

$$\tilde{H} = \sum_{ij,\sigma} t_{ij} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} b_{i\sigma}^{\dagger} b_{j\sigma} + U \sum_i d_i^{\dagger} d_i, \quad (2.92)$$

onde

$$b_{i\sigma} = \left(1 - p_{i\sigma}^{\dagger} p_{i\sigma} - d_i^{\dagger} d_i\right)^{-1/2} \left(e_i^{\dagger} p_{i\sigma} + p_{i\sigma}^{\dagger} d_i\right) \left(1 - p_{i-\sigma}^{\dagger} p_{i-\sigma} - e_i^{\dagger} e_i\right)^{-1/2}. \quad (2.93)$$

A aproximação de campo médio ocorre quando trocamos os operadores bosônicos $e_i (e_i^{\dagger})$, $d_i (d_i^{\dagger})$ e $p_{i\sigma} (p_{i\sigma}^{\dagger})$ por seus valores esperados $e = \langle e_i \rangle = \langle e_i^{\dagger} \rangle$, $d = \langle d_i \rangle = \langle d_i^{\dagger} \rangle$ e $p_{\sigma} = \langle p_{i\sigma} \rangle = \langle p_{i\sigma}^{\dagger} \rangle$. Deste modo, o Hamiltoniano resultante é quadrático nos operadores fermiônicos $f_{i\sigma}$ e $f_{i\sigma}^{\dagger}$ e é dado por

$$\tilde{H} = \sum_{\sigma} Z_{\sigma} \sum_{ij} t_{ij} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} + NUd^2, \quad (2.94)$$

onde N é o número de sítios e

$$Z_{\sigma} = \langle b_{i\sigma}^{\dagger} b_{j\sigma} \rangle = \langle b_{\sigma}^{\dagger} b_{\sigma} \rangle = \frac{(ep_{\sigma} + p_{-\sigma}d)^2}{(1-d^2-p_{\sigma}^2)(1-e^2-p_{-\sigma}^2)} \quad (2.95)$$

é o peso de quasipartícula. Vemos que $Z_{\sigma} \leq 1$ renormaliza o termo de “hopping” e, portanto, a massa efetiva das quasipartículas é

$$m_{\sigma}^* = \frac{m}{Z_{\sigma}}, \quad (2.96)$$

onde m é a massa não renormalizada pelas interações.

2.2.5 Solução do problema de uma impureza via bósons escravos

Reescreveremos a ação dada pela Eq. (2.85) em termos dos bósons escravos definidos anteriormente. Para tal, faremos as seguintes associações: $c_{l\sigma} \rightarrow b_{l\sigma} f_{l\sigma}$ e $c_{l\sigma}^{\dagger} c_{l\sigma} = f_{l\sigma}^{\dagger} f_{l\sigma}$, com $b_{l\sigma}$ dado pela Eq. (2.93). Segue-se que

$$\begin{aligned} S_{eff}^{(l)} &= \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \bar{f}_{l\sigma}(\tau) (\partial_{\tau} + \varepsilon_l - \mu) f_{l\sigma}(\tau) \\ &+ \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \bar{f}_{l\sigma}(\tau) \bar{b}_{l\sigma}(\tau) \Delta_l(\tau - \tau') b_{l\sigma}(\tau') f_{l\sigma}(\tau') + U \int_0^{\beta} d\tau \bar{d}_l(\tau) d_l(\tau). \end{aligned} \quad (2.97)$$

Vemos que o segundo termo da equação acima recebeu as variáveis $\bar{b}_{l\sigma}(\tau)$ e $b_{l\sigma}(\tau')$, ao passo que o primeiro termo não. O fato é que no, primeiro termo, todas as variáveis estão calculadas no mesmo tempo τ , e temos o equivalente a um operador número $(f_{l\sigma}^{\dagger}(\tau) f_{l\sigma}(\tau))$ que permanece inalterado $(c_{l\sigma}^{\dagger} c_{l\sigma} = f_{l\sigma}^{\dagger} f_{l\sigma})$.

Equivalentemente, podemos escrever os dois primeiros termos da Eq. (2.97) no espaço de frequências imaginárias

$$\begin{aligned}
 S_{eff}^{(l)} &= \sum_{n,\sigma} \bar{f}_{l\sigma}(i\omega_n) (-i\omega_n + \varepsilon_l - \mu) f_{l\sigma}(i\omega_n) \\
 &+ \sum_{n,\sigma} \bar{f}_{l\sigma}(i\omega_n) \bar{b}_{l\sigma}(i\omega_n) \Delta_l(i\omega_n) b_{l\sigma}(i\omega_n) f_{l\sigma}(i\omega_n) + U \int_0^\beta d\tau \bar{d}_l(\tau) d_l(\tau).
 \end{aligned} \tag{2.98}$$

Para impormos os vínculos dados pelas Eqs. (2.90) e (2.91), introduziremos dois multiplicadores de Lagrange $\lambda_l^{(1)}$ e $\lambda_l^{(2)}$. Trataremos a parte bosônica da ação dentro da aproximação de ponto de sela², considerando também a solução paramagnética. Assim, todas as variáveis bosônicas passam a ser independentes do tempo e iguais a seu valor médio, que é independente do spin

$$\begin{aligned}
 S_{eff}^{(l)} &= \sum_{n,\sigma} \bar{f}_{l\sigma}(i\omega_n) (-i\omega_n + \varepsilon_l - \mu + Z_l \Delta_l(i\omega_n)) f_{l\sigma}(i\omega_n) + U \beta d_l^2 \\
 &+ \beta \lambda_l^{(1)} \left(\sum_{\sigma} p_{l\sigma}^2 + e_l^2 + d_l^2 - 1 \right) + \lambda_l^{(2)} \sum_{\sigma,n} (\bar{f}_{l\sigma}(i\omega_n) f_{l\sigma}(i\omega_n) - p_{l\sigma}^2 - d_l^2),
 \end{aligned} \tag{2.99}$$

onde

$$Z_l = \langle b_{l\sigma}^\dagger b_{l\sigma} \rangle = 2 \left[1 - (e_l^2 - d_l^2)^2 \right]^{-1} (e_l + d_l)^2 (1 - e_l^2 - d_l^2). \tag{2.100}$$

Podemos calcular a função partição nesta aproximação de ponto de sela, pois a parte fermiônica é quadrática nas variáveis de Grassmann, e assim podemos integrá-la exatamente:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Z}_{eff}^{(l)} &= \exp \left[\sum_{n,\sigma} \ln \left(-i\omega_n + \varepsilon_l - \mu + \lambda_l^{(2)} + Z_l \Delta_l(i\omega_n) \right) \right] \times \\
 &\times \exp \left[-\beta \left\{ U d_l^2 + \lambda_l^{(1)} \left(\sum_{\sigma} p_{l\sigma}^2 + e_l^2 + d_l^2 - 1 \right) - \lambda_l^{(2)} \sum_{\sigma} (p_{l\sigma}^2 + d_l^2) \right\} \right].
 \end{aligned} \tag{2.101}$$

Com a função partição, obtemos a energia livre $F_{eff}^{(l)}$

$$\begin{aligned}
 F_{eff}^{(l)} &= -\frac{1}{\beta} \sum_{n,\sigma} \ln \left(-i\omega_n + \varepsilon_l - \mu + \lambda_l^{(2)} + Z_l \Delta_l(i\omega_n) \right) + U d_l^2 \\
 &+ \lambda_l^{(1)} \left(\sum_{\sigma} p_{l\sigma}^2 + e_l^2 + d_l^2 - 1 \right) - \lambda_l^{(2)} \sum_{\sigma} (p_{l\sigma}^2 + d_l^2).
 \end{aligned} \tag{2.102}$$

Temos quatro parâmetros variacionais independentes: e_l , d_l , $\lambda_l^{(1)}$ e $\lambda_l^{(2)}$. Devemos agora minimizar a energia livre acima com respeito a cada um deles. Olhando para sua forma, concluímos que ao minimizarmos $F_{eff}^{(l)}$ com relação à $\lambda_l^{(1)}$ obteremos que o vínculo dado pela Eq. (2.90) é satisfeito na média. Usando esse fato, a energia livre dada pela Eq. (2.102) é reescrita como

$$F_{eff}^{(l)} = -\frac{1}{\beta} \sum_{n,\sigma} \ln \left(-i\omega_n + \varepsilon_l - \mu + \lambda_l^{(2)} + Z_l \Delta_l(i\omega_n) \right) + U d_l^2 - \lambda_l^{(2)} (1 + d_l^2 - e_l^2). \tag{2.103}$$

Utilizando agora a Eq. (2.99), podemos calcular a função de Green associada a esta ação

$$\tilde{G}_l^{(loc)}(i\omega_n) = - \left\langle f_{l\sigma}(i\omega_n) f_{l\sigma}^\dagger(i\omega_n) \right\rangle_{S_{eff}} = \frac{1}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_l - Z_l \Delta_l(i\omega_n)}, \tag{2.104}$$

onde definimos a energia renormalizada $\tilde{\varepsilon}_l$ como

$$\tilde{\varepsilon}_l = \varepsilon_l - \mu + \lambda_l^{(2)}. \tag{2.105}$$

²Esta discussão é análoga àquela da seção (2.1)

A Eq. (2.104) dá a função de Green das quasipartículas. A função de Green local dos elétrons físicos $G_l^{(loc)}$ pode ser obtida lembrando que, na aproximação de bósons escravos, $c_{l\sigma} \rightarrow b_{l\sigma} f_{l\sigma}$, e que os bósons são tratados em ponto de sela

$$G_l^{(loc)}(i\omega_n) = Z_l \tilde{G}_l^{(loc)}(i\omega_n). \quad (2.106)$$

Minimizando a energia livre dada da Eq. (2.103) com respeito a e_l , d_l e $\lambda_l^{(2)}$, obtemos o seguinte conjunto de equações

$$-\frac{\partial Z_l}{\partial e_l} T \sum_n \Delta_l(i\omega_n) \tilde{G}_l^{(loc)}(i\omega_n) = (\mu + \tilde{\varepsilon}_l - \varepsilon_l) e_l, \quad (2.107)$$

$$-\frac{\partial Z_l}{\partial d_l} T \sum_n \Delta_l(i\omega_n) \tilde{G}_l^{(loc)}(i\omega_n) = (U - \mu - \tilde{\varepsilon}_l + \varepsilon_l) d_l, \quad (2.108)$$

$$T \sum_n \tilde{G}_l^{(loc)}(i\omega_n) = \frac{1}{2} (1 - e_l^2 + d_l^2). \quad (2.109)$$

Dividindo a Eq. (2.107) pela Eq. (2.108), temos que

$$\tilde{\varepsilon}_l = \varepsilon_l - \mu + U d_l \frac{\partial Z_l}{\partial e_l} \left(\frac{\partial Z_l}{\partial e_l} d_l + \frac{\partial Z_l}{\partial d_l} e_l \right)^{-1}, \quad (2.110)$$

e vemos que apenas os parâmetros variacionais e_l e d_l precisam ser determinados através das equações de campo médio. Dada uma função de hibridização $\Delta_l(i\omega_n)$, resolvemos numericamente o sistema de equações, formado, por exemplo, pelas Eqs. (2.107) e (2.109), determinando assim os valores de e_l e d_l para valores fixos de U , μ , T e ε_l .

Dentro da aproximação de bósons escravos, também podemos encontrar uma parametrização para a autoenergia eletrônica $\Sigma_l(i\omega_n)$. Igualando as Eqs. (2.87) e (2.106), vemos que

$$\Sigma_l(i\omega_n) = i\omega_n \left(1 - \frac{1}{Z_l} \right) + v_l - \varepsilon_l + \mu, \quad (2.111)$$

onde definimos que

$$v_l = \varepsilon_l + \Sigma_l(0) - \mu = \frac{\tilde{\varepsilon}_l}{Z_l}, \quad (2.112)$$

é o potencial renormalizado de desordem.

2.2.6 Solução do problema de rede via bósons escravos

Nesta seção, resolveremos o Hamiltoniano de Hubbard desordenado dado pela Eq. (2.2) considerando diretamente a aproximação de bósons escravos na rede e mostraremos que este procedimento é equivalente ao descrito anteriormente, no qual empregamos esta abordagem de bósons escravos para resolvermos os problemas de uma impureza associados da TEDCM.

O primeiro passo é realizarmos as transformações $c_{i\sigma} \rightarrow b_{i\sigma} f_{i\sigma}$ e $c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} = f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$, onde o operador $b_{i\sigma}$ é dado pela Eq. (2.93), $f_{i\sigma}$, $f_{i\sigma}^\dagger$ são os novos operadores fermiônicos deste espaço de Hilbert aumentado e impomos os vínculos (2.90) e (2.91) para eliminarmos os espaços não físicos. O Hamiltoniano resultante é

$$H_{BE} = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + U \sum_i d_i^\dagger d_i. \quad (2.113)$$

Agora, escrevemos a função partição para este modelo utilizando uma integral funcional

$$\mathcal{Z} = \int [\mathcal{D}(e, d, p, \lambda^{(1,2)})] [\mathcal{D}(f)] \exp \left[- \int_0^\beta \mathcal{L}(\tau) \right], \quad (2.114)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\tau) = & \sum_{ij,\sigma} f_{i\sigma}^\dagger \left\{ \delta_{ij} \left(\partial_\tau + \varepsilon_i - \mu + \lambda_{i\sigma}^{(2)} \right) - t_{ij} b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} \right\} f_{j\sigma} + \sum_{i,\sigma} p_{i\sigma}^\dagger \left(\partial_\tau + \lambda_i^{(1)} - \lambda_{i\sigma}^{(2)} \right) p_{i\sigma} \\ & + \sum_i \left\{ e_i^\dagger \left(\partial_\tau + \lambda_i^{(1)} \right) e_i + d_i^\dagger \left(\partial_\tau + U + \lambda_i^{(1)} - \sum_\sigma \lambda_{i\sigma}^{(2)} \right) d_i - \lambda_i^{(1)} \right\}, \end{aligned} \quad (2.115)$$

é a Lagrangeana correspondente ao Hamiltoniano efetivo da Eq. (2.113). Os multiplicadores de Lagrange $\lambda_i^{(1)}$ e $\lambda_{i\sigma}^{(2)}$ impõem, respectivamente, os vínculos (2.90) e (2.91).

Como estamos interessados no problema desordenado, manteremos a dependência com o sítio para os operadores bosônicos e fermiônicos. Contudo, consideraremos a dependência temporal vinda apenas dos operadores fermiônicos $f_{i\sigma}(\tau)$ ($f_{i\sigma}^\dagger(\tau)$) e ignoraremos aquela vinda dos operadores bosônicos e dos multiplicadores de Lagrange (aproximação de campo médio ou ponto de sela). Além disso, já assumiremos desde o início a solução paramagnética ($p_{i\uparrow} = p_{i\downarrow}$). A ação $S = -\int_0^\beta d\tau \mathcal{L}(\tau)$, calculada no ponto de sela, é dada por

$$\begin{aligned} S^0 &= \sum_{ij,\sigma,n} f_{i\sigma}^\dagger(i\omega_n) \left\{ \delta_{ij}(-i\omega_n + \tilde{\varepsilon}_i) - \sqrt{Z_i} t_{ij} \sqrt{Z_j} \right\} f_{j\sigma}(i\omega_n) \\ &+ \beta \sum_i \left\{ U d_i^2 - [\tilde{\varepsilon}_i + \mu - \varepsilon_i] [1 - e_i^2 + d_i^2] \right\}, \end{aligned} \quad (2.116)$$

onde o peso de quasipartícula Z_i é definido na Eq. (2.100) e a energia renormalizada $\tilde{\varepsilon}_i$ na Eq. (2.105). Acima, já eliminamos o vínculo dado pela Eq. (2.90), uma vez que ele é naturalmente satisfeito no ponto de sela ao minimizarmos a ação com respeito a $\lambda_i^{(1)}$.

A função partição calculada no ponto de sela é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}^0 &= \exp \left[-\beta \sum_i \left\{ U d_i^2 - [\tilde{\varepsilon}_i + \mu - \varepsilon_i] [1 - e_i^2 + d_i^2] \right\} \right] \\ &\times \prod_n \int [\mathcal{D}(f)] \exp \left[-\sum_{ij,\sigma} f_{i\sigma}^\dagger A_{ij}(\omega_n) f_{j\sigma} \right], \end{aligned}$$

onde a matriz $A_{ij}(\omega_n)$ é dada por

$$A_{ij}(\omega_n) = \delta_{ij}(-i\omega_n + \tilde{\varepsilon}_i) - \sqrt{Z_i} t_{ij} \sqrt{Z_j}. \quad (2.117)$$

A integral da parte fermiônica é Gaussiana e pode ser avaliada, Eq. (B.4), o que nos dá

$$\mathcal{Z}^0 = C \exp \left[-\beta \sum_i \left\{ U d_i^2 - [\tilde{\varepsilon}_i + \mu - \varepsilon_i] [1 - e_i^2 + d_i^2] \right\} + \sum_{n,\sigma} \text{tr} \ln A(\omega_n) \right]. \quad (2.118)$$

Pela definição da matriz A , Eq. (2.117), vemos que ela não depende do spin, e por isso a soma sobre o spin já está explicitamente separada do traço.

Antes de prosseguirmos e avaliarmos o termo $\text{tr} \ln A(\omega_n)$, vamos encontrar a função de Green da rede $G_{ii}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau c_i(\tau) c_i^\dagger(\tau') \rangle$, onde T_τ é o operador de ordenamento temporal (imaginário), que deixa os maiores tempos sempre à esquerda dos menores. Dentro da aproximação do ponto de sela, $G_{ii}(\tau - \tau') = -Z_i \langle T_\tau f_i(\tau) f_i^\dagger(\tau') \rangle$ e podemos escrever

$$G_{ii}(i\omega_m) = -Z_i \times \frac{1}{\mathcal{Z}^0} \int [\mathcal{D}(e, d, p, \lambda^{(2)})] [\mathcal{D}(f)] f_{i,m} f_{i,m}^\dagger \exp[-\mathcal{L}^0].$$

Para encontrarmos a função de Green, introduzimos termos de corrente na integral acima, o que nos dá

$$G_{ii}(i\omega_m) = -Z_i \frac{\mathcal{Z}_{bos}^0}{\mathcal{Z}^0} \int [\mathcal{D}(f)] \frac{\delta^2}{\delta J_{i,m}^* \delta J_{i,m}} \exp \left[-\sum_{kj,m',\sigma} f_{k\sigma}^\dagger A_{kj}(\omega_{m'}) f_{j\sigma} + \sum_j \left(J_{j,m'}^* f_{j,m'} + f_{j,m'}^\dagger J_{j,m'} \right) \right] \Bigg|_{J=J^*=0},$$

onde \mathcal{Z}_{bos}^0 é a parte bosônica da função partição \mathcal{Z}^0 definida na Eq. (2.118), tal que $\mathcal{Z}^0 = \mathcal{Z}_{bos}^0 \exp \left[\sum_{n,\sigma} \text{tr} \ln A(\omega_n) \right]$. Como a integral é quadrática nos operadores fermiônicos $f_{i\sigma}$ e $f_{i\sigma}^\dagger$, podemos realizar a integral Gaussiana, o que

nos dá

$$\begin{aligned}
 G_{ii}(i\omega_m) &= -Z_l \frac{\delta^2}{\delta J_{i,m}^* \delta J_{i,m}} \exp \left[- \sum_{kj,m'} J_{k,m'}^* A_{kj}^{-1}(\omega_{m'}) J_{j,m'} \right] \Bigg|_{J=J^*=0} \\
 &= -\sqrt{Z_i} A_{ii}^{-1}(\omega_m) \sqrt{Z_i} \\
 &= \langle i | (i\omega_m \mathbf{Z}^{-1} - \mathbf{v} - \mathbf{H}_0)^{-1} | i \rangle,
 \end{aligned} \tag{2.119}$$

onde os operadores \mathbf{Z} e \mathbf{v} são matrizes diagonais na base dos sítios tais que $[\mathbf{Z}]_{ij} = Z_i \delta_{ij}$; $[\mathbf{v}]_{ij} = v_i \delta_{ij}$, \mathbf{H}_0 é o Hamiltoniano da rede limpa e não interagente $[\mathbf{H}_0]_{ij} = h_{ij}$. Vale lembrar aqui que, como \mathbf{Z} e \mathbf{v} são diagonais, eles comutam entre si, e também que $\mathbf{v} = \mathbf{Z}^{-1/2} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{Z}^{-1/2}$, onde $[\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}]_{ij} = \varepsilon_i \delta_{ij}$.

Dentro dessa aproximação, a energia livre é definida como $F^0 = -T \ln \mathcal{Z}^0$, onde \mathcal{Z}^0 é dada pela Eq. (2.118) e obtemos

$$F^0 = -2T \sum_n \text{tr} \ln \left[-i\omega_n \mathbf{1} + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{Z}^{1/2} \mathbf{H}_0 \mathbf{Z}^{1/2} \right] + \sum_i \{ U d_i^2 - [\tilde{\varepsilon}_i + \mu - \varepsilon_i] [1 - e_i^2 + d_i^2] \}. \tag{2.120}$$

Podemos avaliar o traço na base dos sítios, o que nos dá

$$F^0 = \sum_i \left\{ -2T \sum_n \langle i | \ln \left[-i\omega_n \mathbf{1} + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{Z}^{1/2} \mathbf{H}_0 \mathbf{Z}^{1/2} \right] | i \rangle + U d_i^2 - [\tilde{\varepsilon}_i + \mu - \varepsilon_i] [1 - e_i^2 + d_i^2] \right\}. \tag{2.121}$$

Vemos que a energia livre da rede pode ser escrita como $F^0 = \sum_i F_i^0$, onde F_i^0 é a energia livre local associada a cada um dos sítios. Esta forma já nos indica que a aproximação de bósons escravos dá uma descrição puramente local, análoga àquela da TEDCM. Minimizando F_i^0 com respeito a $\tilde{\varepsilon}_j$, vemos que

$$\begin{aligned}
 2T \sum_n \langle i | \left[i\omega_n \mathbf{1} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} - \mathbf{Z}^{1/2} \mathbf{H}_0 \mathbf{Z}^{1/2} \right]^{-1} \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}{\partial \tilde{\varepsilon}_j} | i \rangle &= \delta_{ij} (1 - e_i^2 + d_i^2) \\
 T \sum_n G_{ii}(i\omega_n) &= Z_i \frac{1}{2} (1 - e_i^2 + d_i^2).
 \end{aligned} \tag{2.122}$$

Acima, usamos o fato de que $\partial \tilde{\varepsilon}_i / \partial \tilde{\varepsilon}_j = \delta_{ij}$. Esta é a mesma expressão encontrada anteriormente na Eq. (2.109), ao utilizarmos a abordagem de bósons escravos para resolvermos os problemas de uma impureza associados dentro da TEDCM.

Minimizamos a Eq. (2.121) agora com respeito a e_j

$$\begin{aligned}
 T \sum_n \langle i | \left[i\omega_n \mathbf{1} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} - \mathbf{Z}^{1/2} \mathbf{H}_0 \mathbf{Z}^{1/2} \right]^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial e_j} \mathbf{Z}^{-1/2} \mathbf{H}_0 \mathbf{Z}^{1/2} + \mathbf{Z}^{1/2} \mathbf{H}_0 \mathbf{Z}^{-1/2} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial e_j} \right) | i \rangle &= -2\delta_{ij} [\tilde{\varepsilon}_i + \mu - \varepsilon_i] e_i, \\
 T \sum_{n,k} \langle i | \left[i\omega_n \mathbf{1} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} - \mathbf{Z}^{1/2} \mathbf{H}_0 \mathbf{Z}^{1/2} \right]^{-1} | k \rangle \left(\frac{\partial Z_k}{\partial e_j} Z_k^{-1/2} h_{ki} Z_i^{1/2} + Z_k^{1/2} h_{ki} Z_i^{-1/2} \frac{\partial Z_i}{\partial e_j} \right) &= -2\delta_{ij} [\tilde{\varepsilon}_i + \mu - \varepsilon_i] e_i.
 \end{aligned}$$

Na passagem da primeira para a segunda linha, introduzimos a relação de completudeza $\sum_k |k\rangle \langle k| = 1$ e usamos que $h_{ki} = \langle k | \mathbf{H}_0 | i \rangle$. Como $h_{ik} = h_{ki}$, $G_{ik} = G_{ki}$ e $\partial Z_k / \partial e_i = \delta_{ik} \partial Z_i / \partial e_i$, vemos que ambos os termos dentro dos parênteses do lado esquerdo da equação acima são iguais, de forma que temos

$$-2T \frac{\partial Z_i}{\partial e_i} \sum_{n,k} G_{ik}(i\omega_n) h_{ki} = 2Z_i [\tilde{\varepsilon}_i + \mu - \varepsilon_i] e_i. \tag{2.123}$$

A minimização da Eq. (2.121) com relação a d_i é análoga

$$-2T \frac{\partial Z_i}{\partial d_i} \sum_{n,k} G_{ik}(i\omega_n) h_{ki} = 2Z_i [U - \tilde{\varepsilon}_i - \mu + \varepsilon_i] d_i. \tag{2.124}$$

Como vemos, as Eqs. (2.123) e (2.124) não possuem a mesma forma das Eqs. (2.107) e (2.108). Para finalmente estabelecermos a equivalência entre elas, precisamos verificar a seguinte igualdade

$$\Delta_i(i\omega_n) G_{ii}(i\omega_n) = \sum_k G_{ik}(i\omega_n) h_{ki}. \tag{2.125}$$

Para tal, reescrevemos a definição da função de Green da rede dada na Eq. (2.119) em termos de operadores como

$$\mathbf{G}(i\omega_n) (i\omega_n \mathbf{Z}^{-1} - \mathbf{v} - \mathbf{H}_0) = \mathbf{1}, \quad (2.126)$$

donde

$$\begin{aligned} \langle i | \mathbf{G}(i\omega_n) \left\{ \sum_k |k\rangle \langle k| \right\} (i\omega_n \mathbf{Z}^{-1} - \mathbf{v} - \mathbf{H}_0) |i\rangle &= 1, \\ \left(\frac{i\omega_n}{Z_i} - v_i \right) G_{ii}(i\omega_n) - \sum_k G_{ik}(i\omega_n) h_{ki} &= 1, \end{aligned} \quad (2.127)$$

e portanto

$$\sum_k G_{ik}(i\omega_n) h_{ki} = \left(\frac{i\omega_n}{Z_i} - v_i \right) G_{ii}(i\omega_n) - 1. \quad (2.128)$$

Agora, utilizamos a função de Green local, Eqs. (2.104) e (2.106), que emerge ao aplicarmos a aproximação de bósons escravos para resolvermos os problemas de uma impureza associados dentro da TEDCM, de forma a encontrarmos a função de hibridização $\Delta_i(i\omega_n)$

$$\Delta_i(i\omega_n) G_i^{(loc)}(i\omega_n) = \left(\frac{i\omega_n}{Z_i} - v_i \right) G_i^{(loc)}(i\omega_n) - 1. \quad (2.129)$$

A condição de autoconsistência da TEDCM impõe que $G_i^{(loc)}(i\omega_n) \equiv G_{ii}(i\omega_n)$, o que nos dá

$$\Delta_i(i\omega_n) G_{ii}(i\omega_n) = \left(\frac{i\omega_n}{Z_i} - v_i \right) G_{ii}(i\omega_n) - 1. \quad (2.130)$$

Comparando as Eqs. (2.128) e (2.130), vemos que a condição para a equivalência entre os formalismos estabelecida pela Eq. (2.125) é satisfeita.

Embora formalmente equivalentes, estes dois métodos são muito diferentes do ponto de vista numérico. Ao aplicarmos diretamente o formalismo de bósons escravos no problema da rede, precisamos resolver um conjunto de $2N$ equações não lineares acopladas, Eqs. (2.122)-(2.124), para todos os sítios da rede ao mesmo tempo. Já para o formalismo de TEDCM, resolvemos duas equações para cada um dos N sítios de forma independente, Eqs. (2.107)-(2.109), o que torna o algoritmo muito mais estável. O preço que pagamos ao utilizarmos o formalismo da TEDCM é que temos que fazer a soma sobre frequências nas Eqs. (2.107)-(2.109) numericamente, ao passo que estas somas nas Eqs. (2.122)-(2.124) são feitas analiticamente, uma vez que a função de Green neste formalismo (Eq. (2.119)) é idêntica àquela do caso não interagente.

Fase de Griffiths eletrônica da transição de Mott em $d = 2$

Efeitos da desordem em transições de fase quânticas têm demonstrado ser muito mais dramáticos do que para sistemas clássicos [16]. Para estas transições, alguns pontos críticos podem ser descritos como pontos críticos de desordem infinita [18] com sua fase de Griffiths correspondente. Este comportamento exótico é bem entendido para sistemas magnéticos isolantes que apresentam um parâmetro de ordem com simetria discreta, mas ele pode ou não sobreviver em outros modelos, ou mesmo na presença de dissipação devido aos elétrons de condução [2, 86, 87].

Transições metal-isolante representam outra importante classe de transições de fase quânticas, com a característica especial de que esta transição não está associada a nenhuma quebra de simetria. Teorias convencionais para a transição metal-isolante em sistemas desordenados [9] tratam a desordem na média. Embora estas abordagens tenham o apelo de serem muito similares às teorias de transição de fase usuais, elas não incorporam a física de eventos raros ou do ponto fixo de desordem infinita. Existe contudo um grande conjunto de dados experimentais documentando a emergência de um comportamento do tipo não líquido de Fermi devido à presença de configurações raras de desordem [2, 88, 89, 90], mesmo para sistemas que estejam longe de qualquer tipo de ordenamento de carga ou spin, o que levou à introdução do conceito de fase de Griffiths eletrônica [17, 25, 37].

Para situarmos melhor nossa discussão, descrevemos brevemente na seção (3.1) a teoria de Landau para transições de fase, com especial enfoque nas transições de segunda ordem ou contínuas. Também entramos no foco principal da nossa pesquisa, que é exatamente como a desordem afeta as transições de fase. A maneira usual de encarar este problema é tratar os efeitos da desordem na média, o que leva, por exemplo, à elaboração do critério de Harris. Para sistemas eletrônicos, esta abordagem é certamente mais conveniente do ponto de vista operacional, contudo não é capaz de capturar nem efeitos de localização de Anderson nem a física de regiões raras, que, como veremos, são de central importância para explicarmos a fase de Griffiths eletrônica.

A transição metal-isolante de Mott na ausência de desordem é discutida na seção (3.2.1). Esta é uma transição que ocorre em sistemas nos quais a repulsão Coulombiana é comparável à energia cinética dos elétrons e envolve a abertura de um “gap” (“gap” de Mott) na densidade de estados eletrônicos. Como modelo para estudarmos esta transição, adotamos o tradicional modelo de Hubbard, que é vastamente utilizado no campo de sistemas fortemente correlacionados. Para tratar este Hamiltoniano, utilizamos a aproximação de bósons escravos, que reproduz o cenário de Brinkman-Rice para a transição de Mott. Nesta aproximação de campo médio, ignoramos as correlações magnéticas entre os sítios e focamos apenas nos efeitos locais da interação, obtendo uma descrição do tipo líquido de Fermi para o metal, onde a massa efetiva das quasipartículas é fortemente renormalizada, divergindo na transição de Mott, marcando assim a transmutação dos elétrons em momentos magnéticos localizados.

Cientes do regime de validade do cenário de Brinkman-Rice, passamos ao estudo da transição de Mott na presença de desordem na seção (3.2.2). Tratamos a desordem exatamente através da diagonalização numérica de redes finitas, capturando os efeitos de localização de Anderson e a física de efeitos raros. Construímos um diagrama de fases para o modelo de Hubbard desordenado em $d = 2$ a $T = 0$. Se por um lado este diagrama possui o comportamento geral esperado, ou seja, o aumento com a desordem do valor crítico de interação para o qual a transição de Mott ocorre, ele também apresenta uma característica inédita: uma fase de Griffiths eletrônica sempre precedendo a transição [36]. Vemos também que as duas quantidades físicas relevantes para o problema possuem comportamentos distintos próximos da transição de Mott. Enquanto a distribuição das energias renormalizadas dos

sítios diminui sua largura, a largura da distribuição do peso de quasipartícula aumenta! Essa dicotomia dá origem a uma blindagem da desordem pela interação que depende da energia na qual sondamos o sistema [38].

A fase de Griffiths eletrônica é explorada na seção (3.3). Antes do nosso trabalho, essa fase havia sido identificada apenas na vizinhança de transições metal-isolante induzidas pela desordem (transição de Anderson) em sistemas eletrônicos correlacionados. O nosso trabalho mostrou que esta fase está também presente na vizinhança de uma transição induzida pela interação, mesmo para valores pequenos e moderados de desordem. Também fomos capazes de monitorar melhor o comportamento crítico do sistema e estabelecemos vários paralelos entre a fase de Griffiths eletrônica e aquela encontrada em magnetos desordenados. A importância das correlações espaciais é mais uma vez reforçada ao compararmos os resultados em $d = \infty$ e $d = 2$ e ao estudarmos as propriedades das regiões raras em nosso sistema.

3.1 Teoria fenomenológica de Landau das transições de fase

A maioria das teorias modernas de transição de fase é baseada na teoria fenomenológica de Landau [11, 91, 92]. Landau introduziu o conceito de parâmetro de ordem, uma quantidade termodinâmica que é zero em uma fase (a fase desordenada¹) e é diferente de zero na outra fase (fase ordenada). A escolha apropriada do parâmetro de ordem varia consideravelmente de problema para problema. No caso de uma transição ferromagnética, ela é simples uma vez que a magnetização total é um parâmetro de ordem. Já no caso da transição de Anderson, encontrar o parâmetro de ordem em si é um problema complicado.

3.1.1 Introdução

A teoria de campo médio de Landau baseia-se no fato de que a energia livre F é uma função analítica do parâmetro de ordem η e portanto podemos expandi-la em uma série de potência em η

$$F = F_L(\eta) = F_0 + r\eta^2 + v\eta^3 + u\eta^4 + \mathcal{O}[\eta^5]. \quad (3.1)$$

Aqui r , v e u são parâmetros que dependem de todos os graus de liberdade do sistema menos do parâmetro de ordem η . O valor físico de η é aquele que minimiza F_L . Se o mínimo da energia livre corresponde a $\eta = 0$ o sistema está na fase desordenada, ao passo que se o mínimo ocorre para algum $\eta \neq 0$, o sistema está na fase ordenada. Se $v \neq 0$, a transição de $\eta = 0$ para $\eta \neq 0$ ocorre descontinuamente, ou seja é uma transição de primeira ordem. Quando $v = 0$ (como geralmente é o caso por simetria), a teoria descreve uma transição contínua ou ponto crítico para $r = 0$. Portanto, r mede a distância do ponto crítico. Por exemplo, $r \propto (T - T_c)$ para uma transição de fase térmica, onde T é a temperatura do sistema e T_c é a temperatura crítica para a qual a transição de fase ocorre.

Dentro da teoria de Landau, o comportamento qualitativo de todos os pontos críticos é o mesmo. Por exemplo, o parâmetro de ordem vai a zero quando nos aproximamos do ponto crítico pela fase ordenada como

$$\eta = \left(\frac{-r}{2u} \right)^\beta, \quad (3.2)$$

onde o expoente β , que descreve a singularidade do parâmetro de ordem no ponto crítico, tem sempre valor $1/2$. Uma universalidade dos expoentes críticos é de fato observada em experimentos, mas é uma universalidade mais fraca que a prevista pela teoria de Landau. Em particular, os expoentes críticos podem depender da dimensão d .

A razão pela qual a teoria de Landau falha na descrição do comportamento crítico é que ela não considera flutuações do parâmetro de ordem ao redor do seu valor médio. Essas flutuações geralmente decrescem com a dimensão e também com o número de componentes do parâmetro do ordem. Esse fato sugere que a teoria de Landau é capaz de descrever o comportamento crítico correto para sistemas com uma dimensionalidade d suficientemente alta. De fato, flutuações introduzem duas dimensões características para uma transição de fase: a dimensão crítica inferior d_c^- e a dimensão crítica superior d_c^+ . Se $d \geq d_c^+$, podemos desprezar as flutuações e a teoria de Landau dá a resposta correta. Se $d_c^- < d < d_c^+$ ainda temos uma transição de fase, mas seu comportamento não é mais descrito pela teoria de Landau. Para $d \leq d_c^-$, as flutuações tornam-se tão fortes que destroem completamente a fase ordenada.

¹Pela nomenclatura padrão, fase desordenada significa uma fase sem ordem de longo alcance. Este termo desordem não deve ser confundido com a desordem proveniente de impurezas ou defeitos, que é o que será exaustivamente utilizado nesta tese.

Por esta discussão, abaixo da dimensão crítica superior as flutuações do parâmetro de ordem têm um papel fundamental no comportamento crítico do sistema. Para inclui-las, devemos generalizar a energia livre de Landau F dada pela Eq. (3.1). Isso é feito ao escrevermos a função partição do sistema como uma integral funcional

$$Z = e^{-F/T} = \int D[\phi] e^{-S[\phi]}, \quad (3.3)$$

com a ação ou funcional de Landau dada por

$$S[\phi] = \frac{1}{T} \int d^d x \left\{ (\nabla \phi(x))^2 + F(\phi(x)) - h\phi(x) \right\}. \quad (3.4)$$

Aqui, $\phi(x)$ é um campo cujo valor médio é igual ao parâmetro de ordem $\langle \phi(x) \rangle = \eta$, onde $\langle \dots \rangle$ denota a média com respeito ao peso estatístico $e^{-S[\phi]}$, e h é um campo externo conjugado ao parâmetro de ordem.

Na fase desordenada e longe da transição, a função de correlação das flutuações do parâmetro de ordem $G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \langle \phi(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{y}) \rangle$ é genericamente de curto alcance. Quando nos aproximamos da criticalidade, as correlações tornam-se de longo alcance. A escala de comprimento característica destas correlações, o comprimento de correlação ξ , diverge quando a distância r ao ponto crítico vai a zero,

$$\xi \propto |r|^{-\nu}. \quad (3.5)$$

Aqui, ν é o expoente crítico do comprimento de correlação. Próximo ao ponto crítico, o comprimento de correlação é a única escala relevante no sistema.

É interessante notarmos que o comprimento de correlação também governa como o parâmetro de ordem varia no espaço em resposta a um *campo externo inhomogêneo* ($h(x)$ da Eq. (3.4)). Aplicada uma perturbação deste tipo ao sistema, ainda podemos construir uma solução autoconsistente para o parâmetro de ordem dentro de uma teoria de campo médio de Landau.

3.1.2 Efeitos da desordem nas transições de fase

Inicialmente, pensou-se que a desordem destruiria todo o tipo de ponto crítico, pois, devido à presença de defeitos, o sistema iria se subdividir em várias regiões espaciais que sofreriam a transição de fase independentemente com diferentes temperaturas críticas. Argumentaremos aqui que este não é o caso, pois uma transição de fase permanece bem definida na presença de defeitos, pelo menos para sistemas clássicos na presença de desordem com correlações de curto alcance.

Assumiremos que o único efeito da desordem é introduzir uma distribuição de temperaturas de transições T_c no sistema, naturalmente fazendo com que $T_c = T_c(\mathbf{x})$. Neste contexto, temos também que as duas fases do material não mudam qualitativamente devido à introdução da desordem. Em um ferromagneto, por exemplo, temperaturas aleatórias podem ser introduzidas pela diluição da rede, ou seja, a troca de átomos magnéticos por não magnéticos.

3.1.2.1 Desordem média e critério de Harris

Harris [93] estabeleceu um critério para a estabilidade de um ponto crítico limpo na presença de desordem fraca descorrelacionada (defeitos pontuais), ou mesmo com correlações de curto alcance.

Considere que o sistema de volume V foi dividido em N blocos de tamanho linear ξ , como mostrado pictoricamente na Fig. (3.1). A temperatura crítica de cada um destes blocos será tomada como uma média de $r(\mathbf{x}) = r + \delta r(\mathbf{x})$ no volume $V_b \sim \xi^d$ de cada bloco. Deste modo, uma transição de fase bem definida só pode ocorrer se a variação de temperatura Δr entre os blocos é menor do que a distância global r da transição.

Para desordem descorrelacionada, o teorema do limite central diz que a variação de temperatura vai com a raiz quadrada do número de blocos

$$\Delta r \sim \sqrt{N} \sim \sqrt{\frac{V}{\xi^d}} \sim \xi^{-d/2}. \quad (3.6)$$

Usando as Eqs. (3.5) e (3.6), podemos escrever que $\Delta r \sim r^{d\nu/2}$. Para que a transição seja bem definida, devemos ter $\Delta r/r < 1$, o que nos leva ao critério de Harris

$$d\nu < 2, \quad (3.7)$$

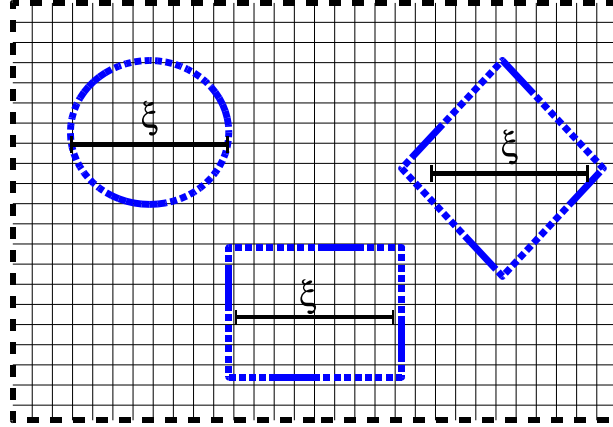


Figura 3.1: Divisão pictórica de um sistema de volume V em N blocos de escala linear ξ , onde ξ é o comprimento de correlação da transição de fase limpa (sem desordem).

onde ν é o expoente crítico do comprimento de correlação do sistema limpo. Devemos notar que o critério de Harris fornece uma condição necessária, mas não suficiente, para a estabilidade do ponto crítico limpo na presença de desordem.

3.1.2.2 Regiões raras e as singularidades de Griffiths

Para derivarmos o critério de Harris, discutimos os efeitos da desordem em transições de fase nos baseando no comportamento *médio (global)* da desordem. Agora, gostaríamos de discutir os efeitos que flutuações raras de desordem podem ter sobre o sistema [16]. Concentraremos a discussão em magnetos diluídos como aquele esboçado na Fig. (3.2). A diluição pode ser pensada como a introdução de átomos não magnéticos, ou equivalentemente, de vacâncias.

A diluição reduz a tendência ao ordenamento magnético e, portanto, reduz T_c com relação ao seu valor no caso limpo T_c^0 . Contudo, para um sistema infinito, podemos encontrar regiões espaciais arbitrariamente grandes que não possuam impurezas. Para temperaturas entre T_c e T_c^0 , essas regiões estão ordenadas magneticamente, apesar de o sistema como um todo ainda estar na fase paramagnética. Estas regiões espaciais são conhecidas como *regiões raras* e as flutuações no parâmetro de ordem induzidas por elas são conhecidas como *momentos locais*. A dinâmica de uma região rara é muito lenta, uma vez que mudar seu spin de direção envolve uma mudança coerente do parâmetro de ordem sobre um volume muito grande. Griffiths [14] foi o primeiro a mostrar que tais regiões raras podem levar a singularidades na energia livre, as singularidades de Griffiths. Essas singularidades ocorrem em todo o intervalo de temperatura entre T_c e T_c^0 , que agora é conhecido como região ou fase de Griffiths. Singularidades análogas também ocorrem no lado ordenado da transição.

A probabilidade de encontrarmos um região rara é exponencialmente pequena no seu volume V_R e na concentração de impurezas p , $P_R \sim \exp[-pV_R]$. Assim, regiões raras são graus de liberdade *não perturbativos*. Elas podem ser vistas dentro de uma classe maior de eventos raros, da qual um exemplo são as caudas de Lifshitz presentes na densidade de estados de semicondutores desordenados [94].

No caso das transições de fase clássicas, as singularidades termodinâmicas de Griffiths aparecem como singularidades essenciais na energia livre e, portanto, são muito (exponencialmente) fracas. Por este motivo, não há, até o presente momento, nenhuma verificação experimental de tal fenômeno.

3.1.2.3 Transições de fase quânticas

Gostaríamos agora de investigar quais são os efeitos deste mesmo tipo de desordem em sistemas quânticos. Transições de fase quânticas são aquelas que ocorrem a $T = 0$, quando o estado fundamental do sistema muda como função de um parâmetro externo, como campo magnético ou pressão [8, 95].

Um modelo vastamente utilizado para se estudar transições de fase quânticas é o modelo de Ising no campo

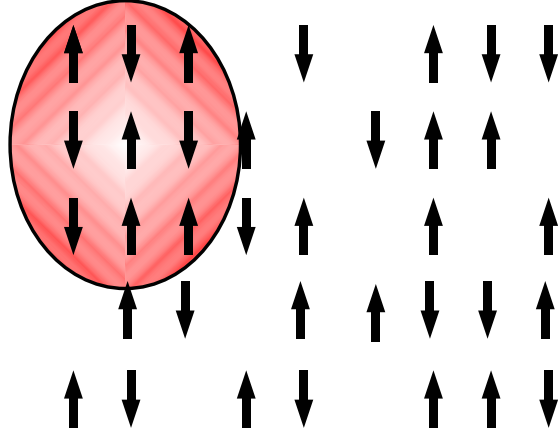


Figura 3.2: Esboço de um magneto clássico diluído. A região sombreada é livre de impurezas e funciona como um pedaço do bulk do sistema limpo.

transverso em uma rede hipercúbica d -dimensional com $N = L^d$ sítios. Seu Hamiltoniano é dado por

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \sum_i h_i^x \hat{S}_i^x, \quad (3.8)$$

e é constituído por dois termos que não comutam. O primeiro é dado pela interação de troca entre as componentes z dos operadores de spin $-\frac{1}{2} \hat{S}_i$ localizados em sítios vizinhos. O segundo termo descreve a interação da componente x dos spins com um campo magnético na direção transversa (direção x).

Discutiremos brevemente o caso limpo, $J_{ij} = J > 0$ e $h_i^x = h^x$. Na ausência do campo transversa ($h^x = 0$), o termo de troca faz com que todos os spins apontem em uma mesma direção, dando origem a um estado fundamental ferromagnético. Ao ligarmos o campo, induzimos os spins a tunelarem entre os estados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ ($\hat{S}_x = (\hat{S}_+ + \hat{S}_-)/2$), diminuindo assim a magnetização na direção z . Há um campo crítico $h_{c,0}^x$ acima do qual este tunelamento destrói o estado ferromagnético e o sistema torna-se paramagnético.

3.1.2.4 Singularidades de Griffiths no caso quântico

Investigaremos agora os efeitos de regiões raras no modelo de Ising em um campo transversa, Eq. (3.8). Por simplicidade, consideraremos desordem apenas no termo de troca J_{ij} e assumiremos um campo transversa uniforme h^x . Tomaremos uma distribuição binária $P(J) = (1-p)\delta(J-J_0) + p\delta(J-rJ_0)$, onde $0 < r < 1$, de modo que $J_{ij} > 0$, excluindo assim a possibilidade de acoplamentos antiferromagnéticos. Com a introdução de acoplamentos aleatórios, favorecemos a fase paramagnética, de modo que precisamos de um campo transversa menor para destruímos a fase ferromagnética $h_c^x < h_{c,0}^x$.

Estamos interessados na região de Griffiths dentro da fase desordenada onde $h_c^x < h^x < h_{c,0}^x$. A probabilidade de encontrarmos uma região de comprimento linear L_R na qual todos os $J_{ij} \simeq J_0$ (região de acoplamento fortes) é exponencialmente pequena no volume desta região e na probabilidade p . Para verificarmos isso, calculamos o termo dominante na probabilidade de acharmos tal região em um volume $V_R \sim L_R^d$

$$P(L_R) \sim (1-p)^{L_R^d} \sim \exp[-\tilde{p}L_R^d], \quad (3.9)$$

onde $\tilde{p} = -\ln[1-p]$.

Esta região ordenada ferromagneticamente dentro da fase desordenada possui um momento magnético total que é proporcional a L_R^d . Tal momento magnético total pode tunelar entre os dois estados que possuem sentidos inversos de magnetização, sendo que a taxa de tunelamento é dada por

$$\Delta \sim \exp[-aL_R^d], \quad (3.10)$$

onde a é uma constante relacionada ao mecanismo microscópico de tunelamento. Esta taxa de tunelamento dá a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado desta região ferromagnética, sendo que os outros estados excitados possuem uma energia muito maior que a desses dois e podem ser ignorados.

Uma vez que a distribuição $P(L_R^d)$ é conhecida, Eq. 3.9, e sabemos como a escala de energia Δ depende de L_R^d , Eq. 3.10, podemos encontrar a distribuição da diferença de energias $\tilde{P}(\Delta)$. Para isso, basta realizarmos a seguinte troca de variáveis

$$\tilde{P}(\Delta) = P(L_R^d(\Delta)) \left| \frac{dL_R^d(\Delta)}{d\Delta} \right| \sim \Delta^{\alpha-1}, \quad (3.11)$$

onde $\alpha = \tilde{p}/a$.

Uma distribuição do tipo lei de potência para a escala de energia do problema é uma das principais características de uma fase de Griffiths, e ocorre porque a probabilidade exponencialmente pequena de encontrarmos uma região rara é compensada pela dependência também exponencial do “gap” de energia no volume da região rara. Ressaltamos aqui uma diferença com relação ao caso clássico. No modelo de Ising clássico, a dependência do “gap” no volume não é dado por uma exponencial, mas sim por uma lei de potência, o que gera uma distribuição de energia para a região rara exponencialmente pequena.

Dada a distribuição das escalas de energia, podemos calcular as propriedades termodinâmicas do sistema. Para calcularmos a susceptibilidade magnética do sistema a uma temperatura T , assumiremos que todas as regiões com $\Delta > T$ (alto tunelamento) estão congeladas no estado fundamental não magnético. Todas as outras regiões raras são basicamente independentes e dão uma contribuição do tipo lei de Curie para a susceptibilidade. O número de spins livres a um temperatura T é dado por

$$n(T) = \int_0^T \tilde{P}(\Delta) d\Delta \sim T^\alpha. \quad (3.12)$$

Com o número de spins livres, podemos calcular χ como

$$\chi \sim \frac{n(T)}{T} \sim T^{\alpha-1}. \quad (3.13)$$

Para calcularmos o calor específico, precisamos calcular a energia interna do sistema

$$U = \int_0^T \Delta \tilde{P}(\Delta) d\Delta \sim T^{\alpha+1}, \quad (3.14)$$

e assim

$$\frac{C}{T} = \frac{1}{T} \frac{\partial U}{\partial T} \sim T^{\alpha-1}. \quad (3.15)$$

Vemos pelas Eqs. (3.13) e (3.15) que, quando o expoente α é menor do que 1, temos contribuições singulares para a susceptibilidade e para o calor específico. Embora o expoente α seja não universal, este tipo de comportamento para as quantidades termodinâmicas é compartilhado por todas as fases de Griffiths.

3.2 Transição metal-isolante de Mott

Uma distinção clara entre metais e isolantes é fornecida pela teoria de bandas [3]. A teoria de bandas descreve a dinâmica de um único elétron em um sólido, sendo que os efeitos de todos os outros elétrons são introduzidos através de um potencial efetivo, no mesmo espírito das teorias de campo médio discutidas anteriormente. Dentro desta teoria, estados metálicos e isolantes são diferenciados pela posição relativa entre o potencial químico μ e os “gaps” de energia na densidade de estados

$$D(\omega) = \sum_{m,\mathbf{k}} \delta(\omega - \varepsilon_m(\mathbf{k})), \quad (3.16)$$

onde o índice m corresponde a uma banda específica e $\varepsilon_m(\mathbf{k})$ dá a dispersão de energias nesta banda; veja, por exemplo, a Eq. (2.63).

Quando μ coincide com um “gap”, ou seja, $D(\mu) = 0$, o sistema é um isolante, porque não existem excitações de baixa energia do tipo partícula ou buraco. Se considerarmos que há um número N de elétrons no sistema, concluímos que as bandas abaixo de μ estão preenchidas com um número par de $2N$ elétrons, já levando em conta

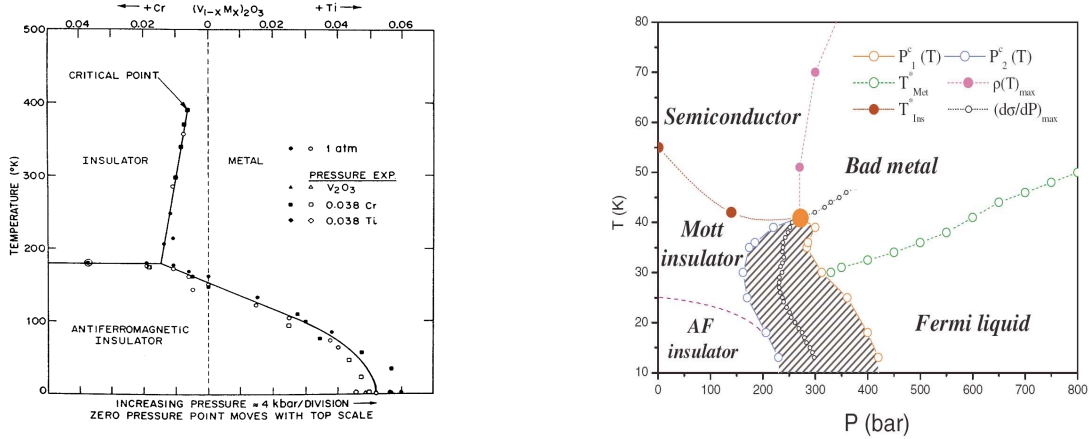


Figura 3.3: (a) Diagrama de fases experimental para a V_2O_3 como função da dopagem com Cr ou Ti , da pressão e da temperatura [96]. (b) Diagrama de fases experimental do sal orgânico $\kappa - (BEDT - TTF)_2 Cu [N(CN)_2] Cl$ [98]. Em ambos materiais o aumento da pressão (hidrostática ou química) aumenta a largura de banda e favorece a estabilização do estado metálico.

a degenerescência de spin. Já quando $D(\mu) \neq 0$, temos um metal e, para $T = 0$, μ é igual à energia de Fermi ε_F . A superfície definida por $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_F$ no espaço k é chamada de superfície de Fermi e as propriedades de baixas temperaturas dos elétrons² são determinadas por elétrons próximos da superfície de Fermi.

Esperamos que a teoria de bandas seja válida quando a energia cinética dos elétrons (dada basicamente por ε_F) for a escala de energia dominante do problema. De fato, ela descreve bem as propriedades de bons metais, como os metais alcalinos. Contudo, ela falha em algumas materiais nos quais a energia de Fermi é tipicamente pequena, como em

- Materiais que possuem larguras de bandas estreitas. Os exemplos mais estudados de tais materiais são os óxidos de metais de transição em semipreenchimento, especialmente o óxido de vanádio dopado com cromo $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$ [96, 97];
- Semicondutores dopados, como o $Si : P$ [12], ou gases de elétrons bidimensionais em MOSFET's [47, 49].

Nesses exemplos acima, a energia potencial, proveniente ou da repulsão elétron-elétron ou da desordem, torna-se comparável à energia de Fermi e o estado fundamental do sistema sofre uma mudança dramática, com os elétrons se tornando localizados. Ressaltamos que, para estes exemplos, a teoria de bandas não prevê a abertura de nenhum “gap” na energia de Fermi. Os mecanismos por trás destas transições serão tópicos da discussões seguintes.

3.2.1 Fenomenologia do caso limpo e o cenário de Brinkman-Rice

Com discutimos na seção (2.2), a transição de Mott é uma transição metal-isolante causada pelas correlações eletrônicas [30]. Ela é realizada experimentalmente em óxidos de metais de transição tridimensionais e sais orgânicos, sendo controlada através da variação de pressão, temperatura e composição química (dopagem) dos elementos, Fig. (3.3).

Para estudarmos esta transição, utilizaremos o modelo de Hubbard limpo, como dado pela Eq. (2.62), em semipreenchimento ($n = 1$). Discutiremos alguns cenários possíveis para esta transição que emergem dentro deste modelo utilizando uma densidades de estados circular

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi D} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{D}\right)^2}, \quad (3.17)$$

considerando que a rede possui semilargura de banda D

²Em sistemas fermiônicos, quando nos referimos a baixas energias e temperaturas queremos dizer, naturalmente, energias e temperaturas muito menores que ε_F e T_F , respectivamente, onde T_F é a temperatura de Fermi. Como usamos $k_B = 1$, temos que $T_F = \varepsilon_F$.

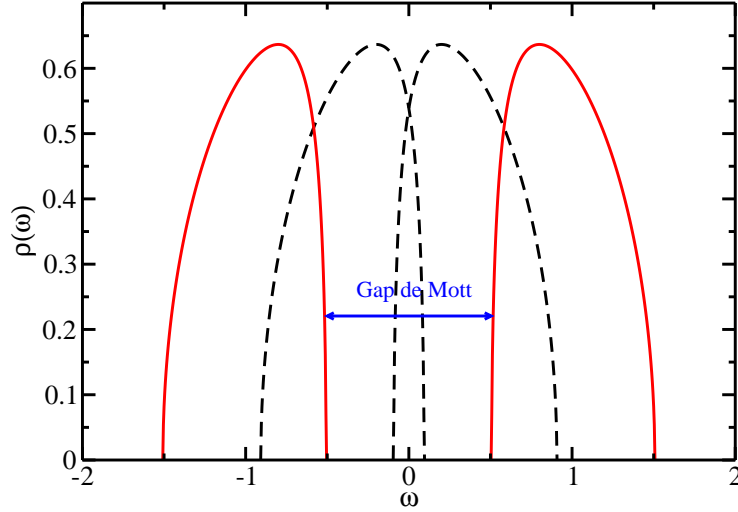


Figura 3.4: Visão esquemática da densidade de estados como função da razão U/D no enfoque de Hubbard [32, 68, 69]. O isolante de Mott é associado aqui à abertura de um “gap” no nível de Fermi (curva contínua). Este “gap” de Mott é dado por $\Delta_M \simeq U - 2D$, onde U é repulsão Coulombiana local e D é a semilargura de banda. As duas bandas que aparecem separadas por este “gap” são conhecidas como bandas de Hubbard superior (centrada em $U/2$) e inferior (centrada em $-U/2$). Naturalmente, este “gap” diminui na medida em que a razão U/D diminui e finalmente desaparece (curva tracejada), situação esta em que voltamos a ter um comportamento metálico.

Em trabalhos pioneiros, Refs. [32, 68, 69], Hubbard deu uma descrição para a transição de Mott, que está esquematizada na Fig. (3.4). Suponha que estamos na situação de semipreenchimento e no limite atômico $U/D \gg 1$. Adicionamos agora mais um elétron ao sistema, fazendo com que a energia do sítio para o qual ele vai aumentar em U , pois passa a haver ocupação dupla nele. Assim, o sistema tem agora dois níveis de energia separadas por um “gap” de U . Ao aumentarmos termo de “hopping”, aumentamos D e, conseqüentemente, damos uma largura a esses dois níveis de energia (que se tornam as bandas de Hubbard da Fig. (3.4)) fazendo com que este “gap” seja dado por $\Delta_M \simeq U - 2D$. Este “gap” de Mott nada mais é do que a energia que o elétron tem que despende para superar a barreira Coulombiana e mover-se pela rede. Se diminuirmos o valor de U , chega o momento em que as duas bandas se tocam e o sistema passa a ser metálico. Assim, neste enfoque de Hubbard, a transição de Mott está associada ao fechamento ou abertura do “gap” de Mott. Como ele assume que estamos na fase isolante com U grande, esperamos que ele esteja qualitativamente correto nesta região, mas que não descreva muito bem a fase metálica.

Podemos adotar uma visão complementar e partir da fase metálica com $U = 0$, e gradualmente aumentarmos a interação. Isto é o que foi feito por Brinkman e Rice, Ref. [35]. Discutiremos melhor este cenário a seguir, limitando-nos por ora a citar sua principal característica, que é a renormalização da largura de banda, fazendo com que a escala de energia deste problema passe a ser $\Delta = ZD$, onde Z é o peso de quasipartícula, dado pela Eq. (2.100), sendo que Z dá massa efetiva dos elétrons, Eq. (2.96), $m^*/m = Z^{-1}$. Dentro deste esquema, a transição de Mott é alcançada através da localização das quasipartículas, $m^* \rightarrow \infty$, caracterizando seu desaparecimento no isolante. Este procedimento é consistente para a descrição do metal correlacionado a baixas energias, mas não explica as excitações de alta energia que constituem as bandas de Hubbard, as quais já deveriam estar presentes mesmo no estado metálico. Além disso, ele dá uma versão muito simplificada do isolante, que é representado como uma coleção de momentos locais independentes (3.5)

Essas duas abordagens são reconciliadas dentro da teoria dinâmica de campo médio, o que fica aparente ao estudarmos a evolução da densidade de estados com as interações, Fig. 3.6. Para pequenos valores de U , a densidade de estados local é similar àquela não interagente. Para maiores valores de U , um pico estreito de quasipartícula forma-se no nível de Fermi, com largura $\Delta = ZD$ e peso Z . Este pico corresponde a excitações coerentes de quasipartículas ao redor da energia de Fermi. Por excitações coerentes, queremos dizer excitações que possuem uma meia vida longa. Concomitantemente, dois picos adicionais surgem nas frequências $\pm U/2$ e estão associados às bandas de Hubbard, correspondendo a excitações incoerentes de altas energias que decaem rapidamente. À medida que U cresce, mais e mais peso espectral é transferido do pico de quasipartícula para as bandas de Hubbard, até o momento em que o pico de quasipartícula desaparece e o sistema torna-se um isolante.

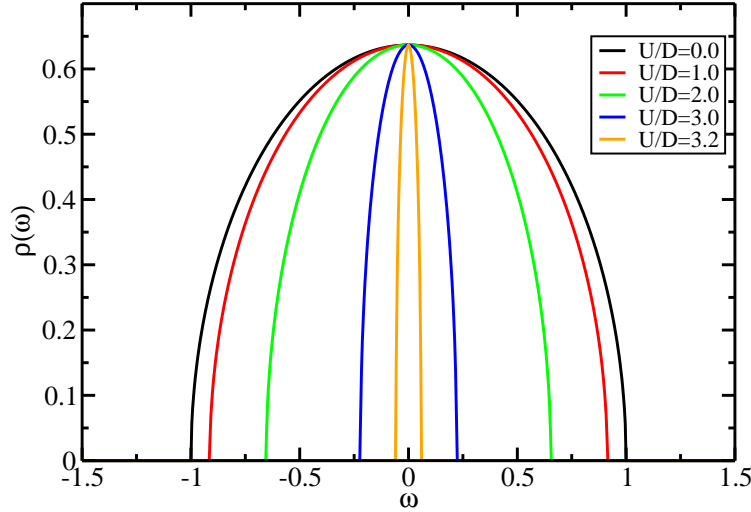


Figura 3.5: Densidade de estados como função da razão U/D no enfoque de Brinkman-Rice [35]. À medida que aumentamos as correlações, as quasipartículas vão ficando cada vez mais pesadas, correspondendo a uma diminuição da largura de banda efetiva. Para $U_c \simeq 3.4D$, temos a destruição das quasipartículas e os elétrons transformam-se em momentos magnéticos localizados. Aqui temos também uma propriedade geral de uma teoria de líquido de Fermi local: o valor da densidade de estados no nível de Fermi não é renormalizado pelas interações.

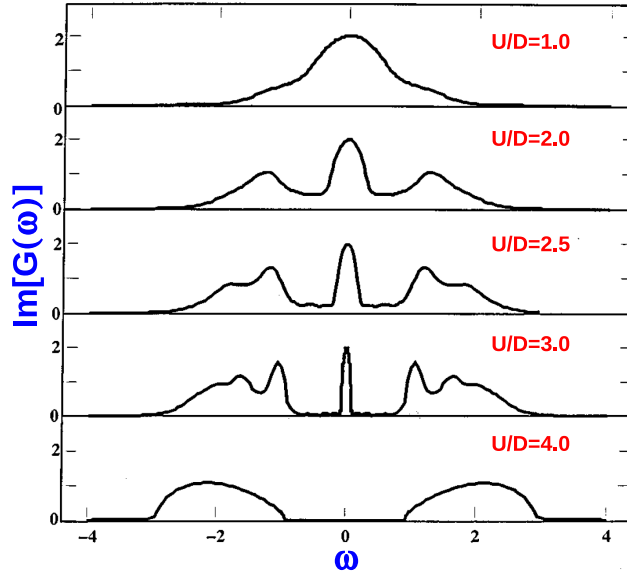


Figura 3.6: Parte imaginária da função de Green local dos elétrons $\rho(\omega) = \text{Im}[G - i0^+]/\pi D$ para alguns valores de U , obtidos dentro da teoria dinâmica de campo médio [99, 100]. Para correlações fracas ($U/D = 1$), ainda temos a maior parte do peso espectral ao redor da energia de Fermi ($\varepsilon_F = 0$), sendo que o sistema é bem descrito pelo cenário de Brinkman-Rice. Para valores moderados e fortes de correlação ($U/D = 2, 2.5, 3$), temos a estrutura de três picos característica da TDCM. O pico central corresponde a excitações coerentes de quasipartículas ao redor da energia de Fermi, ao passo que os picos laterais são as bandas de Hubbard que correspondem a excitações incoerentes. Acima do valor crítico de interação ($U_c \simeq 3.3D$), o pico de quasipartícula desaparece e o sistema torna-se um isolante com duas bandas de Hubbard bem definidas centradas em $\pm U/2$ e separadas pelo “gap” de Mott. Novamente, o valor da densidade de estados no nível de Fermi não é renormalizado pelas interações, indo abruptamente a zero no isolante.

Mesmo fornecendo uma descrição incompleta da transição de Mott, o cenário de Brinkman e Rice [35] constitui um importante passo para entendermos a fenomenologia associada à transição de Mott, especialmente no setor de baixas energias. A partir deste ponto, abordaremos apenas este cenário, e discutiremos sua fenomenologia, sempre tendo em mente seu limite de validade.

Em sua formulação original, Brinkman e Rice utilizaram a aproximação de Gutzwiller [31, 101] para resolver o Hamiltoniano de Hubbard, Eq. (2.62). Em vez de adotarmos esse tratamento, trabalharemos em uma elaboração posterior e equivalente, dada pela aproximação de campo médio de bósons escravos [65], como descrita na seção (2.2.4).

Começamos notando que o número de elétrons com um determinado spin σ em um dado sítio i , $n_{i\sigma} = f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$, pode ser obtido pelas equações de vínculo já se levando em conta a aproximação de campo médio e, pela Eq. (2.91), temos que

$$n_\uparrow = p_\uparrow^2 + d^2, \quad (3.18)$$

$$n_\downarrow = p_\downarrow^2 + d^2. \quad (3.19)$$

Utilizando agora a Eq. (2.90), podemos escrever

$$n = n_\uparrow + n_\downarrow = 1 + d^2 - e^2. \quad (3.20)$$

Definindo-se a magnetização m em cada sítio como

$$m = p_\uparrow^2 - p_\downarrow^2 = n_\uparrow - n_\downarrow, \quad (3.21)$$

temos que a Eq. (2.95) é dada por

$$Z_\sigma = 8d^2(1 - 2d^2) \left[1 + m^2 \left(1 - \frac{1}{4(1 - 2d^2)^2} \right) \right] + \mathcal{O}(m^4), \quad (3.22)$$

assumindo que estamos na presença de um campo magnético externo h muito fraco, tal que só precisamos calcular o termo dominante na magnetização.

Podemos agora escrever a densidade de energia livre $f = F/N$ dentro da aproximação de bósons escravos. A maneira mais conveniente de fazermos isso é escrevermos a ação correspondente à Eq. (2.92) e considerarmos a aproximação do ponto de sela [65] (veja também seção (2.2.6)), o que nos leva a

$$f = Ud^2 - \lambda^{(2)}(1 + d^2 - e^2) - T \sum_\sigma \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) \ln \left[1 + e^{-\beta(Z_\sigma \varepsilon - \mu + \sigma h + \lambda^{(2)})} \right], \quad (3.23)$$

onde $\beta = 1/T$, $\rho(\varepsilon)$ é a densidade de estados da rede não interagente, μ é o potencial químico e $\lambda^{(2)}$ é o multiplicador de Lagrange, que é adicionado à ação para impormos o vínculo (2.91). As equações de autoconsistência são encontradas ao minimizarmos a energia livre com relação aos parâmetros variacionais d e $\lambda^{(2)}$.

A energia interna pode ser calculada como $\bar{\varepsilon} = \partial(\beta f) / \partial\beta$, donde

$$\bar{\varepsilon} = Ud^2 - \lambda^{(2)}(1 + d^2 - e^2) - \sum_\sigma \frac{1}{Z_\sigma} \int dx \rho(x/Z_\sigma) \frac{x}{1 + \exp[\beta(x - \mu + \sigma h + \lambda^{(2)})]}, \quad (3.24)$$

com a troca de variáveis $x = Z_\sigma \varepsilon$ na integral.

Podemos agora calcular a susceptibilidade magnética do metal através das Eqs. (3.22) e (3.24)

$$\begin{aligned} \chi^{-1} &= \left. \frac{1}{m} \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial m} \right|_{h \rightarrow 0}, \\ &= \frac{Z}{2\rho(\varepsilon_F^0)} \left[1 - \frac{\rho(\varepsilon_F) U (1 + U/2U_c)}{2 (1 + U/U_c)^2} \right], \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde U_c , a ser determinado posteriormente, é o valor de interação crítico para o qual a transição de Mott ocorre, e ε_F é a energia de Fermi do sistema não interagente.

Também é possível encontrarmos o calor específico. Para isso, utilizamos a expansão de Sommerfeld [3] diretamente na solução paramagnética ($m = 0$) da Eq. (3.24), o que nos dá

$$\bar{\varepsilon} = \bar{\varepsilon}_0 + \frac{1}{Z} \frac{\pi}{3} \rho(\varepsilon_F) T^2,$$

e, portanto,

$$c_V = \frac{1}{Z} \frac{2\pi}{3} \rho(\varepsilon_F) T. \quad (3.26)$$

Particularizamos nossa discussão para a solução paramagnética ($m = 0$) a $T = 0$. Assumimos também que estamos em semipreenchimento ($n = 1$), de tal forma que $e = d$. Minimizando a Eq. (3.23) com respeito a $\lambda^{(2)}$ vem que

$$2 \int_{-\infty}^{(\mu - \lambda^{(2)})/Z} d\varepsilon \rho(\varepsilon) = 1. \quad (3.27)$$

Minimizando agora com respeito a d obtemos

$$\frac{\partial Z}{\partial d} \int_{-\infty}^{(\mu - \lambda^{(2)})/Z} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) = -Ud. \quad (3.28)$$

Como estamos em semipreenchimento e $\rho(\varepsilon)$ é a densidade de estados do limite não interagente, temos que

$$\frac{(\mu - \lambda^{(2)})}{Z} = \varepsilon_F. \quad (3.29)$$

Além disso, podemos definir

$$U_c = 8 |\varepsilon_{kin}^0|, \quad (3.30)$$

onde ε_{kin}^0 é a energia cinética média no limite não interagente

$$\varepsilon_{kin}^0 = 2 \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon), \quad (3.31)$$

de tal forma que

$$d = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{U}{U_c}}. \quad (3.32)$$

Assim, a transição de Mott é caracterizada pelo desaparecimento da dupla ocupação para um valor crítico de interação U_c , marcando a transformação dos elétrons em momentos magnéticos localizados. Notamos que podemos definir d como nosso parâmetro de ordem e que ele possui um expoente crítico $\nu = 1/2$, exatamente como em uma teoria de Landau usual (veja Eq. (3.2)). Utilizando agora as Eqs. (3.22) e (3.32), vemos que

$$Z = \left(1 + \frac{U}{U_c}\right) \left(1 - \frac{U}{U_c}\right). \quad (3.33)$$

A Eq. (3.33) diz que a massa efetiva do sistema $m^*/m \sim (1 - U/U_c)$ diverge na transição de Mott, indicando a localização (destruição) das quasipartículas. De fato, é mais conveniente definirmos Z como o parâmetro de ordem da transição³, pois ele está diretamente associado a várias quantidades físicas, como, por exemplo, a susceptibilidade magnética de spin e o coeficiente de Sommerfeld para o calor específico, Eqs. (3.25) e (3.26).

O cenário de Brinkman-Rice descreve a transição de Mott como um ponto crítico quântico no qual vamos de um metal para um isolante apenas variando a interação U . A transição de Mott discutida aqui está associada à abertura de um “gap” na densidade de estados do sistema na ausência de qualquer tipo de ordenamento magnético, ou seja, na

³Isso está relacionado ao fato de que a escolha do parâmetro de ordem não é única. A única condição para sua escolha é que esta quantidade seja zero na fase desordenada (isolante de Mott) e diferente de zero na fase ordenada (metal correlacionado).

fase paramagnética. Portanto, esta transição de fase não está associada a nenhuma quebra espontânea de simetria do sistema. Isso parece contraditório, uma vez que uma transição de segunda ordem vem sempre acompanhada de um quebra espontânea de simetria. Tratamentos mais sofisticados, que levam em conta correlações entre os sítios da rede, preveem que a transição é de fato de primeira ordem [81, 82, 83]. Neste caso, embora não haja mais uma divergência da massa efetiva na transição, ela ainda assim aumenta consideravelmente na medida em que nos aproximamos da transição de Mott. Este comportamento é observado experimentalmente em vários sistemas, como sais orgânicos quase bidimensionais [98, 102], He³ líquido [103, 104], gases de elétrons bidimensionais [47, 49, 105] e óxidos de metais de transição [106].

O fato de a massa efetiva divergir na transição implica que o coeficiente de Sommerfeld γ ($\gamma = c_V/T$) também o faz, como explicitamente mostrado na Eq. (3.26). Em sistemas fortemente correlacionados, este tipo de comportamento é esperado apenas a temperaturas abaixo da temperatura de coerência $T^* \sim ZT_F$, onde T_F é temperatura de Fermi do sistema não interagente. Acima desta temperatura T^* , as quasipartículas são destruídas pelas flutuações térmicas e a descrição do tipo líquido de Fermi obtida pelo cenário de Brinkman-Rice deixa de ser válida, seção (4.1).

Usando a definição termodinâmica de entropia, podemos escrever que

$$s(T^*) = \int_0^{T^*} c_V \frac{dT}{T} = \gamma T^* \sim \mathcal{O}(1). \quad (3.34)$$

Como $T^* \rightarrow 0$ na medida em que nos aproximamos da transição de Mott, vemos que a divergência da massa efetiva implica que o nosso isolante possui uma entropia residual finita. Isso é resultado do fato de desprezarmos as correlações magnéticas entre os sítios, o que faz com que o isolante seja visto como uma coleção de momentos magnéticos de spin 1/2 independentes. A entropia residual deste estado altamente degenerado é dada simplesmente por $S(0^+) = R \ln [2]$.

Deste modo, temos que um aumento da massa efetiva, quando observado em um experimento, indica que nos aproximamos de uma fase que possui alta entropia mesmo para temperaturas muito baixas. Esta situação ocorre naturalmente na vizinhança de uma transição de Mott, onde uma grande quantidade de entropia é liberada devido à formação de momentos magnéticos localizados no lado isolante da transição.

Geralmente, estes momentos localizados possuem uma interação antiferromagnética do tipo “superexchange” $J_{eff} \sim t^2/U$, o que leva a um ordenamento magnético a temperaturas da ordem $T_{J_{eff}} \sim J_{eff}$. Este ordenamento magnético levanta a degenerescência do sistema e restaura a Terceira Lei da Termodinâmica⁴. Naturalmente, ele só ocorre abaixo da escala de temperatura dada por $T_{J_{eff}}$, que eventualmente pode ser extremamente baixa devido à frustração tanto geométrica quanto induzida pela competição de ordens magnéticas.

3.2.2 Efeitos da desordem na transição metal-isolante de Mott

Em muitos materiais, a magnitude da desordem e da interação são comparáveis e uma teoria satisfatória da transição metal-isolante em tais materiais só pode ser alcançada quando ambos efeitos são levados em conta [9]. As teorias convencionais para atacar o problema [9, 107] geralmente consideram uma média sobre a desordem. Dentro deste tipo de descrição é muito difícil incorporar-se a física de eventos raros e, como discutimos na seção (3.1), os efeitos de tais eventos raros em transições de fases quânticas podem ser dramáticos.

Em particular, eventos raros induzidos por desordem em sistemas eletrônicos dão origem a momentos magnéticos localizados dentro de um sistema metálico que persistem até temperaturas muito baixas, levando a um comportamento do tipo não líquido de Fermi. Tal comportamento é visto tanto em semicondutores fortemente dopados [12, 13, 108] quanto em sistemas de férmions pesados [88, 89, 90].

É interessante notar que este comportamento não líquido de Fermi é também visto em sistemas que estão longe de qualquer tipo de ordenamento de spin ou carga. Tal fato levou à introdução do conceito de uma fase de Griffiths eletrônica (FGE) [2, 17, 37]. Como veremos, esta fase de Griffiths eletrônica possui características muito semelhantes à fase de Griffiths magnética discutida na seção (3.1), e ocorre na vizinhança de transições metal-isolante, tanto induzidas pela interação (Mott) quanto pela desordem (Anderson).

Para estudarmos os efeitos da desordem na transição metal-isolante, utilizaremos uma generalização do cenário de Brinkman-Rice visto na seção (3.2.1) para o caso desordenado. A implementação desta técnica é discutida na seção (2.2.5). O ponto de partida é o modelo de Hubbard desordenado (2.70), com a desordem sendo introduzida

⁴Vale a pena ressaltar que o comportamento do tipo isolante não é causado pelo magnetismo, sendo que o isolante persiste até temperaturas da ordem $T_M \sim \Delta_M \gg T_{J_{eff}}$. Veja, por exemplo, a Fig. (3.3).

através das energias aleatórias ε_i de cada sítio, que serão especificadas por uma distribuição de probabilidade $P(\varepsilon)$ uniforme

$$P(\varepsilon) = \begin{cases} 1/W, & |\varepsilon| \leq W/2 \\ 0, & |\varepsilon| > W/2 \end{cases} \quad (3.35)$$

cuja variância é dada por $W^2/12$, onde W dá a amplitude da desordem.

Resolvemos este modelo de Hubbard desordenado a $T = 0$, limitando-nos ao regime de desordem fraca e moderada ($W \lesssim U_c(W)$). Consideramos redes quadradas com $L \times L$ sítios, sujeitas a condições periódicas de contorno e semipreenchimento, de tal forma que $\mu = U/2$. Aproximamo-nos da transição de Mott sempre mantendo a amplitude de desordem constante e aumentando o valor da repulsão local U até seu valor crítico $U_c(W)$, que agora passa a ser dependente da desordem. Como escala de energia, utilizamos a energia de Fermi (ou semilargura de banda) do caso limpo $\varepsilon_F = D = 4t$, onde t é a amplitude de “hopping”. Para cada par de valores (U, W) realizamos cerca de quarenta realizações de desordem. Também variamos o tamanho da rede até $L = 50$ e verificamos que nossos resultados não padecem de efeitos de tamanho finito, como mostramos nas Figs. (3.10) e (3.19).

De acordo com a teoria de escala da localização [50] e seção (5.2.2), qualquer quantidade de desordem leva sistemas em dimensões menores ou igual a dois a uma fase isolante, desde que L seja grande o suficiente para superar o comprimento de localização. Contudo, este resultado foi obtido para elétrons não interagentes. Nos últimos anos, vários trabalhos numéricos encontraram fortes evidências de que, de fato, correlações aumentam a condutividade de sistemas bidimensionais desordenados [56, 57, 109, 110, 111, 112, 113], embora a existência ou não de um estado metálico no limite termodinâmico ainda esteja sob debate. Além disso, a estabilidade de um metal em $2d$ com respeito a correções de localização fraca [114] foi investigada de maneira cuidadosa pelos autores das Refs. [107, 115]. Esses autores demonstraram que qualquer metal permanece estável em $2d$ com respeito à desordem devido ao aparecimento de novas correções antilocalizantes introduzidas pela interação Coulombiana entre os elétrons. Notamos, contudo, que tanto as correções de localização fraca quanto essas correções antilocalizantes se manifestam apenas através de correções logarítmicas com o tamanho L do sistema. Por serem tão sutis, estas correções não são visíveis para os baixos valores de desordem renormalizada que aparecem nesta parte do nosso trabalho, em particular nas vizinhanças da transição de Mott. Baseados nestas considerações, assumimos que a existência ou não de uma verdadeira fase metálica termodinâmica em $2d$ não possui relevância para as questões que abordamos nesta parte do trabalho.

O peso de quasipartícula Z descreve o comportamento de baixas energias do lado metálico e vai a zero linearmente na transição (Eq. (3.33)). Deste modo, é natural que definamos Z como o parâmetro de ordem da transição no caso limpo. Para o caso desordenado, temos uma distribuição $P(Z)$ de valores para Z , pois cada sítio possui agora um Z_i diferente. Seguindo estudos anteriores da transição de Mott desordenada [44, 79, 116], escolheremos o valor típico de Z_i , definido através de sua média⁵ geométrica $Z_{typ} = \exp[\langle \ln[Z] \rangle]$, como o parâmetro de ordem da transição desordenada. Analogamente ao caso limpo, esta quantidade vai a zero linearmente próximo da transição de Mott, indicando que a maioria dos elétrons da rede possui $Z_i \approx 0$ e transformaram-se em momentos magnéticos localizados. Naturalmente, um conhecimento completo sobre o sistema só é alcançado ao olharmos para a distribuição $P(Z)$, o que faremos exaustivamente. O uso de Z_{typ} é uma maneira conveniente de parametrizarmos toda a informação contida em $P(Z)$ em apenas uma quantidade fácil de ser calculada.

A Fig. (3.7) mostra Z_{typ} e também o valor médio de $Z_{av} = \langle Z \rangle$ como função da interação para dois valores de desordem diferentes. Naturalmente, na medida em que W cresce, os valores típicos e médios se diferenciam, indicando que a largura de $P(Z)$ está aumentando. O ponto em que $Z_{typ} = 0$ define o valor de $U_c(W)$. Notamos que Z_{av} é pequeno, mas finito, na transição de Mott, indicando que parte dos sítios permanece vazia ($e_i^2 = 1$) ou duplamente ocupada ($d_i^2 = 1$), não dando origem, assim, a momentos magnéticos localizados. Este tipo de comportamento de dois fluidos [79] é mais relevante para o regime de desordem forte ($W > U_c(W)$), que não abordaremos aqui.

Na Fig. (3.8), temos o diagrama de fases para o modelo de Hubbard desordenado em $d = 2$. A desordem tende a tirar o sistema localmente do semipreenchimento, pois sítios com energias baixas tenderão a ficar duplamente ocupados ($e_i^2 > d_o$, onde $d_o = e_o$ é o valor correspondente ao caso limpo $W = 0$) e sítios com energias altas tenderão a ficar vazios ($d_i^2 > d_o$). Isso faz com que $U_c(W)$ cresça com a desordem, uma vez que precisamos de um valor cada vez maior da interação local U para eliminarmos tais sítios com ocupação dupla ou vazios e entrarmos no isolante de Mott.

⁵Todas as médias de quantidades locais serão calculadas considerando-se a média sobre sítios e também a média sobre realizações de desordem.

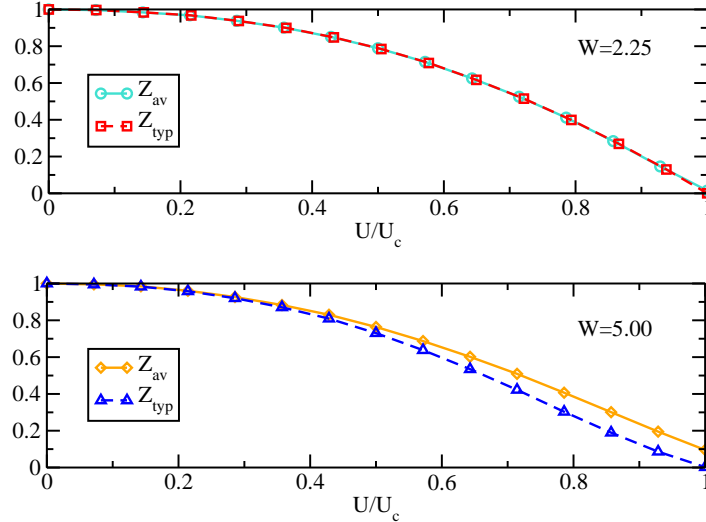


Figura 3.7: Valor típico $Z_{typ} = \exp[\langle \ln[Z] \rangle]$ e valor médio $Z_{av} = \langle Z \rangle$ do peso de quasipartícula como função da interação para dois valores diferentes de desordem. A transição de Mott é identificada pelo ponto em que Z_{typ} vai a zero. Notamos que Z_{av} permanece finito na transição, indicando que parte dos sítos permanece vazia ou duplamente ocupada e, portanto, não se transmuta em momentos magnéticos localizados. Aqui utilizamos $L = 20$.

Como $Z_{typ} \sim (U_c(W) - U)$ próximo da transição de Mott, a determinação de $U_c(W)$ ocorre com um erro relativo de 0.5% – 1.0% para todos os valores de W , o que faz com que barras de erros sejam menores que os círculos mostrados na Fig. (3.8).

3.2.2.1 Blindagem da desordem pela interação

O outro parâmetro relevante para a nossa análise é o potencial renormalizado de desordem $v_i = \tilde{\varepsilon}_i/Z_i$. Ao estudarmos como sua distribuição é alterada por U , podemos entender melhor a competição entre desordem e interações.

Ao aplicarmos a TDCM (e não a TEDCM) ao problema da transição metal-isolante de Mott desordenada [44], encontramos um resultado muito interessante, que é a blindagem perfeita da desordem pela interação nas proximidades da transição de Mott. A blindagem perfeita da desordem pela interação nos dá que a largura da distribuição de energia renormalizadas $P(v)$, medida pelo seu desvio padrão $\sigma(v)$, vai a zero em $U_c(W)$, para todo W , desde que tenhamos simetria partícula-buraco.

Dentro da TDCM, que é exata em $d = \infty$, consideramos que todos os sítos veem uma *mesma* função de hibridização média $\Delta_{av}(\omega) = \langle \Delta_i(\omega) \rangle$. Se utilizarmos a aproximação de bósons escravos para resolvermos os problemas de uma impureza, vemos que todos os bósons em um sítio passam a depender da energia local ε_i daquele sítio. Temos então que, por exemplo, $Z_i = Z_i(\varepsilon_i)$, mas que o valor de Z_i em um determinado sítio não depende do valor do peso de quasipartícula nos sítos vizinhos. Esta aproximação, que joga fora todo tipo de correlação espacial introduzida pela desordem, e que também não inclui efeitos de localização de Anderson, é análoga à aproximação do potencial coerente [24, 117], vastamente utilizada em problemas desordenados.

Já na solução TEDCM, permitimos que o banho flutue sítio a sítio, de forma que cada sítio possua uma função de hibridização $\Delta_i(\omega)$ diferente. Como ilustrado na Fig. (3.9), temos que, embora o banho médio possua simetria partícula-buraco, os banhos locais são assimétricos. Isso faz com que não esperemos, em princípio, uma blindagem da desordem análoga àquela encontrada em TDCM nas vizinhanças da transição de Mott.

Surpreendentemente, nós também encontramos uma forte blindagem da desordem pela interação, como ilustrado pelas Figs. (3.10) e (3.11), mesmo para valores moderados de desordem ($W \lesssim U_c$). Isso reforça que, além das propriedades da solução do problema de uma impureza, a solução da TEDCM depende muito da condição de autoconsistência, pois embora o sistema desordenado não possua simetria partícula-buraco, o procedimento de autoconsistência a reintroduz.

Uma manifestação física interessante dessa blindagem pode ser vista na densidade de estados local do sistema, que é assim definida

$$\rho_i(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{ii}(\omega - i\delta)]|_{\delta \rightarrow 0}, \quad (3.36)$$

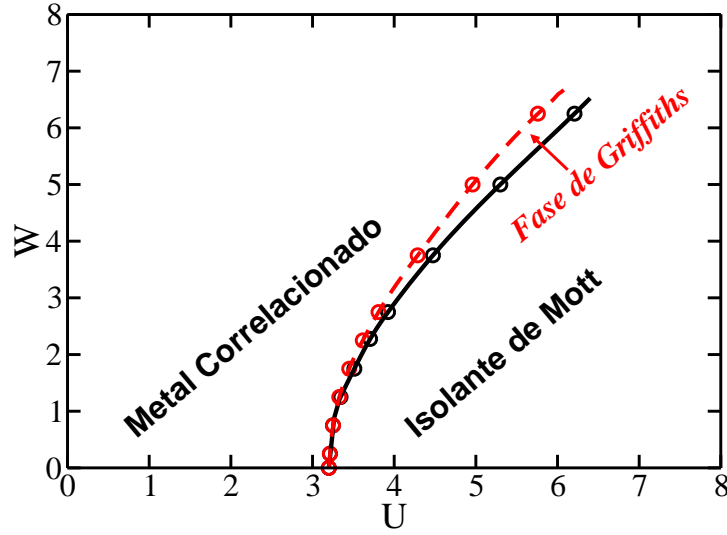


Figura 3.8: Diagrama de fases a $T = 0$ para o modelo de Hubbard desordenado em $d = 2$ como função da interação local U , para desordens fracas e moderadas $W \lesssim U$. Uma fase de Griffiths eletrônica emerge, separando o líquido de Fermi desordenado do isolante de Mott. Aqui utilizamos $L = 20$. Mostrado pela primeira vez na Ref. [36].

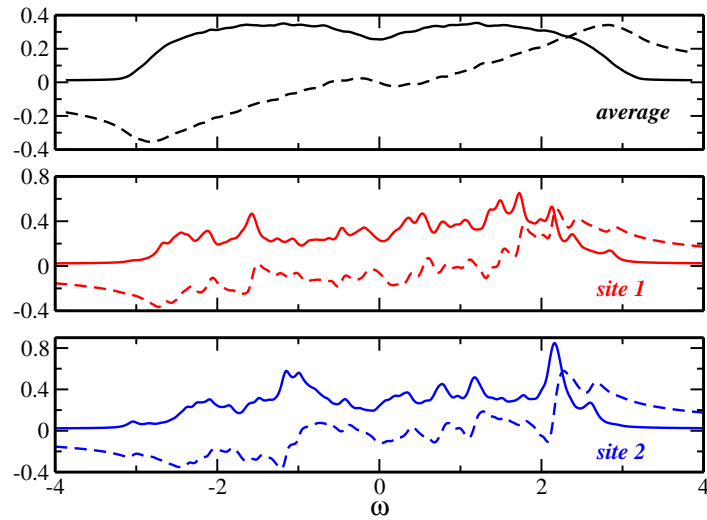


Figura 3.9: Partes real (curvas tracejadas) e imaginária (curvas contínuas) da função de hibridização $\Delta_i(\omega)$. Embora o valor médio $\Delta_{av}(\omega) = \langle \Delta_i(\omega) \rangle$ possua simetria partícula-buraco, vemos que para sítios arbitrários $\Delta_i(\omega)$ possui localmente uma assimetria partícula-buraco. Os resultados são mostrados para $L = 20$ e $W = U = 2.25$.

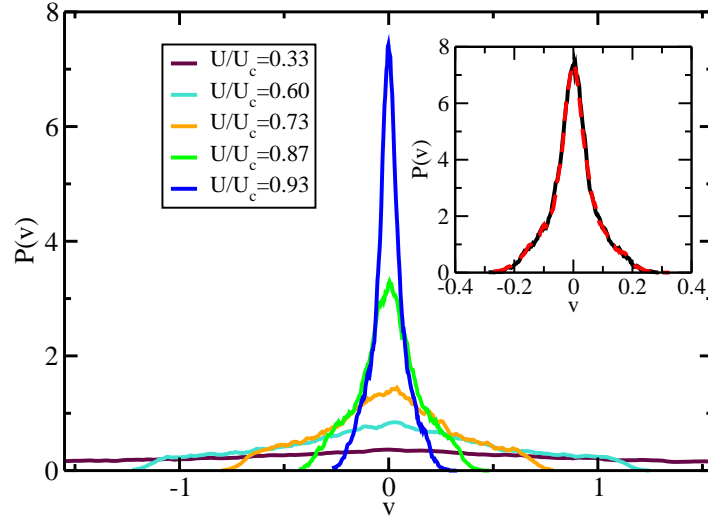


Figura 3.10: Distribuição de probabilidade $P(v)$ para o potencial renormalizado de desordem v_i . Na medida em que nos aproximamos da transição de Mott, ocorre a blindagem da desordem pela interação, diminuindo a largura de $P(v)$. Os resultados são mostrados para $L = 50$ e $W = 2.25$. A inserção da figura ilustra como nossos resultados são independentes do tamanho do sistema para as redes consideradas. Os resultados são mostrados para $L = 20$ (curva contínua) e $L = 50$ (curva tracejada), considerando-se $U/U_c = 0.93$ e $W = 2.25$.

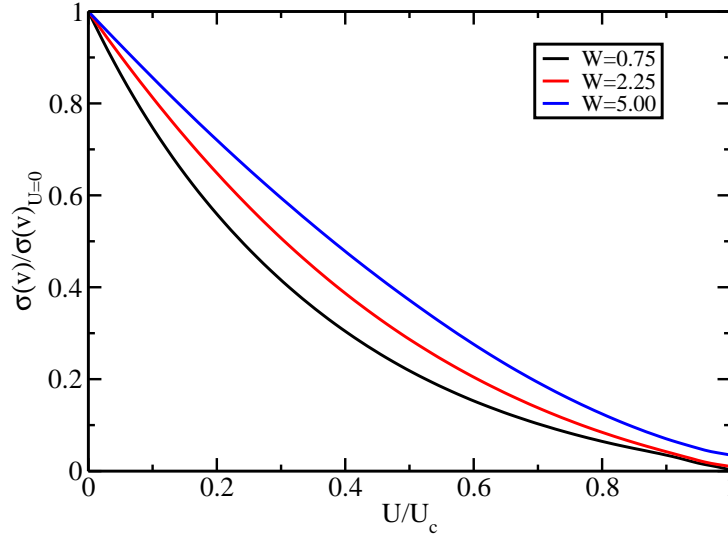


Figura 3.11: Amplitude do potencial de desordem renormalizado, medida pelo desvio padrão $\sigma(v)$ da distribuição $P(v)$ e normalizada pelo seu valor não interagente ($\sigma(v)_{U=0} = W/2\sqrt{3}$). Embora não tenhamos uma blindagem perfeita da desordem pela interação próximo da transição de Mott, como no caso da TDCM, a blindagem permanece forte mesmo para valores moderados de desordem. Os resultados são mostrados para $L = 20$.

onde

$$G_{ii}(i\omega_n) = \left[(i\omega_n \mathbf{Z}^{-1} - \mathbf{v} - \mathbf{H}_0)^{-1} \right]_{ii} \quad (3.37)$$

é a função de Green local da rede e os operadores \mathbf{Z} e \mathbf{v} são matrizes diagonais na base dos sites $[\mathbf{Z}]_{ij} = Z_i \delta_{ij}$; $[\mathbf{v}]_{ij} = v_i \delta_{ij}$, \mathbf{H}_0 é o Hamiltoniano da rede limpa e não interagente.

Esta quantidade é diretamente acessada experimentalmente por técnicas como a espectroscopia de tunelamento por varredura. Utilizando a Eq. (3.37), podemos escrever

$$\rho_i(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\left[(\omega \mathbf{Z}^{-1} - \mathbf{v} - \mathbf{H}_0 - i\delta)^{-1} \right]_{ii} \right]_{\delta \rightarrow 0}. \quad (3.38)$$

No nível de Fermi ($\omega = 0$), a dependência de ρ_i com Z desaparece. Se agora assumirmos também que estamos próximos da transição de Mott, temos que $v_i \approx 0$ devido à blindagem da desordem, o que nos permite escrever que $\rho_i(0) \approx \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\left[(-\mathbf{H}_0 - i\delta)^{-1} \right]_{ii} \right]_{\delta \rightarrow 0}$, e portanto independente dos valores de U e W !

Para ilustrar este fato, calculamos a distribuição espacial da densidade de estados para uma realização específica de desordem, como mostrado na Fig. (3.12). Na energia de Fermi, a blindagem da interação pela desordem é forte e o sistema fica cada vez mais homogêneo ao nos aproximarmos da transição. Em energias mais altas, o termo ω/Z_i introduz desordem no sistema e ele apresenta estruturas espaciais bem definidas.

Portanto, nossos resultados preveem que sistemas fortemente correlacionados desordenados, quando acessados na energia de Fermi, são robustos contra efeitos de desordem.

Para entendermos um pouco melhor esta forte blindagem da desordem pela interação, recorreremos à solução do problema de uma impureza como discutido na seção (2.1). Pelas Eqs. (2.59) e (2.55) podemos escrever, utilizando a associação imediata $r^2 = Z$

$$Z\Gamma = T_K = D e^{-\pi U/8\Gamma}, \quad (3.39)$$

e

$$v = \frac{\pi}{2} \Gamma Z + \text{Re} [\Delta(0)], \quad (3.40)$$

onde $\Gamma = \text{Im} [\Delta(0)]$. Comparando a Eq. (3.39) com a Eq. (3.33), podemos ver imediatamente o efeito da condição de autoconsistência da TDCM. Enquanto no problema de uma impureza Z vai a zero exponencialmente com U , no problema autoconsistente da rede ele o faz linearmente. De qualquer forma, como a temperatura Kondo é proporcional ao peso de quasipartícula, (3.39), a transição de Mott pode ser pensada como a diminuição da temperatura Kondo e a consequente destruição do líquido de Fermi [20].

Ignorando por um instante a condição de autoconsistência, vemos então que na medida em que $Z \rightarrow 0$ (limite Kondo), v (que nesta linguagem fornece a posição da ressonância Kondo) aproxima-se da energia de Fermi, independentemente do valor inicial da energia do sítio ε_i , desde que tenhamos simetria partícula-buraco ($\text{Re} [\Delta(0)] = 0$). Assim, o fato de encontrarmos que $\sigma(v)$ é fortemente suprimido nas vizinhanças da transição de Mott está diretamente ligado à física não perturbativa do efeito Kondo descrita pela nossa abordagem [44].

3.2.2.2 Blindagem dependente da frequência

Já vimos que a distribuição $P(v)$ fica mais estreita próximo da transição de Mott. Agora, investigaremos qual é o comportamento da distribuição $P(Z)$, ou, equivalentemente, de $P(Z/Z_{typ})$.

Como já dissemos, a abordagem da TEDCM incorpora correlações espaciais entre as quantidades físicas, implicando, por exemplo, que o valor do peso de quasipartícula de um determinado sítio dependa do valor dos pesos de quasipartículas nos sítios vizinhos. Portanto, devido a configurações raras de desordem, esperamos que seja possível encontrarmos regiões espaciais nas quais $Z_i \ll Z_{typ}$ (regiões vermelhas na Fig. (3.13)). Como nas proximidades da transição de Mott $Z_i \rightarrow 0$, tais regiões devem ser reconhecidas como ilhas de Mott “quase localizadas” dentro do bulk metálico correlacionado. Pela nossa abordagem do tipo Brinkman-Rice, tais ilhas dão uma contribuição praticamente singular para a susceptibilidade magnética local (χ_i) e para o coeficiente de Sommerfeld do calor específico (γ_i), uma vez que $\chi_i \sim \gamma_i \sim Z_i^{-1}$. Vemos assim que as regiões com os menores Z_i dominam a resposta termodinâmica do sistema e dão origem a uma fase de Griffiths eletrônica na vizinhança da transição de Mott, como mostrado na Fig. (3.8) e discutido na seção (3.3).

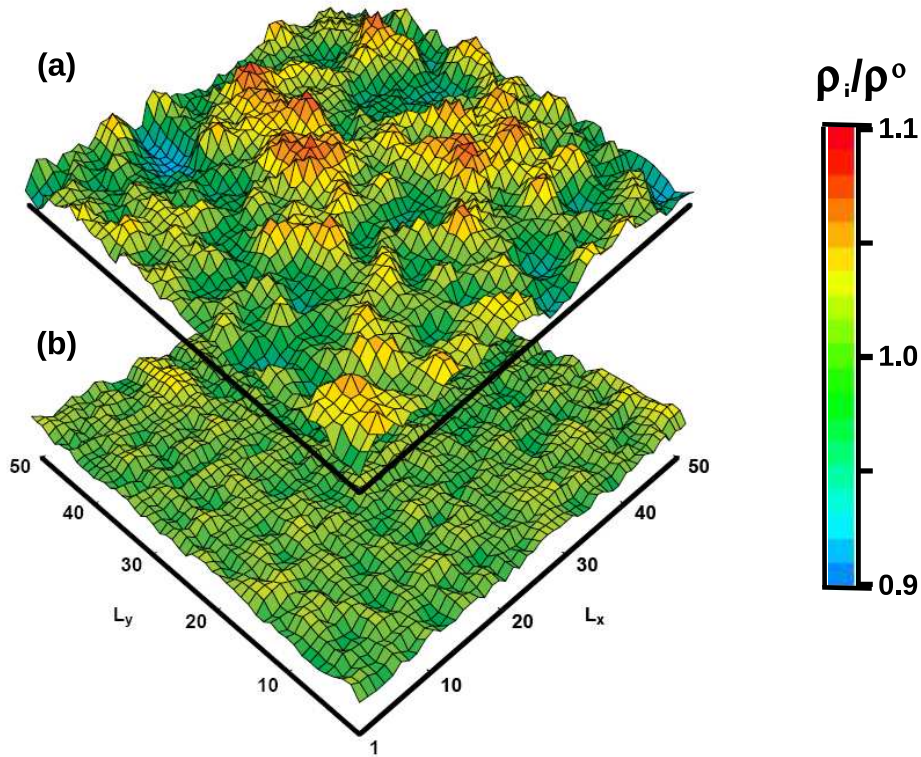


Figura 3.12: Distribuição espacial da densidade de estados local normalizada por seu valor limpo e não interagente para uma dada realização de desordem e dois valores de energias: (a) Fora da energia de Fermi, $\omega = 0.1$; (b) Na energia de Fermi, $\omega = 0$. Devido à blindagem da desordem pela interação, a distribuição torna-se homogênea nas proximidades da energia Fermi e apresenta uma estrutura espacial pronunciada em energias maiores. Os resultados são mostrados para $U/U_c = 0.96$, $W = 0.75$ e $L = 50$. Mostrado pela primeira vez na Ref. [36].

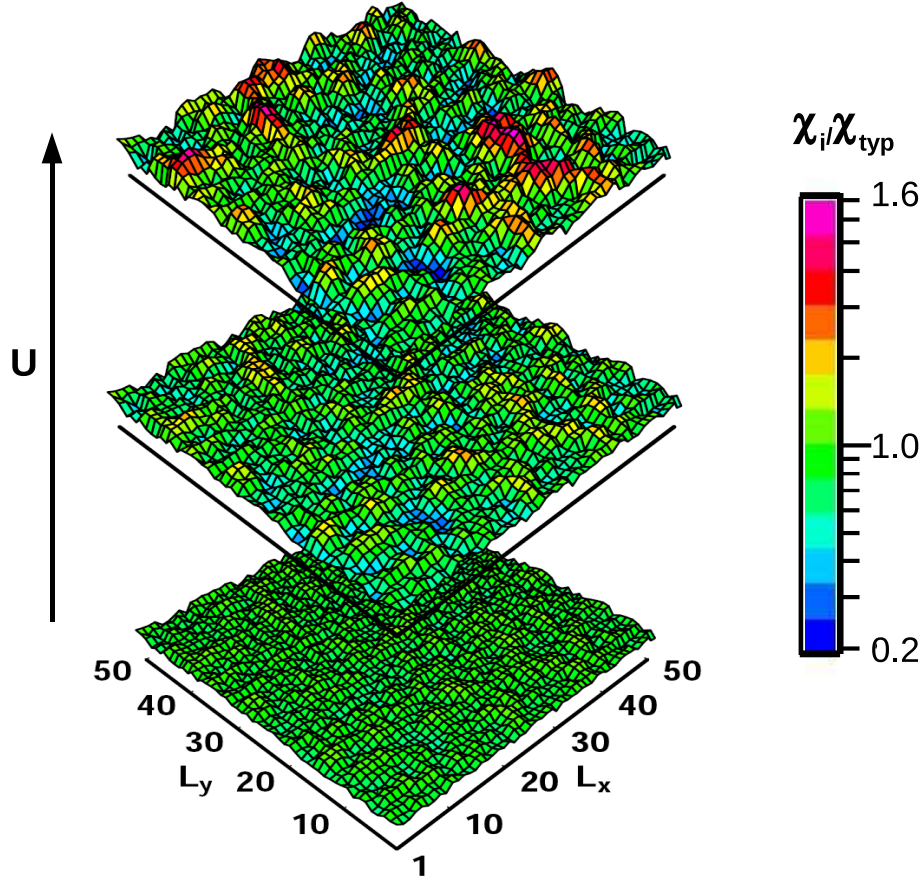


Figura 3.13: Distribuição espacial para as susceptibilidades magnéticas locais $\chi_i \sim Z_i^{-1}$ normalizadas por seu valor típico χ_{typ} para uma dada realização de desordem. De baixo para cima, temos: $U/U_c = 0.73, 0.87, 0.96$. A escala de cor é logarítmica para enfatizar o fato de que, ao nos aproximarmos da transição, temos a formação de regiões nas quais $\chi_i \gg \chi_{typ}$ (momentos magnéticos localizados, regiões vermelhas) ou $\chi_i \ll \chi_{typ}$ (sítios vazios ou duplamente ocupados e inertes magneticamente, regiões azuis). Os resultados são mostrados para $L = 50$ e $W = 2.25$. Mostrado pela primeira vez na Ref. [38]

As ilhas de Mott possuem uma influência direta na distribuição de probabilidade $P(Z/Z_{typ})$, uma vez que elas dão origem a uma cauda nesta distribuição para pequenos valores de Z , contribuindo para o fato de que $P(Z/Z_{typ})$ fica na verdade mais larga à medida que nos aproximamos da transição metal-isolante de Mott para uma dada amplitude de desordem W fixa, Figs. (3.13) e (3.14). Certamente, há também uma contribuição para este alargamento vinda da cauda correspondente a altos valores de Z , proveniente daqueles sítios com $Z_i \gg Z_{typ}$ (regiões azuis na Fig. (3.13)). Estes sítios permanecem com um Z_i finito na transição e estão basicamente vazios ou duplamente ocupados. Contudo, a contribuição destes sítios para os fenômenos que analisaremos não é relevante, pois toda a contribuição singular (tanto para as quantidades termodinâmicas, quanto para a função espectral) vem das ilhas de Mott.

Fica claro que o comportamento das distribuições $P(v)$ e $P(Z/Z_{typ})$ nas vizinhanças do ponto crítico é oposto. Enquanto a primeira sugere a blindagem da desordem, a segunda sugere que a desordem de fato cresce. Esta dicotomia dá origem a uma desordem efetiva dependente da energia. Novamente, olharemos para os efeitos deste fenômeno através da densidade de estados local do sistema. Da Eq. (3.38), vemos que a desordem efetiva “vista” pelas quasipartículas na energia ω pode ser definida como

$$\varepsilon_i^{eff}(\omega) = \frac{\omega}{Z_i} - v_i. \quad (3.41)$$

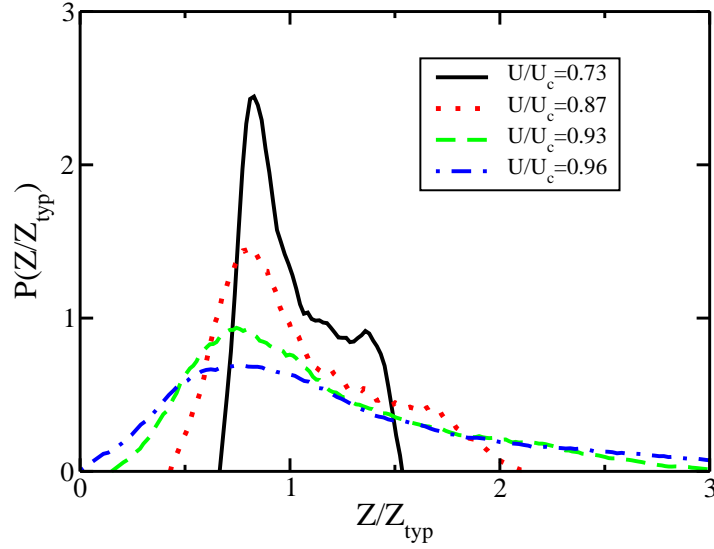


Figura 3.14: Distribuição dos pesos de quasipartícula divididos pelo seu valor típico para $W = 2.25$ e $U_c(W) = 3.7$. Na medida em que nos aproximamos do ponto crítico, $P(Z/Z_{typ})$ fica mais larga, mesmo considerando que mantemos a amplitude de desordem W fixa. Os resultados são mostrados para $L = 20$.

Na nossa aproximação, a largura de banda das quasipartículas é reduzida por um fator que é dado aproximadamente por Z_{typ} quando $U \rightarrow U_c$. Para monitorar o comportamento dentro da banda de quasipartículas, definimos uma frequência reescalada $\omega^* = \omega/Z_{typ}$, que será mantida constante ao nos aproximarmos da transição. Na Fig. (3.15), mostramos mapas topográficos da densidade de estados local para uma realização específica de desordem. Devido à blindagem da interação pela desordem, temos $v_i \approx 0$. Logo, se o sistema é examinado na energia de Fermi ($\omega = 0$), ele se torna mais e mais homogêneo próximo da transição. Já para energias finitas ($\omega^* \neq 0$), as flutuações de Z_{typ}/Z_i estão presentes e, como elas são muito fortes na criticalidade, temos um aumento da inhomogeneidade do sistema.

Este resultado é surpreendentemente semelhante a imagens espectroscópicas recentes em sistemas de cupratos dopados [39]. Nossa teoria captura apenas os efeitos locais da correlação (do tipo Kondo) e negligencia interações magnéticas entre os sítios. Ela também não inclui qualquer física relacionada à formação de pares supercondutores, o que nos parece um forte indício de que inhomogeneidades dependentes da energia são de fato uma característica robusta e geral para sistemas de Mott desordenados. De fato, resultados recentes [45] corroboram esta visão de uma desordem dependente da energia em sistemas eletrônicos desordenados fortemente correlacionados.

3.3 Fase de Griffiths eletrônica

Para complementarmos a discussão da seção anterior, iremos caracterizar melhor a fase de Griffiths eletrônica (FGE) que surge antes da transição de Mott, Fig. (3.8). Primeiramente, ressaltamos que a FGE não é uma fase termodinâmica separada. Ela apenas marca uma mudança do comportamento do sistema, quando ele passa de líquido de Fermi a não líquido de Fermi.

A escala de temperatura que marca a entrada no comportamento do tipo líquido de Fermi é dada pela temperatura de coerência $T^* \approx ZT_F$, onde T_F é a temperatura de Fermi. Esta temperatura é o análogo para o problema de rede da temperatura Kondo definida no problema de uma impureza. Abaixo desta temperatura, o sistema fortemente interagente comporta-se como um gás de elétrons livres, só que com a renormalização de algumas quantidades como a massa ($m^* = m/Z$) e a susceptibilidade magnética de spin $\chi^{-1} \sim Z\chi_o^{-1}$.

Vimos na seção anterior que as flutuações induzidas pela desordem fazem com que tenhamos regiões nas quais $Z_i \ll Z_{typ}$, o que implica que $T_i^* \ll T_{typ}^*$. Ou seja, cada vez mais precisamos de temperaturas menores para fazer com que estas regiões raras entrem no regime do tipo líquido de Fermi. Uma das consequências deste fato é que, para temperaturas T no intervalo $T_i^* < T < T_{typ}^*$, a contribuição de tais regiões para a susceptibilidade é dada pela lei de Curie $\chi_i^{-1} \sim T$, uma vez que elas podem ser pensadas como momentos magnéticos localizados livres. Como $T_i^* \approx 0$ na criticalidade, vemos que estas regiões dão uma contribuição singular para a susceptibilidade do sistema.

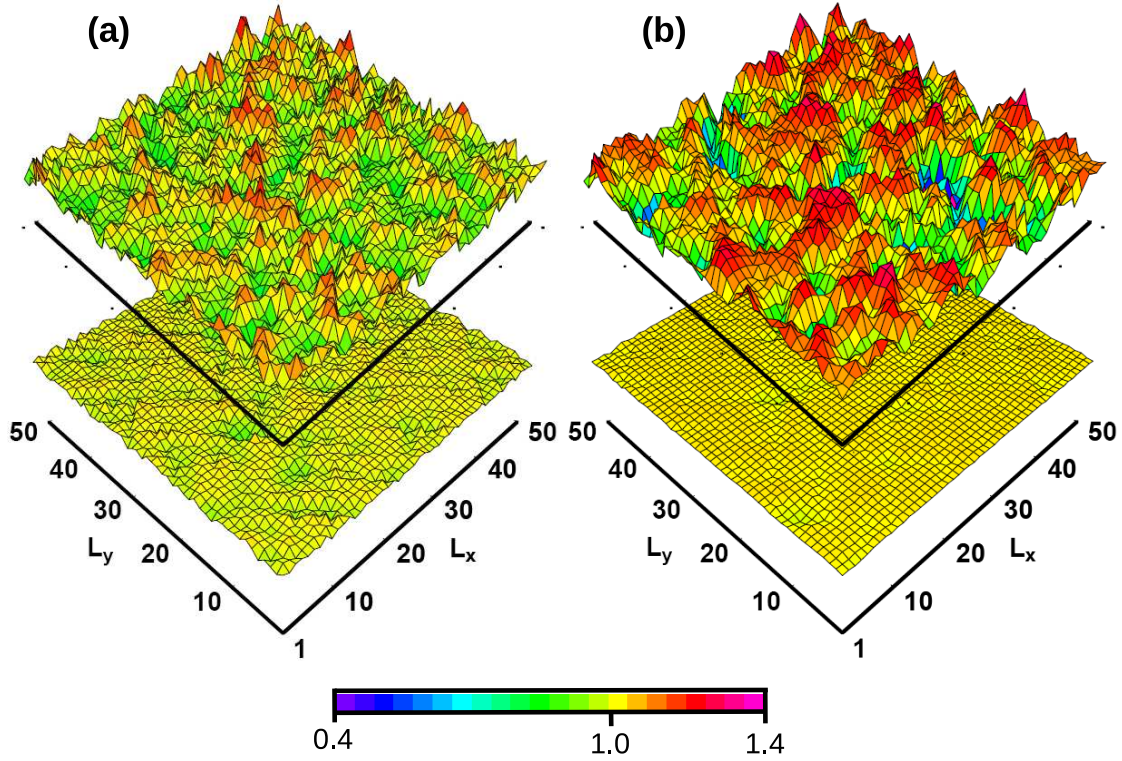


Figura 3.15: Distribuição espacial da densidade de estados local normalizada por seu valor limpo e não interagente para uma dada realização de desordem e dois valores de interação: (a) $U/U_c = 0.87$ e (b) $U/U_c = 0.96$, com $U_c = 3.7$. Temos $\omega = 0$ nas figuras de baixo e $\omega^* = \omega/Z_{typ} = 0.1$ nas de cima. Na energia de Fermi, a densidade de estados torna-se mais homogênea quando nos aproximamos da transição de Mott. Se nos afastamos um pouco da energia de Fermi, a densidade de estados torna-se, na verdade, mais inhomogênea perto de U_c . Os resultados são mostrados para $L = 50$ e $W = 2.25$. Mostrado pela primeira vez na Ref. [38].

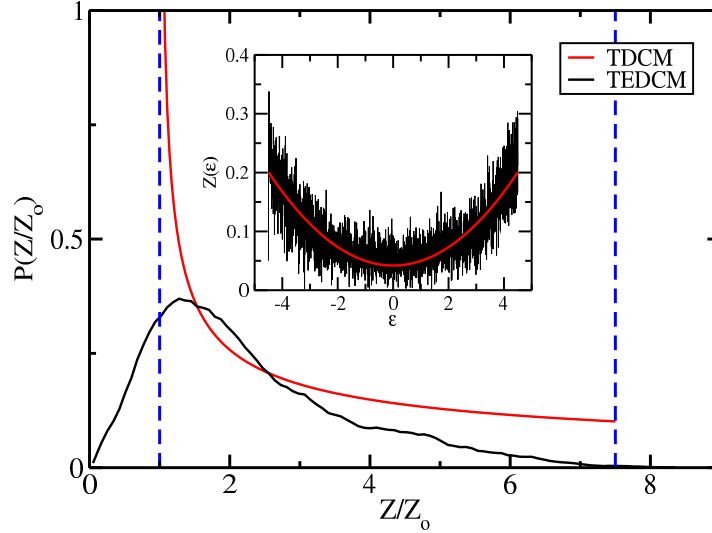


Figura 3.16: Distribuição do peso de quasipartícula normalizada por Z_o , que é o menor valor encontrado dentro da solução da TDCM. Aqui comparamos a solução da TDCM (sem flutuações no banho) e a solução da TEDCM (com flutuações no banho). A distribuição obtida em TDCM é limitada tanto inferiormente quanto superiormente, linhas tracejadas, contrariamente àquela obtida pela TEDCM, na qual encontramos, em particular, $Z_i \ll Z_o$. Na inserção, temos a função $Z(\varepsilon)$, novamente para os dois casos, ilustrando que, para a TDCM, $Z_i = Z_o + A\varepsilon_i^2$ (neste exemplo, $Z_o = 0.042$ e $A = 0.008$). Os resultados são mostrados para $L = 50$, $U/U_c = 0.93$ e $W = 2.25$.

Embora tenhamos obtido todos os nossos resultados dentro da aproximação de bósons escravos, eles podem ser entendidos de forma muito mais geral dentro de uma teoria do tipo líquido de Fermi.

Esta é a mesma fenomenologia que obtemos no caso de fases de Griffiths magnéticas, discutidas na seção (3.1), onde as regiões raras também dão uma contribuição singular para a susceptibilidade. A diferença aqui é que a transição de Mott não envolve qualquer tipo de quebra de simetria, justificando assim a introdução do conceito de fase de Griffiths eletrônica [2, 17, 37].

Para descrevermos uma fase de Griffiths, precisamos acessar graus de liberdade não perturbativos no sistema, que são as regiões raras. Isso só é alcançado se tratarmos a desordem exatamente, ainda que restringindo nossos estudos a redes de tamanhos finitos. Para ilustrarmos este ponto, compararemos a solução da TDCM, em que todos os sítios vêm o mesmo banho, e portanto a desordem é tratada na média, com a solução da TEDCM, na qual cada sítio possui um meio efetivo (banho eletrônico) diferente, levando assim em conta todos os efeitos da desordem. Calculamos a distribuição $P(Z)$ usando ambas as técnicas, e o resultado é mostrado na Fig. (3.16).

Na inserção da Fig. (3.16), mostramos que um cálculo utilizando TDCM para a nossa rede quadrada nos dá [28, 44]

$$Z_i = Z_o + A\varepsilon_i^2, \quad (3.42)$$

onde $Z_o = Z_i(\varepsilon_i = 0)$ é o menor valor que podemos encontrar, uma vez que Z_i só depende da energia ε_i do sítio i e A é uma constante que depende de U e W .

Como a distribuição $P(\varepsilon)$ é conhecida, Eq. (3.35), e sabemos como Z depende de ε , podemos calcular $P(Z)$ realizando uma simples troca de variáveis. Contudo, em vez de calcularmos $P(Z)$, é conveniente calcularmos $P(z)$, onde $z = Z/Z_o$. Isso porque esta distribuição tende a uma curva universal próximo da transição de Mott na solução TDCM [28]. Para encontrarmos $P(z)$, utilizamos a seguinte prescrição

$$P(z) = P(\varepsilon(z)) \left| \frac{d\varepsilon(z)}{dz} \right|, \quad (3.43)$$

onde $\varepsilon(z) = \pm \sqrt{(Z_o/A)(z-1)}$ é a inversa da Eq. (3.42). Devemos notar que esta transformação não é unicamente definida, o que nos dará o fator dois na distribuição $P(z)$, garantindo que ela saia normalizada

$$P(z) = \begin{cases} (Z_o/(AW^2))^{1/2} (z-1)^{-1/2}, & 1 \leq z \leq 1 + AW^2/4Z_o; \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.44)$$

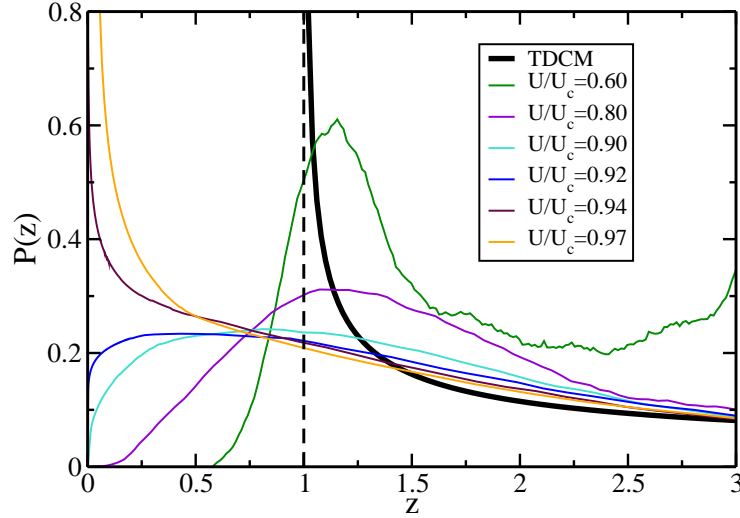


Figura 3.17: Distribuição $P(z = Z/Z_o)$ à medida que nos aproximamos da transição de Mott. Por completudeza, mostramos também a forma fixa da distribuição obtida pela TDCM. Nossos resultados utilizando TEDCM mostram que, devido aos eventos raros, uma cauda ($P(z) \sim z^{\alpha-1}$) emerge na distribuição para $z \lesssim 1$ na medida em que nos aproximamos do ponto crítico. Quando $\alpha < 1$, a distribuição assume uma forma singular, indicando a entrada na fase de Griffiths. Os resultados são mostrados para $L = 20$ e $W = 5.00$. Mostrado pela primeira vez na Ref. [36].

mostrando que no caso da TDCM, $P(z)$ é de fato cotada tanto inferiormente quanto superiormente.

Na Fig. (3.16), comparamos esse $P(z)$ dado pela Eq. (3.44) com aquele obtido pela solução completa da TEDCM. Para produzirmos uma comparação com mais sentido, também reescalamos a solução da TEDCM pelo *mesmo* Z_o obtido via TDCM. Notamos que, enquanto a solução da TDCM é limitada tanto superiormente quanto inferiormente, a solução da TEDCM não possui esses limites. Em particular, podemos encontrar Z_i arbitrariamente pequenos tais que $Z_i \ll Z_{typ} \sim Z_o$, que serão justamente os responsáveis pela emergência da fase de Griffiths.

Na Fig. (3.17) vemos que ao nos aproximarmos do ponto crítico, uma cauda emerge em $P(z)$ para $z \lesssim 1$ devido aos eventos raros. Esta cauda é descrita por uma lei de potência na forma

$$P(z) \sim z^{\alpha-1}. \quad (3.45)$$

Fisicamente, a emergência de uma larga distribuição de peso de quasipartícula Z_i indica a presença de raras configurações de desordem caracterizadas por escalas de energia $\Delta_i = T_i^* \approx Z_i T_F$ anormalmente pequenas. Mais uma vez, vemos que a fenomenologia da FGE é similar àquela das fases de Griffiths magnéticas, dado que também encontramos uma distribuição do tipo lei de potência para a escala de energia do problema (veja Eq. (3.11)).

Determinamos o coeficiente $\alpha(U)$ através de dois métodos distintos que são descritos em mais detalhes no Apêndice (C). O primeiro baseia-se no estimador [118] $\hat{\alpha} = \langle \ln[Z_{max}/Z_i] \rangle_{Z_i \leq Z_{max}}^{-1}$, onde $Z_{max} \sim Z_{typ} \sim Z_o$ é um limite superior adequado para o comportamento do tipo lei de potência. O segundo método envolve o cálculo da quantidade $\langle Z^{-\mu} \rangle_{Z_i \leq Z_{max}}^{-1}$ para um μ fixo como função de U . Esta quantidade vai a zero para $U = U_\mu$, onde temos $\alpha = \mu$. Ambos os métodos (respectivamente símbolos vazios e cheios na Fig. (3.18)) dão resultados consistentes dentro das barras de erros calculadas.

O erro do estimador é dado por [118] $\sigma_{\hat{\alpha}} = \hat{\alpha}/\sqrt{n}$, onde n é número de dados para os quais $Z_i \leq Z_{max}$. Já o erro do segundo método é o erro da extrapolação (linear) para determinarmos U_μ . Como temos um número grande de pontos, cerca de 10^4 para cada símbolo da Fig. (3.18), estes erros são bem controlados e pequenos. O que introduz a maior incerteza é o valor de Z_{max} . Para determinarmos o Z_{max}^o ótimo, devemos calcular o valor α para diferentes limites superiores Z_{max}^j até encontramos um valor Z_{max}^o para o qual α não varie muito (dentro de um critério de tolerância) ao redor dele. Estes erros diminuem com o aumento de W e U , pois em ambos os casos $P(Z)$ alarga-se, e temos cada vez mais sítios nos quais $Z_i \ll Z_{typ}$. Na Fig. (3.19), mostramos como nossos resultados não padecem de efeitos de tamanho finito para os tamanhos de redes que consideramos em nosso trabalho.

Encontramos que o expoente α diminui continuamente à medida que nos aproximamos da transição, até que a distribuição $P(Z)$ (Eq. (3.45)) assumia uma forma singular ($\alpha < 1$), indicando a emergência de uma fase de Griffiths eletrônica. Sempre encontramos que o início da fase de Griffiths precede a transição metal-isolante, Fig.

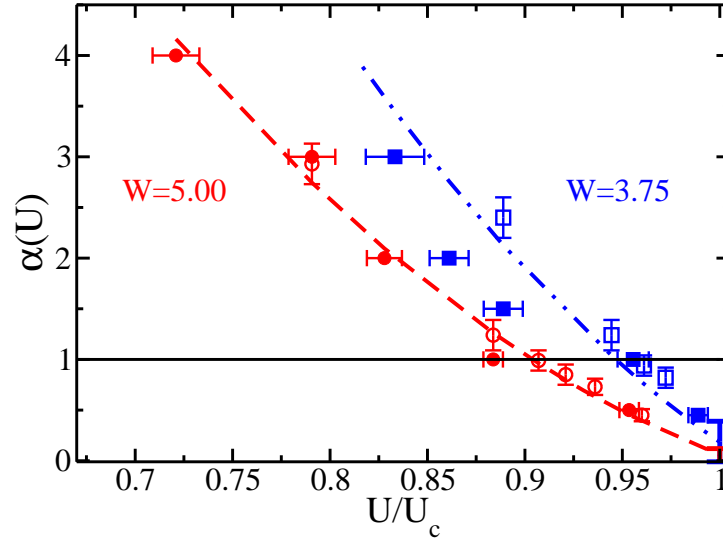


Figura 3.18: Expoente $\alpha(U)$ para dois valores de desordem. Para calcularmos α , usamos dois métodos diferentes (símbolos cheios e vazios, veja o texto). A entrada na fase de Griffiths eletrônica ocorre quando $\alpha = 1$ (linha contínua horizontal). Dentro das barras de erros estimadas, encontramos um valor extrapolado que é consistente com $\alpha = 0$ na transição de Mott. Os resultados são mostrados para $L = 20$. Mostrado pela primeira vez na Ref. [36].

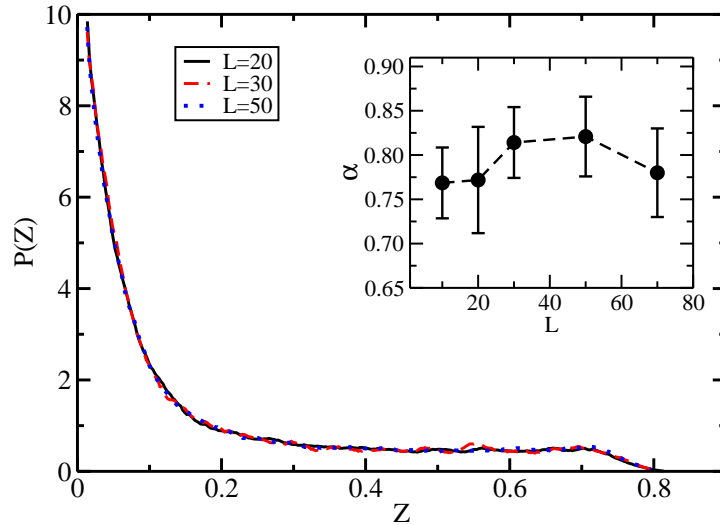


Figura 3.19: Distribuição dos pesos de quasipartículas $P(Z)$ para três tamanhos L diferentes de rede. Na inserção temos o valor do expoente α , calculado pelo método do estimador, como função de L . Ambos mostram como nossos resultados são independentes do tamanho de rede para as redes consideradas aqui. Os resultados são mostrados para $W = 5.00$ e $U/U_c = 0.93$, onde $U_c = 5.3$.

(3.8), indicando que as flutuações introduzidas pela desordem alteram qualitativamente o comportamento crítico, mesmo para desordens fracas e moderadas. Interessantemente, encontramos dentro de nossa precisão numérica que $\alpha \rightarrow 0$ precisamente na curva crítica $U = U_c(W)$. Como α^{-1} mede a largura de $\ln[Z_i]$ (Apêndice (C)), a distribuição $P(Z)$ torna-se infinitamente larga no ponto crítico, corroborando o que já havíamos apresentado nas Figs. (3.13) e (3.14). Temos assim uma fenomenologia muito próxima à das fases de Griffiths magnéticas que apresentam um ponto fixo de desordem infinita [18, 86] na transição de fase. Neste ponto, temos justamente que a distribuição de escalas de energia do problema torna-se infinitamente larga, mesmo que a amplitude da desordem despida (o análogo do nosso W) seja finita. Ressaltamos aqui que sempre temos $0 \leq Z_i \leq 1$ e, não só no nosso caso, mas como em todas as outras fases de Griffiths, é importante que olhemos para o logaritmo da escala de energia, pois é a distribuição desta quantidade que se estende por várias ordens de grandeza.

Para explorarmos a estrutura dos eventos raros que dão origem à fase de Griffiths, examinamos um número de realizações de desordem e escolhemos aquelas que continham os menores Z_i . Um exemplo típico é mostrado na Fig. (3.20), onde o evento raro é visto como um pico bem definido na susceptibilidade local de spin $\chi_i \sim Z_i^{-1}$ (note a escala logarítmica de cores). A região rara correspondente a esse evento raro é então colocada dentro de uma caixa de lado l (linhas tracejadas da Fig. (3.20)). Para analisarmos o papel das correlações espaciais, mantemos a mesma realização de desordem dentro da caixa enquanto trocamos o ambiente externo por um meio efetivo apropriado⁶. Então calculamos novamente os parâmetros Z_i na medida em que o tamanho da caixa é reduzido de $l = L$ (tamanho original), até $l = 1$ (limite TDCM onde todas as correlações espaciais são suprimidas). Encontramos que o evento raro permanece basicamente o mesmo até a caixa atingir um tamanho $l \sim l_{ER}$ ($l_{ER} \approx 9$ no exemplo da Fig. (3.20)), e é então rapidamente (exponencialmente) suprimido para $l < l_{ER}$. Deste modo, vemos que as correlações espaciais induzidas pela desordem são de fato importantes para a física de eventos raros e que elas possuem um comprimento de correlação bem definido, além do qual o ambiente externo tem pouca ou nenhuma influência.

Nós também verificamos que a amplitude de desordem dentro da caixa⁷ de tamanho l_{ER} é apreciavelmente menor do que o valor W do bulk, e, portanto, que $U_c^{ER} < U_c(W)$, estabelecendo assim que os eventos raros que dominam a fase de Griffiths surgem de configurações raras de desordem, precisamente como esperado de um cenário de ponto fixo de desordem infinita.

Retomamos agora os argumentos da seção (3.1), onde dissemos que uma distribuição do tipo lei de potência para a escala de energia do problema ocorre porque a probabilidade exponencialmente pequena de encontrarmos uma região rara é compensada pela também dependência exponencial da escala de energia (“gap” de energia) no volume da região rara, Eq. (3.11). Para verificarmos que Z possui uma dependência exponencial com o volume da região rara, fizemos um cálculo similar ao descrito acima. Definimos uma caixa de tamanho l no centro de uma rede quadrada de tamanho L . Dentro desta caixa de tamanho l , representamos um evento raro fazendo com que $U > U_c$ aí dentro. Fora da caixa, escolhemos $U < U_c$, de modo que Z_{bulk} permaneça finito. O resultado deste procedimento é mostrado na Fig. (3.21) onde vemos que, de fato, $Z \sim e^{-al^2}$ dentro da região rara.

⁶Este meio efetivo é calculado considerando que $W = 0$, mas com amplitude de “hopping” efetiva t_{eff} tal que tenhamos o mesmo U_c que na solução utilizando TEDCM.

⁷Definimos a desordem efetiva como $W_{eff} = 4 \langle |\varepsilon_i| \rangle$, onde a média é avaliada considerando-se apenas os sítios dentro da caixa de tamanho l . Naturalmente, esta é apenas uma medida qualitativa, devido ao número pequeno de sítios dentro da caixa.

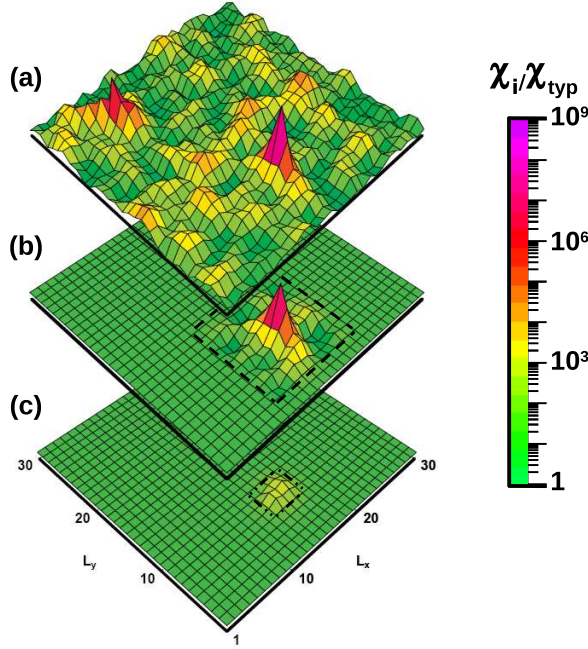


Figura 3.20: (a) Distribuição espacial da susceptibilidade local de spin $\chi_i \sim Z_i^{-1}$ normalizada pelo seu valor típico, ilustrando uma realização de desordem contendo um evento raro $\chi_i \gg \chi_{typ}$; (b) As flutuações induzidas pela desordem são eliminadas do lado de fora de uma caixa de lado $l = 9$ sem mudar apreciavelmente o evento raro; (c) Quando o tamanho da caixa é reduzido ainda mais, para $l = 3$, o evento raro é rapidamente (exponencialmente) suprimido, estabelecendo a característica não local dos eventos raros. Os resultados são mostrados para $W = 5.00$ e $U/U_c = 0.96$ e $L = 30$. Mostrado pela primeira vez na Ref. [36].

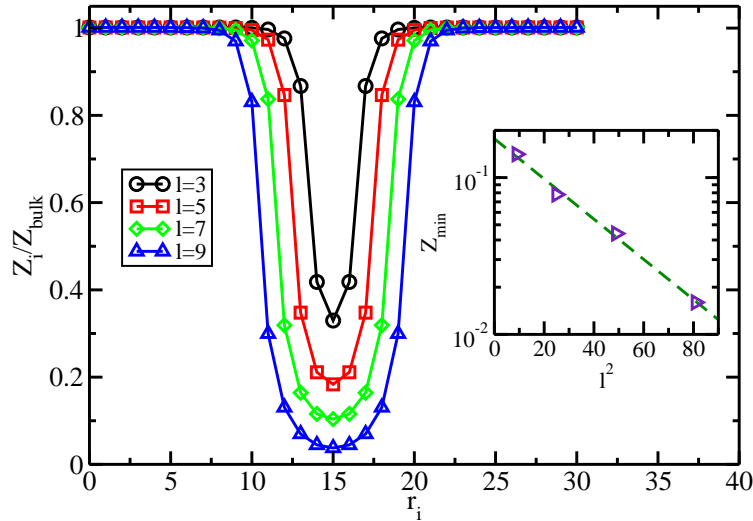


Figura 3.21: Perfil do valor do peso de quasipartícula Z_i em uma rede quadrada normalizado pelo seu valor no bulk Z_{bulk} como função da posição r_i na rede. Este cálculo foi feito assumindo que, no centro da rede, existe uma caixa de tamanho l representando um evento raro no qual $U > U_c$ e que fora desta caixa, $U < U_c$. Em ambas situações temos $W = 0$. Na medida em que aumentamos l , os valores de Z dentro do evento raro são suprimidos e esta região aproxima-se cada vez mais de um isolante de Mott. Na inserção mostramos o menor valor de Z , aquele calculado no centro da caixa do evento raro, como função do volume l^2 desta região rara, exibindo um decaimento exponencial. Utilizamos aqui $L = 31$, $U/U_c = 0.75$ para o bulk e $U/U_c = 1.01$ para a região rara, com $U_c \simeq 1.62D$.

Oscilações quânticas em metais fortemente correlacionados

A teoria dos líquidos de Fermi descreve o comportamento de sistemas metálicos interagentes a baixas temperaturas mesmo no caso em que as interações são muito fortes, como por exemplo em metais de transição [119] ou férmions pesados [90]. Na presença de perturbações que quebram a simetria translacional do problema, tais como impurezas e defeitos, o líquido de Fermi se reajusta, produzindo agora um potencial efetivo visto pelas quasipartículas que é inhomogêneo no espaço [2, 9]. Aqui, a natureza ondulatória dos elétrons manifesta-se pela formação de oscilações (as oscilações de Friedel [6]) na densidade eletrônica ao redor dessas perturbações. Processos de espalhamento de quasipartículas por estas ondulações produzem então novas correções com a temperatura para várias propriedades de transporte.

A teoria dos líquidos de Fermi só nos dá a forma funcional destas correções, sem dizer nada acerca do intervalo em que elas são dominantes dentro da teoria. Para obtermos este intervalo, precisamos de um cálculo em um modelo microscópico que não esteja restrito a apenas obter a forma das correções. Um cálculo cuidadoso e detalhado com este objetivo é desenvolvido ao longo deste capítulo.

Uma visão geral da teoria dos líquidos de Fermi de Landau é dada na seção (4.1), onde discutimos conceitos como massa efetiva, parâmetros de Landau e taxa de decaimento de quasipartículas, que serão amplamente utilizados nas seções posteriores. Para finalizar, fazemos a conexão do cenário de Brinkman-Rice para transição a de Mott com a teoria dos líquidos de Fermi.

Já na seção (4.2), passamos a discutir transporte em sistemas metálicos. Utilizamos o formalismo de Kubo aplicado à Teoria Dinâmica de Campo Médio, onde a condutividade possui uma forma particularmente simples devido ao fato de que a autoenergia eletrônica é local dentro desta abordagem.

Na seção (4.3) investigamos os efeitos de uma única impureza rígida e não magnética colocada em um metal paramagnético fortemente correlacionado [43]. O metal é descrito pelo modelo de Hubbard dentro da teoria de campo médio de bósons escravos. Não só resolvemos numericamente as equações de campo médio associadas, como também encontramos uma solução analítica no limite de espalhamento fraco (aproximação de Born). Além de corroborarem os resultados analíticos, os cálculos numéricos mostram que nossa teoria captura as tendências qualitativas do sistema mesmo para espalhamento forte.

As dependências dominantes da resistividade $\rho(T)$ com a temperatura são calculadas na seção (4.4). Utilizamos o cálculo microscópico desenvolvido na seção (4.3), considerando também a presença de espalhamento inelástico para investigarmos como essas correções dominantes a baixas temperaturas variam em função das correlações.

4.1 Teoria dos líquidos de Fermi

Desde sua introdução por Landau [120, 121, 122, 123], a teoria dos líquidos de Fermi tem sido uma poderosa ferramenta para o entendimento de sistemas de férmions interagentes. Embora introduzida inicialmente para descrever a fase normal do He^3 (um sistema neutro), ela forma a base de todo o nosso entendimento acerca de sistemas metálicos. O objetivo da teoria dos líquidos de Fermi é descrever os primeiros estados excitados de um sistema fermiônico e, portanto, suas propriedades de baixas temperaturas.

4.1.1 Formulação Geral

Imagine que começamos com um sistema fermiônico não interagente (gás de Fermi) em seu estado fundamental e que ligamos as interações entre as partículas de forma gradual [124]. Landau argumentou que, como os férmions próximos da superfície de Fermi não têm espaço de fase para onde espalhar (ver argumento formal ao final desta seção), na medida em que as interações são ligadas adiabaticamente, os estados do sistema não interagente original devem evoluir de maneira suave, sem haver cruzamento de níveis. Assim, os estados finais do sistema interagente estão em correspondência um a um com os estados iniciais do sistema não interagente. Naturalmente, para que a evolução adiabática se aplique, o estado fundamental do líquido de Fermi tem que permanecer estável. Esta condição é quebrada, por exemplo, quando o sistema sofre uma transição de fase para outro estado fundamental, uma situação que pode ocorrer para um certo valor crítico da interação, como no caso da transição de Mott.

Um dos principais conceitos que emerge da teoria de Landau dos líquidos de Fermi é o de quasipartícula, que, em essência, é a evolução adiabática do férmion não interagente para um meio interagente. Como resultado da teoria, temos que, embora a carga e o spin desta quasipartícula não sejam afetados pelas interações, sua massa e seu momento magnético são renormalizados para m^* e g^* , respectivamente.

Um segundo ponto importante desta teoria é que ela introduz uma interação efetiva entre as quasipartículas. Para introduzi-la, temos que levar em conta o seguinte fato: a quantidade de momento que duas partículas podem trocar durante uma colisão vai a zero na superfície de Fermi devido ao princípio da exclusão de Pauli. Portanto, no limite de baixas energias (energias próximas da energia de Fermi), o número de quasipartículas com um dado momento \mathbf{p} e projeção de spin σ , $n_\sigma(\mathbf{p})$ ¹ torna-se uma constante do movimento. Sendo assim, é razoável supormos que a energia deste gás de quasipartículas possa ser expressa como um funcional de $n_\sigma(\mathbf{p})$. Como estamos a baixas temperaturas, temos uma baixa densidade de quasipartículas e a energia total do sistema é dada por

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) \delta n_\sigma(\mathbf{p}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma'} f(\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma') \delta n_\sigma(\mathbf{p}) \delta n_{\sigma'}(\mathbf{p}'), \quad (4.1)$$

onde E_0 é a energia do estado fundamental, $\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) = p^2/2m^*$ é a energia de uma quasipartícula isolada, $\delta n_\sigma(\mathbf{p}) = n_\sigma(\mathbf{p}) - n_\sigma^{(0)}(\mathbf{p})$ é o desvio no número de quasipartículas com relação ao estado fundamental e $f(\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma')$ descreve a interação entre as quasipartículas na superfície de Fermi.

O coeficiente de primeira ordem $\varepsilon_\sigma(\mathbf{p})$ está associado à energia total através da seguinte derivada funcional

$$\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) = \left. \frac{\delta E}{\delta n_\sigma(\mathbf{p})} \right|_0, \quad (4.2)$$

onde 0 denota o estado fundamental (esfera de Fermi). Esta energia pode ser linearizada nas proximidades da superfície de Fermi, donde obtemos que

$$\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) = v_F (|\mathbf{p}| - k_F) + \varepsilon_F = \frac{k_F}{m^*} (|\mathbf{p}| - k_F) + \varepsilon_F, \quad (4.3)$$

onde $v_F = \partial \xi_\sigma^{(0)} / \partial \mathbf{p} \big|_{|\mathbf{p}|=k_F}$ é a velocidade; k_F , o momento; e ε_F , a energia de Fermi. Podemos também definir uma densidade de estados para estas quasipartículas, que, no nível de Fermi, é dada por

$$\rho^*(\varepsilon_F) = 2 \sum_{\mathbf{p}} \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_\sigma(\mathbf{p})) = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3} \int dpp^2 \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_\sigma(\mathbf{p})) = \frac{m^* k_F}{\pi^2 \hbar^3}, \quad (4.4)$$

e vemos que a massa efetiva determina a densidade de estados no nível de Fermi.

Já os coeficientes de segunda ordem são dados pela seguinte derivada funcional

$$f(\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma') = \left. \frac{\delta^2 E}{\delta n_\sigma(\mathbf{p}) \delta n_{\sigma'}(\mathbf{p}')} \right|_0,$$

¹Uma vez que as quasipartículas mudam adiabaticamente a partir de férmions livres, elas também seguem a distribuição de Fermi-Dirac: $n_\sigma(\mathbf{p}) = \{\exp[\beta(\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu)] + 1\}^{-1}$. O que devemos salientar é que essa equação é agora uma relação de recorrência, uma vez que a energia $\varepsilon_\sigma(\mathbf{p})$ das quasipartículas passa a ser uma função de $n_\sigma(\mathbf{p})$. A única exceção ocorre quando estamos exatamente a $T = 0$, onde recuperamos a forma usual $n_\sigma(\mathbf{p}) = \theta(k_F - |\mathbf{p}|)$.

Quantidade física	Não interagente	Líquido de Fermi
Momento de Fermi	k_F	k_F (não muda) Teorema de Luttinger [129, 130]
Densidade de férmions	$n = k_F^3/3\pi^2$	$n = k_F^3/3\pi^2$ (não muda)
Massa efetiva	m	$m^* = m(1 + F_1^s/3)$
Densidade de estados no nível de Fermi	$\rho(\varepsilon_F) = mk_F/\pi^2\hbar^2$	$\rho^*(\varepsilon_F) = m^*k_F/\pi^2\hbar^2$
Coefficiente γ de Sommerfeld do calor específico: $C_V = \gamma T$	$\pi^2 k_B^2 \rho(\varepsilon_F)/3$	$\pi^2 k_B^2 \rho^*(\varepsilon_F)/3$
Susceptibilidade paramagnética de Pauli χ	$\mu_B^2 \rho(\varepsilon_F)$	$\mu_B^2 \rho^*(\varepsilon_F)/(1 + F_0^s)$
Compressibilidade κ	$\rho(\varepsilon_F)/n^2$	$\rho^*(\varepsilon_F)/(1 + F_0^s)n^2$

Tabela 4.1: Relação entre os parâmetros de Landau $F_{0,1}^{s,a}$ e as quantidades renormalizadas em um líquido de Fermi, assumindo uma dispersão parabólica no caso não interagente. Retirada da Ref. [131]

sendo, portanto, simétricos $f(\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma') = f(\mathbf{p}'\sigma', \mathbf{p}\sigma)$. Na presença deste termo, a energia das quasipartículas $\xi_\sigma(\mathbf{p})$ passa a depender dos desvios $\delta n_\sigma(\mathbf{p})$ e é dada por

$$\xi_\sigma(\mathbf{p}) = \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) + \sum_{\mathbf{p}\sigma'} f(\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma') \delta n_{\sigma'}(\mathbf{p}'). \quad (4.5)$$

A Eq. (4.5) indica que a energia de uma quasipartícula de momento \mathbf{p} não é simplesmente a energia da quasipartícula isolada $\varepsilon_\sigma(\mathbf{p})$, pois possui um termo extra que descreve o efeito de um campo médio estático, ou campo molecular [125], gerado por todas as outras partículas.

Na ausência de um campo magnético externo, $\xi_\sigma(\mathbf{p})$ não depende do spin, e escrevemos $\xi_\sigma(\mathbf{p}) = \xi(\mathbf{p})$. Deste modo, $f(\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma')$ pode depender apenas do produto $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma}'$, onde σ_i é uma matriz de Pauli, e temos de forma geral que [126, 127]

$$f(\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma') = f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^s + f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma}', \quad (4.6)$$

onde a interação passa a ter uma parte simétrica, independente do spin e denotada por s , e uma anti-simétrica, que depende do spin e é denotada por a . Na prática, estamos interessados em fenômenos próximos da superfície de Fermi de tal modo que $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'| = k_F$, implicando que, para um sistema isotrópico, $f(\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma')$ depende apenas do ângulo θ entre \mathbf{p} e \mathbf{p}' , $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' = k_F^2 \cos[\theta]$. É útil transformarmos $f^{s,a}$ em quantidades adimensionais, fazendo $F^{s,a} = \rho^*(\varepsilon_F) f^{s,a}$. Finalmente, como $F^{s,a}$ só dependem de $\cos[\theta]$, é conveniente expandi-los na base dos polinômios de Legendre [70] de tal forma que

$$F^{s,a}(\cos[\theta]) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) F_l^{s,a} P_l(\cos[\theta]). \quad (4.7)$$

Os coeficientes $F_l^{s,a}$ são conhecidos como parâmetros de Landau e são calculados em termos de $F^{s,a}$ através da relação de ortogonalidade dos polinômios de Legendre [128]. Para aplicações práticas, geralmente consideramos apenas os dois primeiros termos desta série, pois os termos com $l \geq 2$ são difíceis de serem obtidos experimentalmente.

O grande trunfo da teoria de Landau dos líquidos de Fermi está em justamente parametrizar a interação entre as quasipartículas em termos de um número pequeno de parâmetros. São estes parâmetros de Landau que descrevem a polarização do meio devido à interação entre as quasipartículas, portanto descrevendo a renormalização da teoria livre original. Na Tab. (4.1), listamos como estes parâmetros de Landau relacionam-se com as quantidades renormalizadas em um líquido de Fermi.

Deste modo, a teoria de Landau é uma teoria fenomenológica que introduz um parâmetro, m^* , para o espectro de excitação de uma partícula, e um conjunto de parâmetros, $F^{s,a}$, para a interação entre duas quasipartículas. Estes parâmetros podem ser obtidos através de experimentos ou através de cálculos em modelos microscópicos [85, 126, 127, 132].

Para finalizar, gostaríamos de estudar o regime de validade do conceito de quasipartícula. A questão fundamental é saber se há um regime no qual essas quasipartículas fornecem uma descrição útil do sistema ou se elas decaem tão rapidamente para estados mais complicados que são de pouco uso prático. O que faremos aqui é dar um argumento heurístico retirado da Ref. [126]. Um cálculo mais detalhado pode ser encontrado, por exemplo, na Ref. [85].

O processo que buscamos descrever é o decaimento de uma quasipartícula em outras duas quasipartículas e mais um quasiburaco, como mostrado na Fig. (4.1). Este processo pode ser descrito na forma $\alpha \rightarrow \beta + \gamma + \delta$, o que é

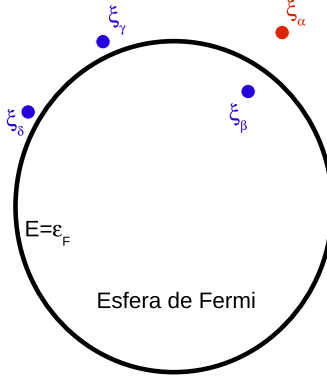


Figura 4.1: Quasipartícula de energia ξ_α decaindo em outras duas quasipartículas de energias ξ_γ e ξ_δ mais um quasiburaco de energia ξ_β . Todas as energias são medidas com respeito à energia de Fermi ε_F .

equivalente a $\alpha + \beta \rightarrow \gamma + \delta$, uma vez que criar um buraco no estado $\bar{\beta}$ é o mesmo que destruir uma partícula no estado β . A taxa de ocorrência deste processo pode ser obtida pela regra de ouro de Fermi [78]

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi \sum_{\beta,\gamma,\delta} \frac{1}{2} |\langle \gamma\delta | V | \alpha\beta \rangle|^2 \delta(\xi_\alpha + \xi_\beta - \xi_\gamma - \xi_\delta), \quad (4.8)$$

onde $\langle \gamma\delta | V | \alpha\beta \rangle$ descreve a amplitude do processo mostrado na Fig. (4.1) e a função delta impõe a conservação de energia $\xi_\alpha = |\xi_\beta| + \xi_\gamma + \xi_\delta$. Como as energias são medidas com respeito ao nível de Fermi, temos que ξ_α, ξ_δ e $\xi_\gamma > 0$ e que $\xi_\beta < 0$, donde vemos que nenhuma das três energias $|\xi_\beta|, \xi_\gamma$ e ξ_δ pode ser maior que ξ_α . Sendo $\rho^*(\xi)$ a densidade de estados das quasipartículas e definindo os valores máximos de $\rho^*(\xi)$ e $\langle \gamma\delta | V | \alpha\beta \rangle$ para $0 < |\xi_\beta|, \xi_\gamma, \xi_\delta < \xi_\alpha$ como ρ_{max}^* e V_{max} , obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \pi \int_0^\infty d\xi_\gamma \int_0^\infty d\xi_\delta \int_0^{-\infty} d\xi_\beta \rho^*(\xi_\gamma) \rho^*(\xi_\delta) \rho^*(\xi_\beta) |\langle \gamma\delta | V | \alpha\beta \rangle|^2 \delta(\xi_\alpha + \xi_\beta - \xi_\gamma - \xi_\delta), \\ &= \pi \int_0^{\xi_\alpha} d\xi_\gamma \int_0^{\xi_\alpha} d\xi_\delta \rho^*(\xi_\gamma) \rho^*(\xi_\delta) \rho^*(\xi_\gamma + \xi_\delta - \xi_\alpha) |\langle \gamma\delta | V | \alpha\beta \rangle|^2, \\ &\leq \pi V_{max}^2 (\rho_{max}^*)^3 \xi_\alpha^2. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Deste modo, independentemente do valor da amplitude de espalhamento e da densidade de estados e considerando que ambos permaneçam finitos, temos que a taxa de decaimento da quasipartícula τ^{-1} será sempre limitada por uma constante multiplicada pelo quadrado de sua energia. O mesmo argumento pode ser aplicado a um quasiburaco, de onde concluímos que o tempo de vida τ de uma excitação em um líquido de Fermi aumenta ao nos aproximarmos da superfície de Fermi. Assim, um sistema fermiônico fortemente interagente sempre possuirá uma região suficientemente próxima da superfície de Fermi, onde as quasipartículas possuem uma vida média longa e são os graus de liberdade apropriados para tratarmos o sistema.

Os efeitos de temperatura também podem ser incluídos de modo análogo [85], e uma expressão mais geral para a taxa de decaimento das quasipartículas é dada por

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon, T)} = C \left[\pi^2 (k_B T)^2 + (\varepsilon - \varepsilon_F)^2 \right], \quad (4.10)$$

onde C é uma quantidade que depende do valor das interações e do sistema considerado.

4.1.2 Exemplo: Cenário de Brinkman-Rice para a transição de Mott

Como comentamos acima, é necessária uma teoria microscópica para que se possam calcular os parâmetros de Landau em termos dos parâmetros do modelo original. Um exemplo de tal cálculo é a solução do modelo de

Hubbard limpo (Eq. (2.62)) dentro do cenário de Brinkman-Rice para a transição metal-isolante de Mott, seção (3.2.1). Nessa abordagem, a massa efetiva dos elétrons é $m^* = m/Z_0$, onde Z_0 é o peso de quasipartícula e $Z_0 = 1 - u^2$, com $u = U/U_c$, Eq. (3.33). O valor crítico de interação U_c (Eq. (3.30)), para o qual a transição metal-isolante de Mott [30] ocorre, é caracterizado pela divergência da massa efetiva, indicando que as quasipartículas se localizam, transformando-se em momentos magnéticos localizados. Calculamos várias funções respostas do sistema correlacionado dentro deste cenário, como por exemplo a susceptibilidade magnética, Eq. (3.25)

$$\chi^{-1} = \frac{1}{\mu_B^2 \rho^*(\varepsilon_F)} \left[1 - \frac{\rho(\varepsilon_F) U_c}{2} \left[1 - \frac{1}{(1+u)^2} \right] \right], \quad (4.11)$$

o coeficiente de Sommerfeld do calor específico, Eq. (3.26)

$$\gamma = \frac{k_B^2 \pi^2}{3} \rho^*(\varepsilon_F), \quad (4.12)$$

e a compressibilidade

$$\kappa^{-1} = \frac{n^2}{\rho^*(\varepsilon_F)} \left(1 + \frac{U_c \rho(\varepsilon_F)}{2} \left[\frac{1}{(1-u)^2} - 1 \right] \right), \quad (4.13)$$

onde a densidade de estados efetiva no nível de Fermi é

$$\rho^*(\varepsilon_F) = \frac{\rho(\varepsilon_F)}{1 - u^2}. \quad (4.14)$$

Agora, é apenas uma questão de compararmos as Eqs. (4.11)-(4.14) com a Tab. (4.1) para obtermos uma forma microscópica para os parâmetros de Landau

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{Z_0} = \frac{1}{1 - u^2}, \quad (4.15)$$

$$F_0^a = -p \left(1 - \frac{1}{(1+u)^2} \right), \quad (4.16)$$

$$F_0^s = p \left(\frac{1}{(1-u)^2} - 1 \right), \quad (4.17)$$

onde definimos

$$p = \frac{U_c \rho(\varepsilon_F)}{2}. \quad (4.18)$$

Uma aplicação interessante deste formalismo é discutida na Ref. [103], onde o autor estuda as propriedades estáticas do estado normal do He³ líquido nas proximidades de seu ponto de solidificação e obtém um ótimo acordo quantitativo com os dados experimentais.

4.2 Condutividade em sistemas metálicos

A condutividade σ é uma das propriedades mais básicas de um sólido, pois relaciona a corrente \mathbf{j} que é nele induzida devido à aplicação de um campo elétrico externo \mathbf{E} , $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$. A ideia básica para entendermos a condutividade eletrônica está contida no modelo de Drude [3] que, mesmo desenvolvido antes do advento da teoria quântica, lança mão de muitos dos conceitos presentes nas teorias modernas de transporte. Drude utilizou, por exemplo, o conceito de livre caminho médio para o elétron, que é a distância média l percorrida entre espalhamentos. O tempo característico entre esses eventos de espalhamento é chamado de tempo de espalhamento do transporte τ_{tr} , que se relaciona da seguinte forma com a condutividade

$$\sigma = \frac{ne^2}{m} \tau_{tr}, \quad (4.19)$$

onde n é a densidade eletrônica, m é a massa do elétron e $-e$ é a carga do elétron. Para um gás de Fermi, cuja velocidade característica dos elétrons é a velocidade de Fermi v_F , podemos relacionar l e τ_{tr} simplesmente como

$$l = v_F \tau_{tr}. \quad (4.20)$$

Um bom condutor é aquele no qual esse livre caminho médio é muito maior que o comprimento de onda dos elétrons no nível de Fermi $\lambda_F = 2\pi\hbar/k_F$, de tal modo que, entre as colisões, os elétrons se movam como partículas livres e possam ser descritos por uma dinâmica semiclassica. Para metais puros, o livre caminho médio é pelo menos da ordem de 10^3 \AA , ou seja, cerca de mil vezes maior do que a distância média entre os íons [3]. Deste modo, se dividirmos l por λ_F , que por sua vez é da ordem do espaçamento da rede, obtemos $l/\lambda_F \gtrsim 10^3$, o que está de acordo com a nossa definição acima de bom condutor.

4.2.1 Formalismo de Kubo

Para que a descrição do transporte fique completa, precisamos de uma teoria microscópica para o cálculo da condutividade, ou equivalentemente, do tempo de espalhamento do transporte. Dentro de uma descrição quântica, \mathbf{j} é um operador e, como estamos interessados no problema de férmions em uma rede, calcularemos esse operador corrente para o modelo de Hubbard em uma rede cúbica d dimensional. Seguindo a mesma notação da Eq. (2.62), a componente x do operador corrente é dada por [60]

$$j_x = -it \sum_{\sigma} c_{j,\sigma}^{\dagger} (c_{j+\hat{x},\sigma} - c_{j,\sigma}), \quad (4.21)$$

ou no espaço de Fourier

$$j_x(\mathbf{q}) = -2t \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sin[k_x] c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}. \quad (4.22)$$

No limite não interagente, vemos que o operador corrente comuta com H_0 e é uma constante do movimento, implicando que a corrente elétrica não decai. O decaimento da corrente elétrica, gerando uma resistividade finita no sistema, possui duas fontes principais:

- Desordem - que causa uma quebra da invariância translacional do cristal;
- Interações - entre elétrons e fônons e entre os próprios elétrons, que faz com que os antigos autoestados de momento agora possuam uma meia-vida finita τ .

Voltando ao cálculo da condutividade, sua expressão pode ser obtida pela fórmula de Kubo para a condutividade elétrica [60]

$$\sigma(\mathbf{q}, \omega) = \frac{i}{\omega} \left[\Pi_{\text{ret}}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{ne^2}{m} \right]. \quad (4.23)$$

A função de correlação $\Pi(\mathbf{q}, \omega_n)$ é dada por

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega_n) = -\frac{1}{dL^d} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_{\tau} \mathbf{j}(\tau) \cdot \mathbf{j}(0) \rangle, \quad (4.24)$$

onde L é o comprimento linear do sistema, $\beta = 1/T$, $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$ são as frequências de Matsubara, τ é o tempo imaginário, $\langle \dots \rangle$ denota a média termodinâmica e T_{τ} é operador de ordenamento temporal no tempo imaginário, sempre colocando os menores tempos τ à direita. Utilizamos também a simetria cúbica envolvida no problema para anularmos os elementos não diagonais do tensor de condutividade, e também para fazermos todos os elementos diagonais iguais a σ . A função de correlação retardada $\Pi_{\text{ret}}(\mathbf{q}, \omega)$ é obtida ao fazermos a continuação analítica $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$ na Eq. (4.24)

A fórmula de Kubo é derivada dentro da teoria de resposta linear [59, 60] e é, portanto, limitada a baixos valores do campo externo aplicado. Vemos que ela possui dois termos, sendo que o primeiro é conhecido como termo paramagnético e o segundo como termo diamagnético. O passo mais complicado neste cálculo é encontrarmos o valor médio presente na Eq. (4.24). Pela forma do operador corrente na Eq. (4.22), vemos que temos que avaliar termos do tipo $\langle T_{\tau} c_3 c_4 c_1^{\dagger} c_2^{\dagger} \rangle$, que são conhecidos como função de Green de dois corpos [59, 60, 127, 132]. O cálculo deste termo pode ser feito, por exemplo, através da expansão deste valor médio em uma série perturbativa. Exceto pelo termo de ordem zero, esta expansão contém termos que não podem ser reduzidos a produtos de função de Green de um corpo. Tais termos são conhecidos como correções de vértice.

4.2.2 Condutividade dentro da Teoria Dinâmica de Campo Médio

Como vimos na seção (2.2.2), a TDCM é uma teoria que possui uma autoenergia eletrônica local. Esse fato simplifica consideravelmente o cálculo da condutividade, pois, para uma condutividade dependente apenas da frequência $\sigma(\mathbf{q} = 0, \omega)$, todas as correções de vértice anulam-se e $\sigma(\mathbf{q} = 0, \omega)$ passa a depender apenas da função de Green de um corpo [20]. De maneira geral, a contribuição paramagnética para a condutividade é dada por (considerando todos o pré-fatores dimensionais)

$$\text{Re}\sigma(\omega + i0^+) = \frac{2\pi\sigma_0 D^2}{d} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon N(\epsilon) \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu \frac{f(\nu) - f(\nu + \omega)}{\omega} A(\epsilon, \nu) A(\epsilon, \nu + \omega), \quad (4.25)$$

onde $f(\nu)$ é a distribuição de Fermi-Dirac, D é a semilargura de banda, $\sigma_0 = e^2/2\hbar a$, a é o parâmetro de rede, $N(\epsilon)$ é densidade de estados da rede não interagente e $A(\epsilon, \nu)$ é a função espectral que é dada por

$$A(\epsilon, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\epsilon, \omega + i0^+) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\frac{1}{\omega + \mu - \epsilon - \Sigma(\omega) + i0^+} \right), \quad (4.26)$$

onde G é a função de Green local de um corpo, obtida ao calcularmos a autoenergia local $\Sigma(\omega)$.

Temos que salientar que a contribuição diamagnética da condutividade é a anulada pela divergência com $1/\omega$ da função de correlação corrente-corrente [20]. Podemos simplificar a Eq. (4.25) ainda mais um pouco ao tomarmos o limite $\omega \rightarrow 0$ para obtermos a condutividade DC

$$\text{Re}\sigma(\omega = 0) = \sigma_{\text{dc}} = \frac{2\pi\sigma_0 D^2}{d} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon N(\epsilon) \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu \left(-\frac{\partial f(\nu)}{\partial \nu} \right) A^2(\epsilon, \nu). \quad (4.27)$$

Como um exemplo da aplicação deste formalismo, estudaremos as propriedades de transporte de sistemas fortemente correlacionados a baixas temperaturas [133]. Para temperaturas e frequências menores do que uma temperatura de coerência T^* , a autoenergia dentro de TDCM assume uma forma do tipo líquido de Fermi local [66, 67]

$$\Sigma(\omega) = \omega \left(1 - \frac{1}{Z} \right) - iC \left(\omega^2 + (\pi k_B T)^2 \right). \quad (4.28)$$

Aqui, Z é o peso de quasipartícula que, assim como aquele definido na Eq. (4.15), renormaliza a massa das quasipartículas². A parte imaginária da autoenergia está associada à taxa de decaimento das quasipartículas, por isso possui a mesma forma da Eq. (4.10), onde C é uma constante positiva que depende da estrutura de banda considerada para o cálculo e das interações. A temperatura de coerência é $T^* = ZT_F$, onde T_F é a temperatura de Fermi do sistema não interagente.

Com esta autoenergia em mãos, podemos calcular a função espectral $A(\epsilon, \omega)$. Vamos limitar o nosso estudo a baixas energias e temperaturas de tal forma que consideraremos que a parte imaginária da autoenergia $\Delta = -\text{Im}[\Sigma]$ seja pequena $\Delta \rightarrow 0$. Esta quantidade Δ codifica o espalhamento inelástico elétron-elétron presente no problema, e tomar $\Delta \rightarrow 0$ significa que calculamos o termo dominante na condutividade devido a esse espalhamento inelástico. Da Eq. (4.26) temos que

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} A(\epsilon, \omega) = \frac{1}{\pi} \lim_{\Delta \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta}{\Omega^2 + \Delta^2} \right) = \delta(\Omega), \quad (4.29)$$

onde $\Omega(\omega) = \omega + \mu - \epsilon - \text{Re}[\Sigma(\omega)]$. Esta resposta é razoável, pois se $\Delta = 0$, recuperamos a forma não interagente da função espectral, uma vez que tudo que autoenergia faz agora é renormalizar os níveis de energia. Isso ainda não é suficiente, pois precisamos avaliar $A^2(\epsilon, \omega)$, que, pela nossa discussão anterior, parece ir com o quadrado da função delta. Certamente, $A^2(\epsilon, \omega)$ deve divergir para $\Delta \rightarrow 0$, uma vez que precisamos recuperar o resultado conhecido de que, a $T = 0$, um metal perfeito possui condutividade infinita. O que precisamos é de um método para tratarmos

²Para uma autoenergia $\Sigma(\omega)$ independente do momento k , temos, de maneira geral, que

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{Z} = 1 - \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re}\Sigma(\omega + i0^+) \Big|_{\omega=0}.$$

essa divergência [60], o que nos é dado ao considerarmos as seguintes integrais

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Omega}{\pi} \frac{\Delta}{\Omega^2 + \Delta^2} = 1, \quad (4.30)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Omega}{\pi} \left(\frac{\Delta}{\Omega^2 + \Delta^2} \right)^2 = \frac{1}{2\Delta}. \quad (4.31)$$

A primeira integral (Eq. (4.30)) possui o limite correto, dado que ela reproduz a Eq. (4.29). Já a segunda integral (Eq. (4.31)) sugere a seguinte equivalência

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} A^2(\epsilon, \omega) = \frac{1}{\pi^2} \lim_{\Delta \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta}{\Omega^2 + \Delta^2} \right)^2 = \frac{\delta(\Omega)}{2\pi\Delta}, \quad (4.32)$$

que nos fornece o comportamento esperado para $\Delta \rightarrow 0$.

Utilizando a Eq. (4.32), realizamos a troca $A^2(\epsilon, \omega) \rightarrow \delta(\Omega)/2\pi\Delta$ na Eq. (4.35), o que nos dá

$$\sigma_{\text{dc}}(T) = \frac{2\pi\sigma_0 D^2}{d} \frac{1}{2\pi C} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega N\left(\frac{\omega}{Z}\right) \left(-\frac{\partial f(\omega)}{\partial \omega} \right) \frac{1}{\omega^2 + (\pi k_B T)^2}. \quad (4.33)$$

Fazendo a troca de variáveis $x = \omega/k_B T$ e calculando a densidade de estados a $T = 0$, uma vez que correções em T gerariam termos de ordem superior, chegamos a

$$\sigma_{\text{dc}}(T) = \frac{\sigma_0 D^2}{d} \frac{I_0 N(\epsilon_F)}{C} \frac{1}{k_B^2 T^2}, \quad (4.34)$$

onde $I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^x / (x^2 + \pi^2) (1 + e^x)^2 \simeq 1/12$ e $N(\epsilon_F)$ é a densidade de estados da rede não interagente, calculada no nível de Fermi. Como a condutividade diverge em $T = 0$, pode ser mais conveniente trabalharmos com sua inversa, a resistividade $\rho(T) = 1/\sigma_{\text{dc}}(T)$

$$\rho(T) = \frac{Cd}{\sigma_0 D^2 I_0 N(\epsilon_F)} k_B^2 T^2. \quad (4.35)$$

Este comportamento do tipo líquido de Fermi (em que $\rho(T) = \rho_0 + AT^2$, para $T \rightarrow 0$) é característico de metais cujo mecanismo de espalhamento dominante é a interação elétron-elétron e é observado em metais de transição [119], férmions pesados [90] e vários condutores orgânicos [98, 102, 134].

4.3 Impurezas em sistemas fortemente correlacionados: solução analítica

Investigamos agora os efeitos de impurezas rígidas e não magnéticas colocadas em um metal paramagnético fortemente correlacionado. O metal é descrito pelo modelo de Hubbard dentro da teoria de campo médio de Kotliar-Ruckenstein [65], ou, equivalentemente, Brinkman-Rice [35]. Não só resolvemos as equações de campo médio associadas numericamente, como também encontramos uma solução analítica no limite de espalhamento fraco (aproximação de Born). Deste modo, podemos monitorar o comportamento do sistema ao sairmos do bem conhecido regime não interagente em direção ao não tão bem entendido regime fortemente correlacionado, nas vizinhanças da transição metal-isolante de Mott.

4.3.1 Definição do problema

Consideramos o modelo de Hubbard desordenado em uma rede cúbica d dimensional, Eq. (2.70). Novamente, todas as energias serão expressas em termos da semilargura de banda (energia de Fermi) D e aproximamo-nos da transição metal-isolante de Mott aumentando a interação local U com a rede em semipreenchimento (potencial químico $\mu = U/2$).

Para resolvermos este modelo, aplicamos a aproximação de campo médio de bósons escravos diretamente ao problema da rede. Como discutido na seção (2.2.6), esta teoria é matematicamente equivalente a implementarmos a

TEDCM, utilizando-se a teoria de campo médio de bósons escravos para resolvermos os problemas de uma impureza associados, Secs. (2.2.3) e (2.2.5). A energia livre do nosso sistema é, então, dada pela Eq. (2.121)

$$F = -2T \sum_{\omega_n} Tr \ln \left[-i\omega_n \mathbf{1} + \mathbf{Z}\mathbf{v} + \mathbf{Z}^{1/2} \mathbf{H}_0 \mathbf{Z}^{1/2} \right] + \sum_i [Ud_i^2 - (1 - e_i^2 + d_i^2) (Z_i v_i - \varepsilon_i + \mu)], \quad (4.36)$$

onde e_i e d_i são as amplitudes dos bósons escravos correspondendo respectivamente a sítio vazio e ocupação dupla, T é a temperatura e ω_n são as frequências de Matsubara. As matrizes \mathbf{Z} e \mathbf{v} são diagonais na base dos sítios: $[\mathbf{Z}] = Z_i \delta_{ij}$, $[\mathbf{v}]_{ij} = v_i \delta_{ij}$ e \mathbf{H}_0 é a Hamiltoniana da rede limpa e não interagente. O peso de quasipartícula é dado pela Eq. (2.100)

$$Z_i = \frac{2(e_i + d_i)^2 (1 - e_i^2 - d_i^2)}{1 - (e_i^2 - d_i^2)^2}, \quad (4.37)$$

enquanto o potencial renormalizado de desordem em cada sítio é, pelas Eqs. (2.110) e (2.112)

$$v_i = \frac{1}{Z_i} \left(\varepsilon_i - \mu + \frac{Ud_i}{\left(\frac{\partial Z_i}{\partial e_i} d_i + \frac{\partial Z_i}{\partial d_i} e_i \right)} \frac{\partial Z_i}{\partial e_i} \right). \quad (4.38)$$

O potencial renormalizado de desordem dá o potencial efetivo que as quasipartículas “veem” no nível de Fermi. Já o peso de quasipartícula define a escala de energia Δ_i^* na qual as quasipartículas são bem definidas: $\Delta_i^* = Z_i D$.

Extremizando a energia livre na Eq. (4.36) com relação às amplitudes de bósons escravos, chegamos às equações de campo médio de bósons escravos, que são dadas pelas Eqs. (2.122)-(2.124)

$$T \sum_n \tilde{G}_{ii}(i\omega_n) = \frac{1}{2} (1 - e_i^2 + d_i^2), \quad (4.39)$$

$$\left(\frac{\partial Z_i}{\partial e_i} + \frac{\partial Z_i}{\partial d_i} \right) T \sum_{n,k} \tilde{G}_{ik}(i\omega_n) h_{ki} = - \left(\frac{U}{2} (e_i + d_i) + (\tilde{\varepsilon}_i - \varepsilon_i) (e_i - d_i) \right), \quad (4.40)$$

onde $h_{ki} = [\mathbf{H}_0]_{ki}$ são os elementos da Hamiltoniana da rede limpa e não interagente calculados na base dos sítios,

$$\tilde{G}_{ij}(i\omega_n) = \langle i | \left[i\omega_n - \tilde{\varepsilon} - \sqrt{\mathbf{Z}} \mathbf{H}_0 \sqrt{\mathbf{Z}} \right]^{-1} | j \rangle \quad (4.41)$$

é a função de Green das quasipartículas e lembramos que

$$\tilde{\varepsilon}_i = Z_i v_i, \quad (4.42)$$

é a energia renormalizada do sítio i , que é mais conveniente para manipularmos durante os cálculos do que a quantidade física, que é v_i .

Consideraremos primeiro um potencial de desordem fraco ($|\varepsilon_i| \ll D$) e expandiremos as equações de campo médio, Eqs. (4.39) e (4.40), ao redor da solução uniforme. Esta expansão é simplificada se introduzirmos uma nova base no problema

$$x_i = e_i + d_i, \quad (4.43)$$

$$y_i = e_i - d_i, \quad (4.44)$$

que, no limite uniforme, reduz-se a $x_0 = 2d_0 = \sqrt{1-u}$ e $y_0 = 0$ com

$$u = \frac{U}{U_c}, \quad (4.45)$$

sendo U_c o valor crítico de interação para o qual a transição metal-isolante de Mott ocorre, Eq. (3.30).

Em termos destas novas variáveis, as Eqs. (4.37) e (4.38) ficam

$$Z_i = \frac{x_i^2 (2 - x_i^2 - y_i^2)}{1 - x_i^2 y_i^2}, \quad (4.46)$$

e

$$\tilde{\varepsilon}_i - \varepsilon_i = -\frac{U y_i (1 + x_i^2) (2 - x_i^2 - y_i^2)}{4 x_i (1 - x_i^2 y_i^2)}. \quad (4.47)$$

Já as equações de campo médio, Eqs. (4.39) e (4.40), são reescritas como

$$T \sum_n \tilde{G}_{ii}(\omega_n) = w_1(x_i, y_i), \quad (4.48)$$

$$T \sum_{n,k} \sqrt{Z_i} \tilde{G}_{ik}(\omega_n) \sqrt{Z_k} h_{ki} = w_2(x_i, y_i), \quad (4.49)$$

onde

$$w_1(x_i, y_i) = \frac{1}{2} (1 - x_i y_i), \quad (4.50)$$

e

$$w_2(x_i, y_i) = -\frac{U (2 - x_i^2 - y_i^2) (x_i^2 - y_i^2)}{16 (1 - x_i^2)}. \quad (4.51)$$

A linearização dessas equações de campo médio é mostrada no Apêndice (D).

4.3.2 Quantidades físicas

Com a expansão desenvolvida no Apêndice (D), temos todas as ferramentas para calcularmos as quantidades físicas de interesse. Utilizando as Eqs. (4.42), (D.4), (D.6), (D.13) e (D.14) e lembrando que $Z_i = Z_0 + \mathcal{O}(\varepsilon_i^2)$, podemos encontrar o potencial renormalizado de desordem v_i :

$$v_i = \frac{1}{1 - u^2} \left(\varepsilon_i - [\mathbf{M}^{-1}(u)]_{ij} \varepsilon_j \right). \quad (4.52)$$

A matriz $\mathbf{M}(u)$ é a transformada de Fourier discreta de

$$M_{\mathbf{q}}(u) = 1 - 2g(u) [U_c \Pi_{\mathbf{q}}^{(0)}]^{-1}, \quad (4.53)$$

onde $\Pi_{\mathbf{q}}^{(0)}$ é a dada pela Eq. (E.8) e

$$g(u) = \frac{(1+u)(1-u)^2}{u[2+u(1-u)]}. \quad (4.54)$$

Na presença deste potencial externo das impurezas, as cargas remanejam-se para blindar os efeitos deste potencial, causando desvios na densidade eletrônica local $n_i = 1 + \delta n_i$. Tais desvios na densidade eletrônica são dados por $\delta n_i = -e_i^2 + d_i^2 \simeq -(1-u)^{1/2} Y_{ij} \varepsilon_j$ e, através das Eqs. (D.13) e (D.14), obtemos

$$\delta n_i = -\frac{4g(u)}{U_c(1-u^2)} [\mathbf{M}^{-1}(u)]_{ij} \varepsilon_j, \quad (4.55)$$

com a mesma estrutura espacial que v_i na Eq. (4.52).

Ressaltamos mais uma vez que as expressões em primeira ordem na desordem para v_i , Eq. (4.52) e δn_i , Eq. (4.55), valem para uma configuração espacial arbitrária de impurezas. A nossa única hipótese ao derivá-las foi assumir que a desordem é fraca, ou seja, $|\varepsilon_i| \ll D$.

Podemos também encontrar a matriz T , que determina as propriedades de espalhamento do sistema. A matriz T é definida da seguinte forma [117]

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}^{(0)} + \mathbf{G}^{(0)} \mathbf{T} \mathbf{G}^{(0)}, \quad (4.56)$$

onde \mathbf{G} é a função de Green total do sistema e $\mathbf{G}^{(0)}$ é a função de Green da rede uniforme interagente e é dada por

$$\mathbf{G}^{(0)} = Z_0 \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} = \frac{Z_0}{i\omega_n \mathbf{1} - Z_0 \mathbf{H}_0}. \quad (4.57)$$

Acima, vimos que $\delta Z_i \sim \mathcal{O}(\varepsilon_i^2)$ e que $\tilde{\varepsilon}_i \sim \mathcal{O}(\varepsilon_i)$. Além disso, utilizando as Eqs. (D.9) e (4.57), podemos escrever a expansão de \mathbf{G} até primeira ordem na energia das impurezas como

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}^{(0)} + \mathbf{G}^{(0)} \frac{(\varepsilon + \delta\tilde{\varepsilon}^{(1)})}{Z_0} \mathbf{G}^{(0)}. \quad (4.58)$$

Comparando agora as Eqs. (4.56) e (4.58), concluímos que

$$\mathbf{T} = \frac{(\varepsilon + \delta\tilde{\varepsilon}^{(1)})}{Z_0} = \mathbf{v}, \quad (4.59)$$

resultado que é válido até primeira ordem nas energias das impurezas e consistente com nossa definição de v como potencial renormalizado de desordem.

Em segunda ordem, podemos determinar a correção para o peso de quasipartícula δZ_i , considerando que $\varepsilon_i = \delta_{io}\varepsilon_o$. Das Eqs. (D.13), (D.14), (D.17) e (D.25), vem que

$$\begin{aligned} \delta Z_i &= 2u^2(1-u) \left\{ [\mathbf{M}_1^{-1}(u)]_{ij} \left(4 [\mathbf{M}_2(u)]_{jk} [\mathbf{L}^{-2}(u)]_{kl} [\mathbf{\Pi}^{(0)2}]_{lo} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - (1+u)(1-u)^2 \Pi_{jkl}^{(4)} [\mathbf{L}^{-1}(u)]_{ko} [\mathbf{L}^{-1}(u)]_{lo} \right) - 2(1-u) [\mathbf{L}^{-2}(u)]_{ij} [\mathbf{\Pi}^{(0)2}]_{jo} \right\} \varepsilon_o^2. \end{aligned} \quad (4.60)$$

com uma estrutura mais complexa quando comparada às Eqs. (4.52) e (4.55).

4.3.2.1 Limites de fraco e forte acoplamento

Neste ponto, particularizaremos toda a discussão para uma única impureza localizada no sítio o , e assim $\varepsilon_i = \delta_{io}\varepsilon_o$. Para verificarmos e ilustrarmos os resultados analíticos, resolvemos as Eqs. (4.39) e (4.40) numericamente para $d = 1$ e $d = 2$. Estas soluções numéricas são apresentadas nas Figs. (4.2)-(4.9). Embora os nossos resultados analíticos sejam válidos no limite de desordem baixa ($\varepsilon_o \ll D$), eles capturam as tendências qualitativas do sistema mesmo quando o espalhamento não é fraco, isso é mostrado, por exemplo, nas Figs. (4.5) e (4.8).

Para adquirirmos uma visão mais clara dos resultados analíticos para v_i , n_i e Z_i , analisaremos suas expressões nos limites de interação fraca e forte, onde podemos expandir todas as quantidades em potências de u ou $(1-u)$, respectivamente, obtendo expressões simplificadas. Em particular, a função $g(u)$ definida em (4.54) reduz-se a

$$g(u) \simeq \begin{cases} 1/2u, & u \rightarrow 0; \\ (1-u)^2, & u \rightarrow 1. \end{cases} \quad (4.61)$$

Já as matrizes auxiliares $\mathbf{M}(u)$, $\mathbf{M}_1(u)$, $\mathbf{M}_2(u)$ e $\mathbf{L}(u)$ (Eqs. (4.53), (D.26), (D.27) e (D.14), respectivamente) assumem as seguintes formas

$\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{0}$

$$\mathbf{M}(u) \simeq U\mathbf{\Pi}^{(0)}; \quad (4.62)$$

$$\mathbf{M}_1(u) \simeq \frac{U_c}{16}\mathbf{1}, \quad (4.63)$$

$$\mathbf{M}_2(u) \simeq \frac{U_c}{8}\mathbf{1}, \quad (4.64)$$

$$\mathbf{L}(u) \simeq -\mathbf{1} + u(\mathbf{1} + U_c\mathbf{\Pi}^{(0)}). \quad (4.65)$$

$\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{1}$

$$\mathbf{M}(u) \simeq \mathbf{1} - \frac{2}{U_c}(1-u^2)[\mathbf{\Pi}^{(0)}]^{-1}; \quad (4.66)$$

$$\mathbf{M}_2(u) \simeq \frac{U_c}{8}\mathbf{1} + \mathcal{O}(1-u); \quad (4.67)$$

$$\mathbf{L}(u) \simeq U\mathbf{\Pi}^c + \mathcal{O}(1-u). \quad (4.68)$$

Mesmo no limite $u \rightarrow 1$, a matriz $\mathbf{M}_1(u)$ não possui uma expressão fechada simples. Neste caso, também tomamos o limite assintótico, considerando que olhamos apenas para sítios suficientemente distantes da impureza. Este procedimento está descrito no Apêndice (E.2).

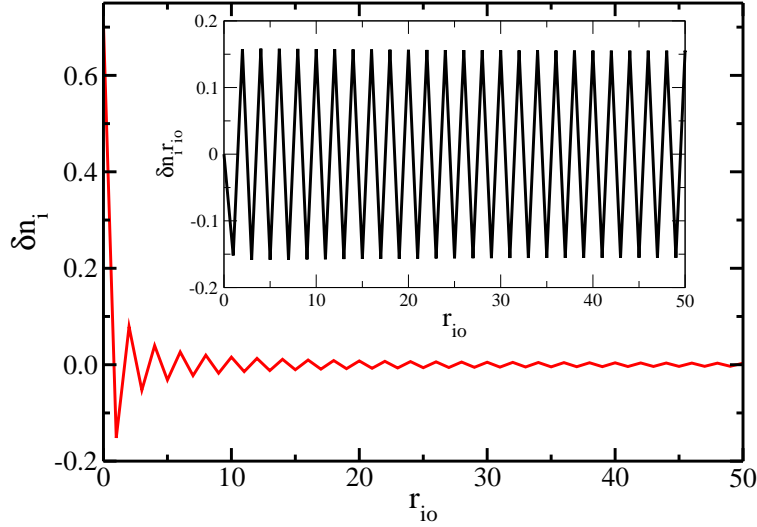


Figura 4.2: Desvios na densidade eletrônica $\delta n_i = n_i - 1$ para o limite não interagente em uma cadeia unidimensional como função da distância r_{io} da impureza, que é medida em unidades do espaçamento de rede a . Mesmo sendo localizada no espaço ($\varepsilon_i = \varepsilon_o \delta_{io}$), esta impureza induz oscilações de longo alcance em δn_i que decaem assintoticamente como uma lei de potência. *Inserção:* reescalamos δn_i por r_{io} , ilustrando que o decaimento assintótico de $\delta n_i^{(0)}$ com r_{io}^d também vale neste caso em que temos uma rede. Para esta estrutura de banda, $k_F = \pi/2$, de tal modo que o período de oscilação espacial no limite assintótico é de dois espaçamentos de rede. Utilizamos aqui $L = 400$, $\varepsilon_o = -D$, $T = 0$, $u = 0$ e condições periódicas de contorno.

- Limite fracamente interagente ($u \rightarrow 0$)

Neste regime, não há renormalização da massa eletrônica de banda, uma vez que $Z_0 \sim 1 + \mathcal{O}(u^2)$, e a nossa solução coincide com a solução Hartree-Fock para o modelo de Hubbard, na qual temos uma autoenergia local e estática que é dada por $\Sigma_i = U n_i^0$, onde $n_i^0 = 1 + 2\Pi_{ij}^{(0)} \varepsilon_j$ é a densidade eletrônica não interagente na presença da impureza. Mesmo que o potencial da impureza seja localizado no espaço, os desvios na densidade eletrônica $\delta n_i^{(0)}$ apresentam oscilações de longo alcance de Friedel, que são codificadas por $\Pi_{ij}^{(0)}$, Fig. (4.2). A forma espacial das oscilações de Friedel depende da superfície de Fermi do sistema [42] e um cálculo analítico em $d > 1$ só é possível para uma superfície de Fermi esférica, onde obtemos que $\delta n^{(0)} \sim \cos(2k_F r) / r^d$, com r sendo a distância até a impureza e k_F o momento de Fermi³. Oscilações de Friedel que decaem lentamente no espaço como uma lei de potência são uma consequência direta do fato de que as excitações em um líquido de Fermi não possuem “gap”.

O potencial renormalizado de desordem é agora dado por $v_i \simeq \varepsilon_i + U\Pi_{ij}^{(0)} \varepsilon_j$, implicando que os elétrons não são espalhados somente pelo potencial local da impureza, como ocorre para $u = 0$, mas também por um potencial de longo alcance gerado pelas oscilações de Friedel, Fig. (4.3). O espalhamento elástico de quasipartículas pelas oscilações de Friedel gera novas correções para a dependência com a temperatura da resistividade que diferem das correções usuais de um líquido de Fermi, Eq. (4.35). Discutiremos mais essas correções na seção (4.4). Vale a pena notar também que, neste limite, a estrutura espacial de v_i e δn_i é estritamente a mesma, como é realçado na inserção da Fig. (4.3).

- Limite fortemente interagente ($u \rightarrow 1$)

Quando nos aproximamos da transição da região crítica, contudo, os desvios na densidade local de elétrons são dados por

$$\delta n_i = -\frac{2(1-u)}{U_c} \left[\varepsilon_i + \frac{2}{U_c} (1-u)^2 [\mathbf{\Pi}^{(0)}]_{ij}^{-1} \varepsilon_j \right], \quad (4.69)$$

³Veja o Apêndice (F), onde fazemos este cálculo em uma e duas dimensões. Expressões exatas para a função polarização $\Pi_{ij}^{(0)}$ de um gás de elétrons livres em $d = 1$, $d = 2$ e $d = 3$ podem ser encontradas na Ref. [135].

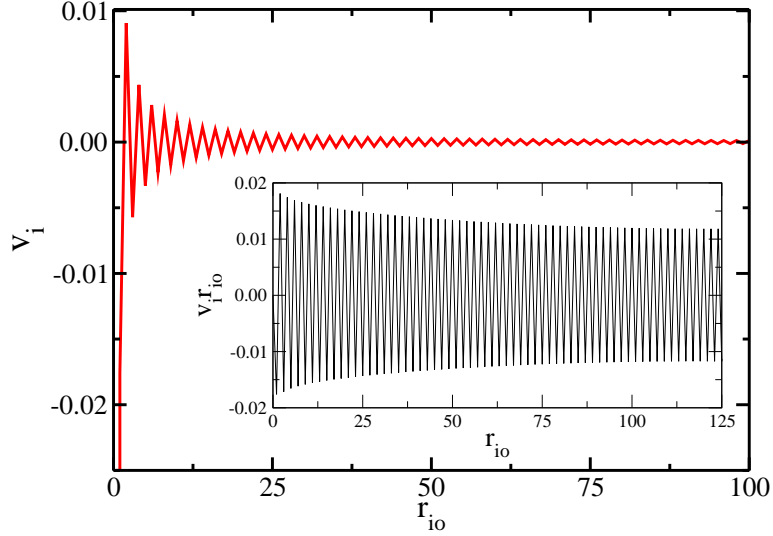


Figura 4.3: Potencial renormalizado de desordem v_i em uma cadeia unidimensional como função da distância r_{io} da impureza no regime de acoplamento fraco. Na presença de interações, v_i passa a ser de longo alcance, embora o potencial da impureza despida seja extremamente localizado no espaço ($v_i^{(0)} = \varepsilon_o \delta_{i,o}$). *Inserção*: reescalamos v_i por r_{io} ilustrando que a parte não local de v_i é de fato gerada pelas oscilações de Friedel da densidade eletrônica. Utilizamos aqui $L = 400$, $\varepsilon_o = -D$, $T = 0$, $u = 0.05$ e condições periódicas de contorno.

mostrando uma supressão das oscilações de Friedel: a parte não local de δn_i é um fator $(1 - u)^2$ menor do que a local. Portanto, a densidade eletrônica é modificada significativamente apenas nas vizinhanças da impureza, implicando em um “comprimento de cura” muito menor, Figs. (4.4), (4.5) e (4.7). Este “comprimento de cura” é o comprimento espacial de que o sistema precisa para se recuperar dos efeitos da impureza. A supressão do decaimento espacial lento de δn_i reflete a tendência fundamental das quasipartículas a localizarem-se, uma vez que o sistema aproxima-se do isolante de Mott.

O potencial renormalizado de desordem fica

$$v_i = -(1 - u) U_c^{-1} [\mathbf{\Pi}^{(0)}]_{ij}^{-1} \varepsilon_j, \quad (4.70)$$

sendo tão não local quanto para u pequeno, exceto por uma redução na amplitude global dos termos, Figs. (4.6) e (4.7). Assim, não nos devemos guiar apenas pelas flutuações na densidade eletrônica, que são “curadas” de maneira extremamente efetiva. Notamos ainda que v_i vai a zero linearmente na transição de Mott, sinalizando uma completa supressão da desordem pelas interações [44], como discutido na seção (3.2.2.1).

Ressaltamos que as oscilações de Friedel possuem, em princípio, um decaimento espacial diferente neste limite, pois temos que calcular a transformada de Fourier não da função de Lindhard $\Pi_{\mathbf{q}}^{(0)}$, mas de sua inversa, Eqs. (4.69) e (4.70). No Apêndice (F) calculamos esta transformada para uma e duas dimensões. Para o caso unidimensional, obtemos uma dependência espacial diferente (Eqs. (F.11) e (F.17)). Já para o caso bidimensional, o decaimento espacial é o mesmo (Eqs. (F.32) e (F.34)). De qualquer forma, a amplitude dessas oscilações é fortemente suprimida pelo fator $(1 - u)$, o que faz com que seu comportamento espacial perca importância.

Para valores intermediários de interação, os desvios no peso de quasipartícula $\delta Z_i = Z_i - Z_0$ também apresentam oscilações do tipo Friedel, ao passo que, próximo da transição de Mott, δZ_i apresenta um decaimento predominantemente exponencial a partir do sítio da impureza, uma vez que todos os outros termos descrevendo as oscilações de longo alcance são de ordem superior em $(1 - u)$, veja Figs. (4.8) e (4.9) e a Eq. (4.71) abaixo (os detalhes deste cálculo estão apresentados no Apêndice (E.2)). O potencial da impureza tira a ocupação do sítio o do semipreenchimento, reduzindo assim a tendência de formação de um momento magnético local, deixando-o mais metálico pelo aumento de Z_i . Na medida em que as interações aumentam, esta “metalização” tende a se espalhar a partir da impureza, criando “bolhas” metálicas (regiões vermelhas da Fig. (4.8)) em um sistema quase localizado. Um resultado de certa forma similar emerge no modelo $t - t' - J$, no qual uma impureza induz uma magnetização alternada em sua vizinhança, cuja extensão espacial também aumenta com as correlações [136, 137]. O comportamento crítico

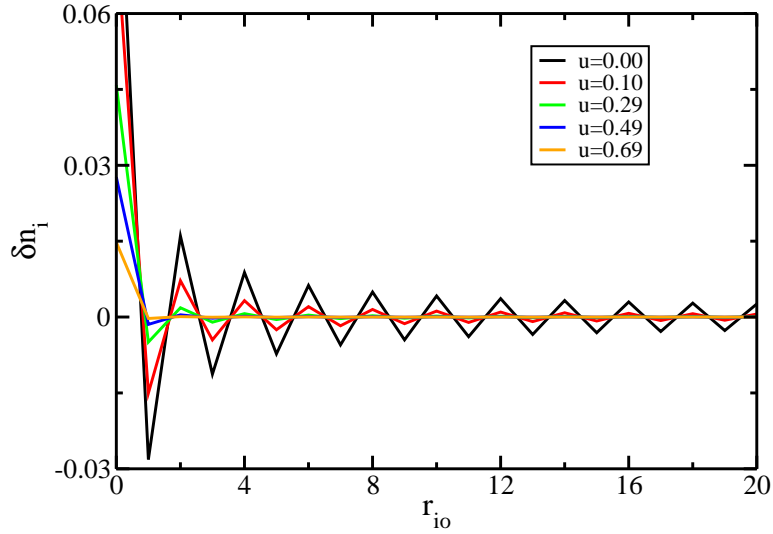


Figura 4.4: Parte não local dos desvios na densidade eletrônica δn_i em uma cadeia unidimensional como função da distância r_{io} da impureza. À medida que aumentamos u , as oscilações de Friedel são suprimidas e a resposta torna-se cada vez mais local. Utilizamos aqui $L = 400$, $\varepsilon_o = -0.1D$, $T = 0$ e condições periódicas de contorno.

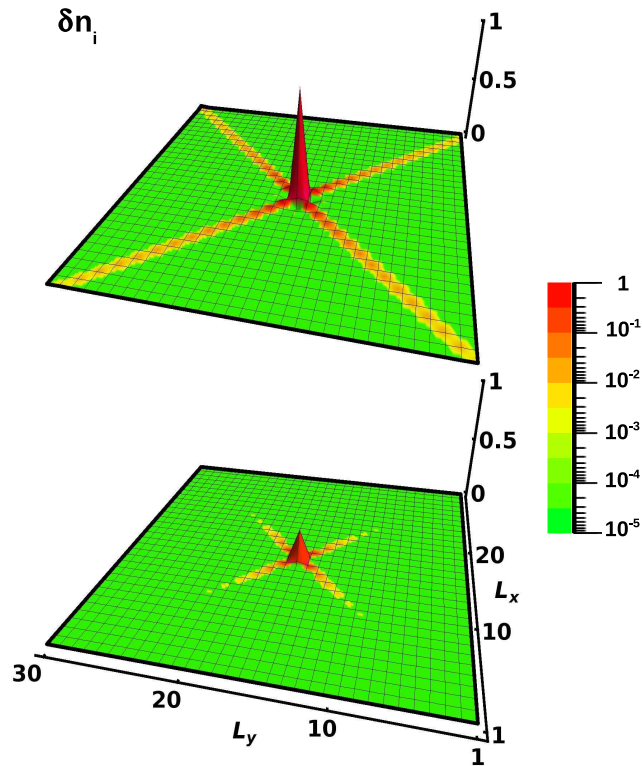


Figura 4.5: Desvios na densidade eletrônica δn_i exibindo oscilações de Friedel características. De cima para baixo, temos $u = 0$ e $u = 0.84$. As oscilações de Friedel aparecem aqui como cruzes devido à anisotropia da superfície de Fermi [42]. Ao entrarmos no regime fortemente correlacionado, as oscilações de Friedel são suprimidas, implicando em um “comprimento de cura” menor, ou seja, o sistema precisa de uma distância menor para recuperar-se dos efeitos desta impureza. Utilizamos aqui uma rede quadrada com $L = 30$, $\varepsilon_o = -D$, $T = 0$ e condições periódicas de contorno. A escala de cor codifica apenas os valores positivos de δn_i . Mostrado pela primeira vez na Ref. [43].

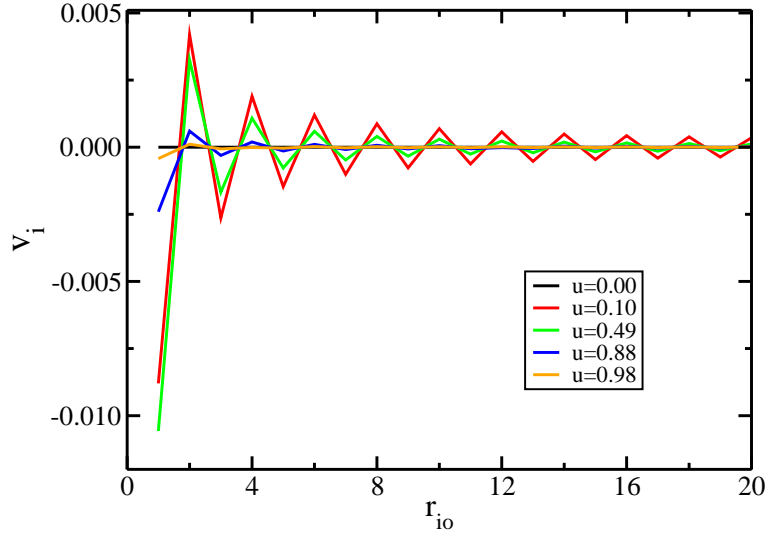


Figura 4.6: Parte não local do potencial renormalizado de desordem v_i em uma cadeia unidimensional como função da distância r_{io} da impureza. À medida que aumentamos u , esses termos não locais têm sua amplitude reduzida. Utilizamos aqui $L = 400$, $\varepsilon_o = -0.1D$, $T = 0$ e condições periódicas de contorno.

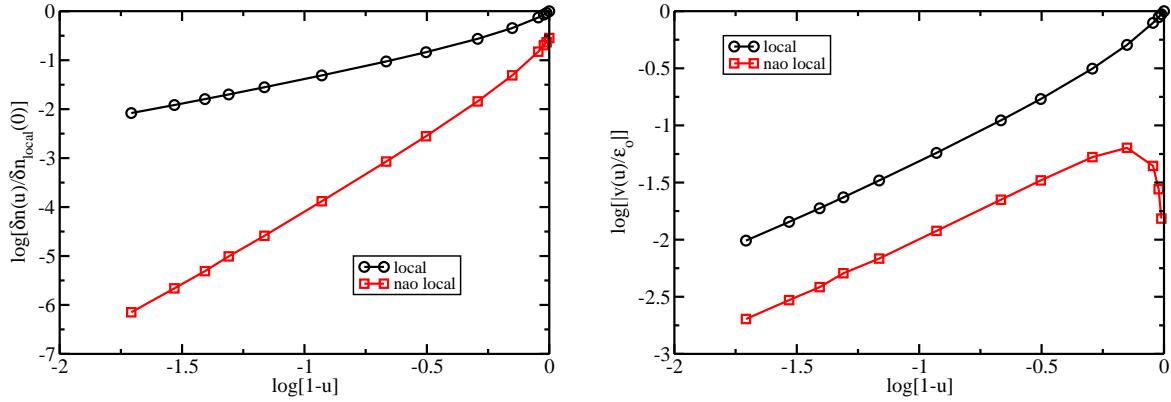


Figura 4.7: Comportamento crítico dos termos local e não local de δn_i e v_i . Na região crítica, o termo local de δn_i vai com $(1-u)$, enquanto o não local vai com $(1-u)^3$. Já no caso de v_i , ambos vão a zero com $(1-u)$. O termo não local é calculado no vizinho da direita ao sítio da impureza. Utilizamos aqui uma cadeia unidimensional com $L = 400$, $\varepsilon_o = -0.1D$, $T = 0$ e condições periódicas de contorno.

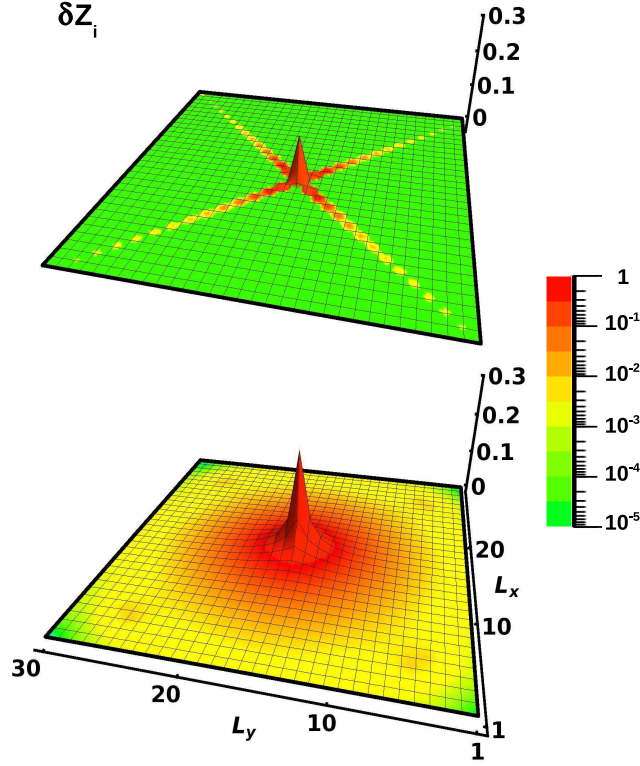


Figura 4.8: Desvios no peso de quasipartícula $\delta Z_i = Z_i - Z_0$. De cima para baixo temos $u = 0.40$ e $u = 0.96$. Enquanto que para valores moderados de interação δZ_i apresenta oscilações de Friedel, ele possui um decaimento exponencial dominante na vizinhança da transição de Mott. Utilizamos aqui uma rede quadrada com $L = 30$, $\varepsilon_o = -D$, $T = 0$ e condições periódicas de contorno. A escala de cor codifica apenas os valores positivos de δZ_i . Mostrado pela primeira vez na Ref. [43].

de δZ_i é capturado por nossas expressões analíticas (veja o Apêndice (E.2)) e mostramos que, para $r_{io}/\xi \gg 1$,

$$\delta Z_i \sim \frac{1-u}{U_c^2} \left(\frac{\pi^{(1-d)/2}}{2^{(1+d)/2}} \left(C_d \xi^{(3-d)/2} e^{-r_{io}/\xi} + 4(1-u)^3 [\mathbf{\Pi}(\mathbf{0})]_{io}^{-1} \right) \varepsilon_o^2, \quad (4.71)$$

onde $C_d = 1$ para $d = 1$ ou $C_d = \pi^{(1-d)/2}/2^{(1+d)/2}$ para $d \geq 2$; $r_{io} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_o|$, com \mathbf{r}_o sendo a posição da impureza e

$$\xi = (2z(1-u))^{-1/2} \quad (4.72)$$

faz as vezes de um comprimento de correlação, com $z = 2d$ sendo o número de coordenação da rede. Este comprimento de correlação diverge na transição com um expoente crítico de campo médio $1/2$. Estudos anteriores sobre a interface de um metal fortemente correlacionado e um isolante de Mott [138, 139], empregando técnicas bem similares às nossas, também encontram um decaimento exponencial do peso de quasipartícula ao penetrar no isolante de Mott a partir do metal. Nestes estudos, contudo, os termos oscilantes da Eq. (4.71) foram ignorados, provavelmente devido ao fato de que sua pequena amplitude inviabiliza sua captura por cálculos numéricos, Figs. (4.8) e (4.9).

4.4 Correções de baixas temperaturas para a resistividade

Vimos anteriormente que, na presença de interações, o potencial efetivo de desordem possui uma parte de longo alcance, Fig. (4.3), que é gerada pelas oscilações de Friedel. Processos de espalhamento das quasipartículas por

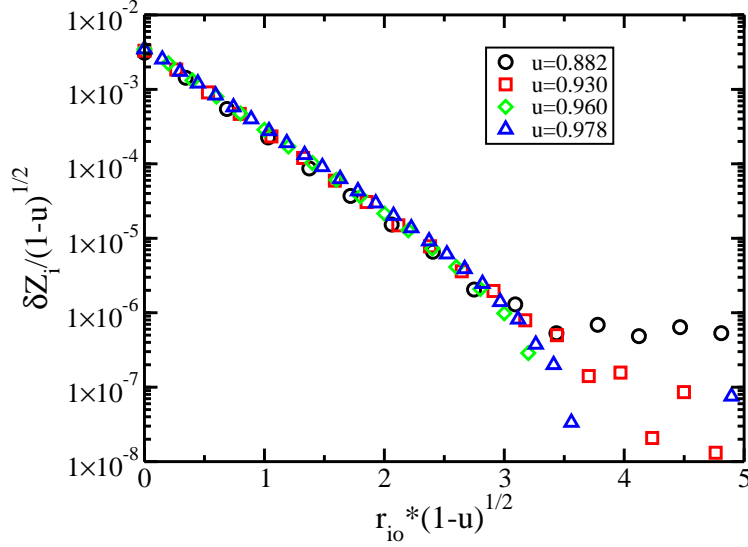


Figura 4.9: Desvio no peso de quasipartícula δZ_i nas proximidades da transição de Mott em uma escala monolog. O reescalamto confirma que $\xi \sim (1-u)^{-1/2}$ e que $\delta Z(0) \sim (1-u)^{1/2}$. Além disso, vemos que, efetivamente, o termo exponencial é o dominante na região crítica. Utilizamos aqui uma cadeia unidimensional com condições periódicas de contorno, $L = 400$, $\varepsilon_o = -0.1D$ e $T = 0$. Para $\delta Z_i / (1-u)^{1/2} < 10^{-6}$, o cálculo numérico não é mais confiável.

essas ondulações produzem novas correções para a dependência com a temperatura de várias quantidades físicas [4, 9, 41]. Um exemplo bem conhecido são as correções para condutividade $\Delta\sigma$ em sistemas bidimensionais

$$\Delta\sigma \sim \begin{cases} T, & \text{balístico, } l \gg \lambda_F; \\ \ln T, & \text{difusivo, } l \ll \lambda_F. \end{cases} \quad (4.73)$$

Usamos a mesma notação da Eq. (4.20), com l sendo o livre caminho médio e λ_F o comprimento de onda dos elétrons no nível de Fermi. Como notado na Ref. [41], embora essas correções tenham uma forma diferente e sejam calculadas em regimes físicos diferentes, elas possuem a mesma origem física: espalhamento coerente das quasipartícula pelas oscilações de Friedel.

Como de praxe, a teoria dos líquidos de Fermi só nos dá a forma funcional das correções, sem dizer nada acerca do intervalo em que estas correções são as dominantes dentro da teoria. Para determinarmos este intervalo precisamos de um cálculo em um modelo microscópico. Utilizaremos aqui o cálculo microscópico desenvolvido na seção (4.3), investigando como as correções dominantes a baixas temperaturas para a resistividade variam como funções das correlações.

4.4.1 Motivação experimental

Ao longo dos últimos quinze anos, avanços experimentais significativos proporcionaram evidências convincentes da existência de uma transição metal-isolante bem definida em gases de elétrons bidimensionais (GE2D) como função da densidade eletrônica [47, 49]. As melhores evidências desta transição são observadas nas amostras mais limpas [47], nas quais nos encontramos no regime balístico de transporte.

Para o regime balístico, Zala *et al.* [41] derivaram uma teoria muito elegante e de grande sucesso, mostrando que, no regime fracamente correlacionado, há o surgimento de uma correção linear para a resistividade do sistema. Muitos experimentos em GE2D passaram então a usar esta teoria como guia na interpretação de seus resultados [46, 105].

Contudo, na região crítica, a massa efetiva m^* é consideravelmente aumentada (uma assinatura característica de fortes correlações), enquanto que o fator g efetivo ($g^* = g / (1 + F_0^a)$) permanece praticamente sem ser renormalizado⁴, veja Fig. (4.10). Olhando para as Eqs. (4.15) e (4.16), vemos que fenomenologia similar aparece no cenário

⁴Este mesmo comportamento é observado na transição de líquido de Fermi para sólido no He³ normal [103, 104].

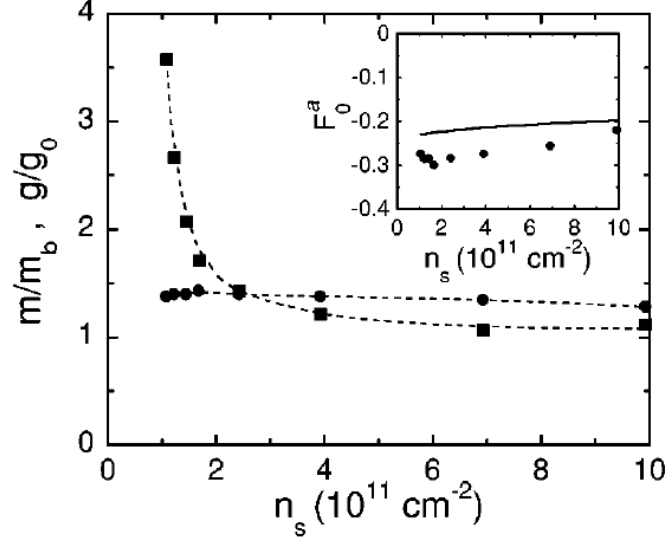


Figura 4.10: Renormalização da massa efetiva (quadrado) e do fator g (círculos) como função da densidade eletrônica para um gás de elétrons bidimensional. Retirado da Ref. [46]. *Inserção:* Comparação do parâmetro de Landau F_0^a obtido utilizando-se um modelo teórico (curva cheia) com aquele extraído dos dados experimentais (círculos). Nesta amostra, a densidade crítica para qual a transição ocorre é $n_c = 0.8 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$.

de Brinkman-Rice para a transição de Mott, sugerindo um estudo da transição metal-isolante de gases de elétrons bidimensionais dentro desta abordagem [140].

Nosso modelo é muito simples para uma descrição completa dos resultados experimentais. O que queremos fazer aqui é investigar o quão robusta é essa correção linear para $\rho(T)$ em $2d$ (derivada dentro de uma aproximação Hartree-Fock) na medida em que as correlações entram em cena.

4.4.2 Inclusão dos “cutoffs” inelásticos

A quantidade fundamental para estudarmos transporte em sistemas metálicos, como discutido na seção (4.2), é a taxa de espalhamento do transporte τ_{tr}^{-1} [3]

$$\tau_{\text{tr}}^{-1}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi n_i}{V} \int \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')) |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 (1 - \hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{k}}), \quad (4.74)$$

onde $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ é a amplitude de espalhamento entre o estado de momento \mathbf{k} e aquele de momento \mathbf{k}' , n_{imp} é a concentração infinitesimal de impurezas e a função delta impõe que o espalhamento seja elástico. $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ nada mais é do que a transformada de Fourier do potencial de espalhamento, dado pela matriz T , Eq. (4.56). Como estamos dentro da aproximação de Born, a matriz T é simplesmente dada pela transformada de Fourier do potencial renormalizado de desordem v , Eq. (4.59). Para um potencial de desordem com simetria esférica, podemos escrever que $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f(q)$, onde $q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin(\theta/2)$ é o momento transferido na colisão, θ é o ângulo de espalhamento e $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$.

Antes de prosseguirmos, gostaríamos de clarificar o problema físico que nos propomos a resolver. O termo linear na resistividade $\rho(T)$ emerge do espalhamento coerente das quasipartículas pelas oscilações de Friedel, e estas oscilações de Friedel são em si um processo assintótico (veja, por exemplo, o Apêndice (F)). Parece-nos, então, razoável assumir que seja suficiente estudarmos o comportamento assintótico do sistema para entendermos como este termo linear é afetado pela presença de correlações. Baseado neste raciocínio, o uso de uma dispersão do tipo elétron livre $\varepsilon = k^2/2m$ para os elétrons da rede é bem justificada, pois uma descrição de contínuo é apropriada neste limite de longos comprimentos de onda. Com esta escolha de dispersão, temos que $\delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')) = (m/k) \delta(k - k')$ e a Eq. (4.74) fica

$$\tau_{\text{tr}}^{-1}(\varepsilon) = n_{\text{imp}} m \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} |T_q|^2 (1 - \cos\theta). \quad (4.75)$$

O tempo de espalhamento do transporte é dado pela média [3]

$$\tau_{\text{tr}}(T) = \int d\varepsilon \tau_{\text{tr}}(\varepsilon) f'(\varepsilon), \quad (4.76)$$

onde $f'(\varepsilon)$ é a derivada da função de Fermi-Dirac.

Em nossa teoria de campo médio de bósons escravos, a autoenergia eletrônica é puramente real [65] e descreve apenas o espalhamento elástico dos elétrons por um potencial blindado da impureza dependente da temperatura. Contudo, este esquema deve de fato ser encarado como um cálculo variacional dos parâmetros de quasipartículas dentro do nosso procedimento de TEDCM. Em um tratamento mais completo, também existe uma parte imaginária na autoenergia, refletindo efeitos inelásticos (veja, por exemplo, a Eq. (4.28)). Com o propósito de avaliarmos apenas os *efeitos perturbativos dominantes* do espalhamento pela impureza, esta parte imaginária pode ser computada no sistema uniforme, onde ela emerge naturalmente no contexto de uma teoria local de líquidos de Fermi como a TDCM [20, 141], e é dada por

$$\gamma(T) = \Lambda(u) T_F (T/T_F)^2, \quad (4.77)$$

onde T_F é a temperatura de Fermi e a função $\Lambda(u)$ possui os seguintes limites: $\Lambda(u) \sim u^2$ para u pequeno e $\Lambda(u) \sim (1-u)^{-2} \sim (m^*/m)^2$ próximo da transição de Mott. Estes limites podem ser entendidos pelo fato de que, no regime fracamente correlacionado, os efeitos de espalhamento inelástico são perturbativos, ao passo que no regime fortemente correlacionado, recuperamos a conhecida relação de Kadowaki-Woods⁵ [141], que é observada em vários sistemas fortemente correlacionados e que vale dentro da abordagem de TDCM que usamos aqui⁶.

Há duas contribuições principais vindas do espalhamento inelástico. A primeira é a contribuição do “bulk”, presente mesmo no sistema uniforme, dada por $\tau_{\text{in}}^{-1}(T) = \eta\gamma(T)$, onde η é um fator geométrico que depende da estrutura de banda utilizada no cálculo da TDCM (este resultado decorre da Eq. (4.34)). $\tau_{\text{in}}^{-1}(T)$ simplesmente adiciona-se a $\tau_{\text{tr}}^{-1}(T)$ através da regra de Matthiessen [3], uma vez que consideramos impurezas muito diluídas. A segunda contribuição vem do fato de que uma parte imaginária finita também suprime as não analiticidades decorrentes do espalhamento elástico pelas oscilações de Friedel [41, 142]. Este fato é levado em conta ao calcularmos $\Pi_{\mathbf{q}}^{(0)}$, pois consideramos que a energia do elétron possui agora também uma parte imaginária dada por $\gamma(T)$. O cálculo de $\Pi_{\mathbf{q}}^{(0)}$, na presença de um alargamento de níveis é cuidadosamente discutido na Ref. [142] para o caso de um gás de elétrons em $2d$, e nós utilizamos a forma analítica de $\Pi_{\mathbf{q}}^{(0)}$ obtida lá

$$\Pi_{\mathbf{q}}^{(0)} = -2\rho(\varepsilon_F) f(q, \gamma, T), \quad (4.78)$$

onde

$$f(q, \gamma, T) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi Q} \sqrt{\frac{T}{T_F}} \int_0^{T_F/T - y_0} dy \frac{\text{Im}\Psi[1/2 + \gamma(T)/2\pi T - i(y + y_0)/2\pi]}{\sqrt{y}}, \quad (4.79)$$

$$Q = \frac{q}{k_F} = 2 \frac{k}{k_F} \sin\left[\frac{\theta}{2}\right] = 2 \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}} \sin\left[\frac{\theta}{2}\right], \quad (4.80)$$

$$y_0 = \frac{T_F}{T} \left(1 - \frac{Q^2}{4}\right) = -\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{T} + \frac{\varepsilon}{T} \cos^2\left[\frac{\theta}{2}\right], \quad (4.81)$$

e $\Psi(z)$ é a função digama, que é a derivada logarítmica da função gama, $\Psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$ [128].

⁵Esta relação de Kadowaki-Woods é observada experimentalmente e diz que, para sistemas fortemente correlacionados, $A/\gamma^2 =$ constante, onde A é o coeficiente da resistividade ($\rho(T) = \rho_0 + AT^2$) e γ o coeficiente de Sommerfeld do calor específico ($c_v(T) = \gamma T$), mesmo que γ^2 varie por ordens de magnitude no material estudado.

⁶ $\gamma(T)$ dá o inverso da meia-vida das quasipartículas e esperamos que, ao nos aproximarmos da transição de Mott, esta meia-vida seja cada vez mais curta, culminando com a destruição das quasipartículas na transição.

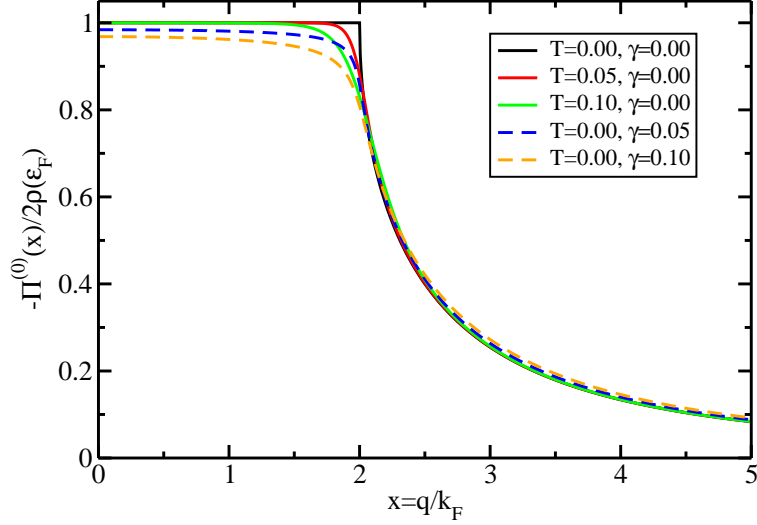


Figura 4.11: Função de Lindhard em duas dimensões, Eq. (4.79) normalizada pelo seu valor em $q = 0$. Vemos que à medida que tanto T ou γ são diferentes de zero, a não analiticidade em $q = 2k_F$ é suprimida.

No limite de $T = 0$, $\gamma(T) = 0$ e recuperamos a expressão usual para a função de Lindhard em $2d$ [143, 144]

$$f(q, 0, 0) = \begin{cases} 1, & x \leq 1 \\ 1 - \sqrt{1 - x^{-2}}, & x > 1 \end{cases} \quad \text{com} \quad x = \frac{|q|}{2k_F}. \quad (4.82)$$

Vemos que $f(q, 0, 0)$ possui uma cúspide para $x = 1$, ponto em que sua derivada é, portanto, descontínua. Devido a esta não analiticidade em $q \approx 2k_F$, processos de retroespalhamento ao longo da superfície de Fermi constituem o mecanismo mais importante de espalhamento. As oscilações de Friedel, por exemplo, têm origem nesta não analiticidade da função de polarização para $q = 2k_F$. Efeitos de temperatura e alargamento de níveis tendem a suavizar a cúspide de $f(q, 0, 0)$ em $q = 2k_F$, suprimindo assim os efeitos das não analiticidades, Fig. (4.11).

4.4.3 Cálculo da taxa de espalhamento

Para o cálculo de τ_{tr}^{-1} , Eq. (4.75), precisamos determinar T_q , que, pela Eq. (4.59), sabemos ser dada pela transformada de Fourier da Eq. (4.52). Utilizando a Eq. (4.78), podemos escrever que

$$T(q, \gamma, T) = \frac{\varepsilon_o}{1 - u^2} \left\{ 1 - \left[1 + \frac{g(u)}{\rho(\varepsilon_F) U_c f(q, \gamma, T)} \right]^{-1} \right\}, \quad (4.83)$$

Como estamos interessados em calcular τ_{tr}^{-1} para $T \ll T_F$, apenas o primeiro termo não nulo (ou dominante) envolvendo a temperatura será mantido. Para progredirmos, definimos

$$f(q, \gamma, T) = 1 - \delta f(q, \gamma, T), \quad (4.84)$$

onde

$$\delta f(q, \gamma, T) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi Q} \sqrt{\frac{T}{T_F}} \int_0^{T_F/T - y_0} dy \frac{F(\gamma/T, y + y_0)}{\sqrt{y}}, \quad (4.85)$$

com

$$F(\gamma/T, y) = \text{Im} \Psi [1/2 + \gamma/2\pi T - i(y + y_0)/2\pi]. \quad (4.86)$$

Por ora, assumiremos que $\delta f \ll 1$, uma vez que esta quantidade contém a primeira correção em T/T_F para τ_{tr}^{-1} . Ao final do cálculo, verificaremos que esta condição é consistente com o resultado obtido. Como isso, a Eq. (4.83) fica

$$\begin{aligned}
 T(q, \gamma, T) &= \frac{\varepsilon_o}{1-u^2} \left\{ 1 - \left[1 + \frac{g(u)}{\rho(\varepsilon_F) U_c (1 - \delta f(q, T))} \right]^{-1} \right\} \\
 &\simeq \varepsilon_o \frac{g(u)}{(1-u^2)(\rho(\varepsilon_F) U_c + g(u))} \left\{ 1 + \frac{\rho(\varepsilon_F) U_c}{(\rho(\varepsilon_F) U_c + g(u))} \delta f(q, T) \right\}.
 \end{aligned} \tag{4.87}$$

A Eq. (4.87) gera automaticamente a uma aproximação para $|T(q, T)|^2$

$$|T(q, \gamma, T)|^2 \simeq \tau_0^{-1} A^2(u) \{1 + \alpha(u) \delta f(q, T)\}, \tag{4.88}$$

o que nos leva a, usando a Eq. (4.75)

$$\tau_{\text{tr}}^{-1}(\varepsilon, \gamma, T) = \tau_0^{-1} A^2(u) \{1 + \alpha(u) I(\varepsilon, \gamma, T)\}, \tag{4.89}$$

onde

$$\tau_0^{-1} = n_{\text{imp}} \varepsilon_o^2, \tag{4.90}$$

$$A(u) = \frac{g(u)}{(1-u^2)(\rho(\varepsilon_F) U_c + g(u))}, \tag{4.91}$$

$$\alpha(u) = \frac{2\rho(\varepsilon_F) U_c}{(\rho(\varepsilon_F) U_c + g(u))}, \tag{4.92}$$

e

$$I(\varepsilon, \gamma, T) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} (1 - \cos(\theta)) \delta f(q, \gamma, T). \tag{4.93}$$

τ_0^{-1} é a taxa de espalhamento devido somente à impureza despida a $T = 0$, e lembramos também que $q = 2\sqrt{\varepsilon} \sin[\theta/2]$, Eq. (4.80). A função $A(u)$ controla a amplitude da taxa de espalhamento pelo potencial blindado da impureza, Fig. (4.12). No regime fracamente correlacionado, $A(u) \sim 1$, ao passo que, na região crítica, $A^2(u) \sim (1-u)^2$, devido ao fato de que v_i se anula em $U = U_c$, Eq. (4.70). A função $\alpha(u)$ controla a intensidade da primeira correção com a temperatura, Fig. (4.12). Ela vai com U para correlações fracas, indicando que as correções com a temperatura só aparecem na presença da repulsão elétron-elétron e satura a 2, próximo da transição de Mott. Já integral $I(\varepsilon, \gamma, T)$ é que de fato determina a forma da correção com a temperatura e será avaliada a seguir.

4.4.3.1 Cálculo das integrais

Para calcularmos esta integral I , introduzimos uma nova variável $u = \sqrt{\varepsilon/T} \cos[\theta/2]$, e, da Eq. (4.81), $y_0 = -(\varepsilon - \varepsilon_F)/T + u^2$. Em termos desta nova variável u , temos

$$\begin{aligned}
 I(\varepsilon, \gamma, T) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi^2} \int_{\sqrt{\varepsilon/T}}^{-\sqrt{\varepsilon/T}} \frac{2du}{-\sqrt{\frac{\varepsilon}{T}} \sin[\frac{\theta}{2}]} 2\sin^2\left[\frac{\theta}{2}\right] \frac{1}{2\sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}} \sin[\frac{\theta}{2}]} \sqrt{\frac{T}{T_F}} \int_0^{T_F/T - y_0} dy \frac{F(\gamma/T, y + y_0)}{\sqrt{y}} \\
 &= \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi^2} \frac{T}{\varepsilon} \int_0^{\sqrt{\varepsilon/T}} du \int_0^{T_F/T - y_0} dy \frac{F(\gamma/T, y + y_0)}{\sqrt{y}}.
 \end{aligned} \tag{4.94}$$

Acima, utilizamos o fato de que a integral é par em u , pois toda sua dependência com u vem de $y_0 = -(\varepsilon - \varepsilon_F)/T + u^2$.

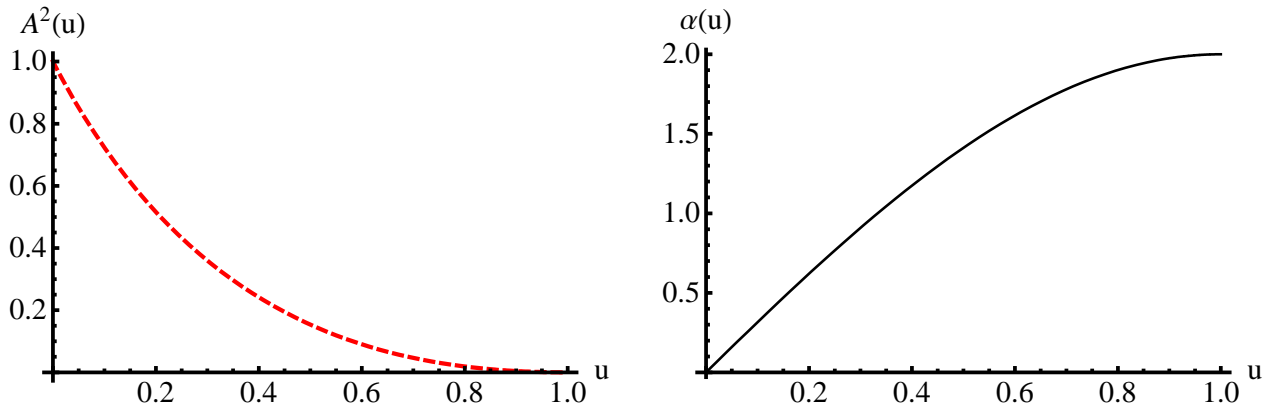


Figura 4.12: Quadrado da função $A(u)$, que limita a amplitude da taxa de espalhamento pelo potencial blindado da impureza (esquerda); e função $\alpha(u)$, que controla a intensidade da primeira correção com a temperatura de $\tau_{\text{tr}}^{-1}(T)$ (direita). Utilizamos aqui $\rho(\varepsilon_F)U_c = 0.8$.

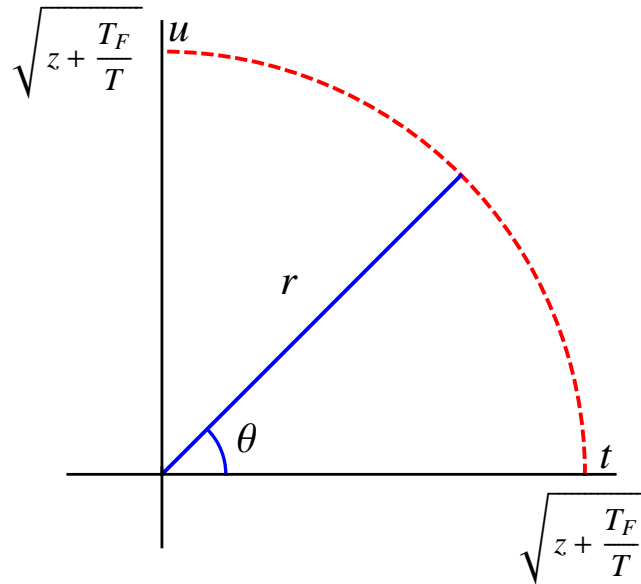


Figura 4.13: Região de integração da Eq. (4.99) no plano $t - u$.

Até este ponto, temos apenas $\tau_{\text{tr}}^{-1}(\varepsilon, \gamma, T)$. Para determinarmos $\tau_{\text{tr}}(\gamma, T)$, precisamos fazer uma média sobre a função de Fermi, como mostrado na Eq. (4.76). Como estamos calculando apenas o termo dominante, podemos escrever

$$\tau_{\text{tr}}(\varepsilon, \gamma, T) \simeq \tau_0 A^{-2}(u) \{1 - \alpha(u) I(\varepsilon, \gamma, T)\}. \quad (4.95)$$

Este resultado é obtido a partir da Eq. (4.89), sempre tendo em mente que manteremos apenas a contribuição dominante vinda de δf que é definida na Eq. (4.84), e que determina $I(\varepsilon, \gamma, T)$, Eq. (4.93). Usando as Eqs. (4.76) e (4.94), obtemos

$$\tau(\gamma, T) = \tau_0 A^{-2}(u) \{1 - 2\alpha(u) w(\gamma, T)\}, \quad (4.96)$$

onde a integral $w(\gamma, T)$ é dada por

$$w(\gamma, T) = \frac{1}{4} - \frac{4}{\pi^2} \int_0^\infty d\varepsilon f'(\varepsilon) \frac{T}{\varepsilon} \int_0^{\sqrt{\varepsilon/T}} du \int_0^{T_F/T - y_0} dy \frac{F(\gamma/T, y + y_0)}{\sqrt{y}}. \quad (4.97)$$

Definindo-se $z = (\varepsilon - \varepsilon_F)/T$, temos $y_0 = -z + u^2$, e a equação acima fica

$$w(\gamma, T) = \frac{1}{4} + \frac{4}{\pi^2} \int_{-\varepsilon_F/T}^\infty dz \frac{1}{4} \text{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \frac{T}{T_F (1 + zT/T_F)} \int_0^{\sqrt{T_F(1+zT/T_F)/T}} du \int_0^{T_F/T - y_0} dy \frac{F(\gamma/T, y + y_0)}{\sqrt{y}},$$

onde escrevemos $f'(\varepsilon) = -\text{sech}^2[z/2]/4$. Tomando agora o limite $T/T_F \rightarrow 0$, e mantendo apenas o termo dominante temos

$$w(\gamma, T) \simeq \frac{1}{4} + \frac{T}{4\pi^2 T_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \text{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \int_0^{\sqrt{T_F/T+z}} du \int_0^{T_F/T+z-u^2} dy \frac{F(\gamma/T, y + u^2 - z)}{\sqrt{y}}. \quad (4.98)$$

Fazendo $y = t^2$, encontramos

$$w(\gamma, T) = \frac{1}{4} + \frac{T}{4\pi^2 T_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \text{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \int_0^{\sqrt{T_F/T+z}} du \int_0^{\sqrt{T_F/T+z-u^2}} dt F(\gamma/T, t^2 + u^2 - z). \quad (4.99)$$

Pela Eq. (4.99), notamos que há a seguinte relação entre a variável de integração u e o valor máximo da variável t , que chamamos de t_{max}

$$t_{\text{max}}^2 + u^2 = \frac{T_F}{T} + z, \quad (4.100)$$

que descreve um círculo no plano $t - u$, com um raio máximo dado por $r_{\text{max}}^2 = T_F/T + z$, veja a Fig. (4.13). Esta identificação imediatamente sugere a seguinte troca de variáveis, $(t, u) \rightarrow (r, \theta)$, de onde temos que

$$\begin{aligned} w(\gamma, T) &= \frac{1}{4} + \frac{T}{2\pi^2 T_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \text{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{\sqrt{T_F/T+z}} dr r F\left(\frac{\gamma}{T}, r^2 - z\right) \\ &= \frac{1}{4} + \frac{T}{4\pi T_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \text{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \int_0^{\sqrt{T_F/T+z}} dr r F\left(\frac{\gamma}{T}, r^2 - z\right) \\ &= \frac{1}{4} + \frac{T}{8\pi T_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \text{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \int_0^{T_F/T+z} ds \text{Im} \Psi \left[\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2\pi T} - i \frac{(s-z)}{2\pi} \right]. \end{aligned}$$

onde fizemos $s = r^2$ e usamos a Eq. (4.86) para reescrever a função F . A integral sobre s pode ser feita se usarmos a definição da função digama $\Psi(z) = d \ln[\Gamma(z)]/dz$,

$$\begin{aligned} w(\gamma, T) &= \frac{1}{4} + \frac{T}{8\pi T_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \text{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \text{Im} \left[\frac{-2\pi}{i} \ln \Gamma \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2\pi T} - i \frac{(s-z)}{2\pi} \right) \Big|_0^{T_F/T+z} \right] \\ &= \frac{1}{4} + \frac{T}{T_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{1}{4} \text{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \text{Re} \left[\ln \Gamma \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2\pi T} - i \frac{T_F}{2\pi T} \right) - \ln \Gamma \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2\pi T} + i \frac{z}{2\pi} \right) \right]. \quad (4.101) \end{aligned}$$

Só resta agora realizar esta integral sobre a variável z . Embora não possa ser avaliada analiticamente, sua integração numérica não apresenta dificuldades extras. Vemos que $w(\gamma, T)$ não depende de γ sozinho, mas sim da razão γ/T . Contudo, devido ao termo $iT_F/2\pi T$ presente em um dos logaritmos, uma forma de escala genérica não é possível, Fig. (4.14).

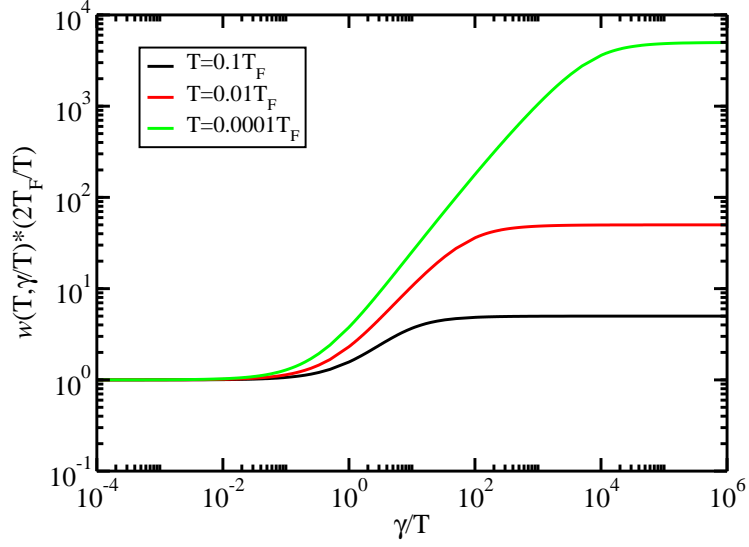


Figura 4.14: Integral $w(T, \gamma/T)$ dividida por seu valor assintótico $T/2T_F$, veja Eq. (4.104). Para $\gamma/T \lesssim 10^{-2}$ as curvas tendem a seu valor assintótico, e ficam independentes de T . Já para $\gamma > T_F$ todas as curvas no gráfico saturam para o valor $T_F/2T$.

4.4.3.2 Limite $T/T_F \ll 1$

Como estamos no limite de baixas temperaturas $T_F/T \rightarrow \infty$, podemos aplicar a aproximação de Stirling na função gama presente na Eq. (4.101). A fórmula de Stirling é dada por [128]

$$\ln \Gamma(z) \sim \left(z - \frac{1}{2}\right) \ln z - z + \frac{1}{2} \ln 2\pi, \quad z \rightarrow \infty, \quad (4.102)$$

e temos que

$$\begin{aligned} w(\gamma, T) &\sim \frac{1}{4} + \frac{T}{T_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{1}{4} \operatorname{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \operatorname{Re} \left[-\ln \Gamma \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2\pi T} + i \frac{z}{2\pi} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\gamma}{T} - i \frac{T_F}{T} \right) \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2\pi T} - i \frac{T_F}{2\pi T} \right) - \frac{1}{2} - \frac{\gamma}{2\pi T} + i \frac{T_F}{2\pi T} + \frac{1}{2} \ln 2\pi \right] \\ &= \frac{1}{4} + \frac{T}{T_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{1}{4} \operatorname{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \left[\operatorname{Re} \left[-\ln \Gamma \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2\pi T} + i \frac{z}{2\pi} \right) \right] - \frac{1}{2} - \frac{\gamma}{2\pi T} + \frac{1}{2} \ln 2\pi \right. \\ &\quad \left. - \frac{T_F}{2\pi T} \tan^{-1} \left[\frac{1}{\pi T/T_F + \gamma/T_F} \right] + \frac{\gamma}{4\pi T} \ln \left(\left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2\pi T} \right)^2 + \left(\frac{T_F}{2\pi T} \right)^2 \right) \right], \end{aligned}$$

Usamos agora o fato de que ambos T/T_F e γ/T_F são pequenos para escrevermos $\tan^{-1}[1/x] \simeq \pi/2 - x$ e $\ln[1+x^2] \simeq 0$, onde $x = \pi T/T_F + \gamma/T_F$

$$\begin{aligned} w(\gamma, T) &\simeq \frac{1}{4} + \frac{T}{T_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{1}{4} \operatorname{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \left[-\operatorname{Re} \left[\ln \Gamma \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2\pi T} + i \frac{z}{2\pi} \right) \right] - \frac{1}{2} - \frac{\gamma}{2\pi T} + \frac{1}{2} \ln 2\pi \right. \\ &\quad \left. - \frac{T_F}{2\pi T} \left[\frac{\pi}{2} - \pi \frac{T}{T_F} - \frac{\gamma}{T_F} \right] + \frac{\gamma}{2\pi T} \ln \left(\frac{T_F}{2\pi T} \right) \right] \\ &= \frac{T}{T_F} \left\{ \frac{\gamma}{2\pi T} \ln \left(\frac{T_F}{2\pi T} \right) + \frac{1}{2} \ln 2\pi - \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{1}{4} \operatorname{sech}^2 \left[\frac{z}{2} \right] \operatorname{Re} \left[\ln \Gamma \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2\pi T} + i \frac{z}{2\pi} \right) \right] \right\} \quad (4.103) \end{aligned}$$

A comparação entre esta solução aproximada e a exata é mostrada na Fig. (4.15). Esta forma para $w(\gamma, T)$ é consistente com a nossa hipótese de que o termo δf , na Eq. (4.85), é pequeno.

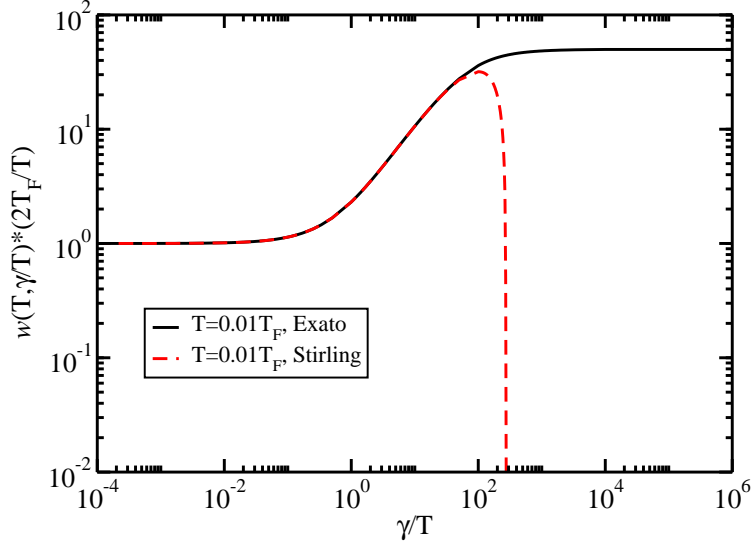


Figura 4.15: Expressão exata (Eq. (4.101)) e aproximada (Eq. (4.103)) para $w(T, \gamma/T)$, dividida por seu valor assintótico $T/2T_F$. Vemos que as duas soluções são iguais no intervalo em que $\gamma < T_F$, intervalo este que não só está de acordo com as hipóteses usadas na aproximação, como também coincide com a região física de interesse.

No limite em que $\gamma = 0$, a Eq. (4.103) reduz-se a

$$w(0, T) = \frac{T}{2T_F}, \quad (4.104)$$

que é o limite assintótico utilizado na Fig. (4.14).

4.4.3.3 Região de relevância da correção linear de $\rho(T)$ em $2d$

Utilizando as Eqs. (4.96) e incluindo o termo de “bulk” devido ao espalhamento inelástico, chegamos à forma final de $\tau_{\text{tr}}^{-1}(\gamma, T)$

$$\tau_{\text{tr}}^{-1}(\gamma, T) = \tau_0^{-1} A^2(u) \left\{ 1 + 2 \frac{T}{T_F} \alpha(u) w'(\gamma(T), T) \right\} + \eta \gamma(T), \quad (4.105)$$

onde

$$w'(\gamma(T), T) = \frac{T_F}{T} w(\gamma(T), T), \quad (4.106)$$

e $w(\gamma(T), T)$ é dado pela Eq. (4.103).

Para $\gamma(T) = 0$, apenas o espalhamento elástico está presente e temos $w'(0, T) = 0.5$, Eq. (4.104). Inserindo este resultado de volta na Eq. (4.105), vemos que a correção linear com T ocorre para todo $u > 0$ e fica limitada apenas pela amplitude $A(u)$. Isso está de acordo com a Eq. (4.70), pois lá mostramos que a parte não local do potencial renormalizado de desordem v_i está presente mesmo nas proximidades da transição de Mott, e é limitada apenas por uma amplitude global⁷. É justamente esta parte não local de v_i que dá origem a esta correção linear em T do tipo não líquido de Fermi para a resistividade do sistema.

Já para um $\gamma(T)$ finito, a região linear de $\rho(T)$ diminui consideravelmente ao entrarmos no regime correlacionado. Como há duas contribuições dominantes para o espalhamento inelástico, analisamos seus efeitos individuais separadamente, definindo duas temperaturas limitantes que restringem a região do tipo não líquido de Fermi por cima. Elas são obtidas ao compararmos $\tau_{\text{tr}}^{-1}(T)$ no caso puramente elástico ($\gamma(T) \rightarrow 0$, na Eq. (4.105)), com duas outras taxas de espalhamento: uma na qual fazemos $\eta \rightarrow 0$ (T_{imp}^*), e a outra na qual tomamos $w'(\gamma(T), T) \rightarrow w'(0, T)$ (T_{bulk}^*), na Eq. (4.105).

⁷No Apêndice (F), mostramos que esta parte não local de v_i possui a mesma forma espacial tanto para $u \rightarrow 0$ quanto para $u \rightarrow 1$, o que é consistente com o fato de que a correção linear está presente para todo $u > 0$.

Podemos fazer uma estimativa simples dessas temperaturas limitantes T_{bulk}^* e T_{imp}^* no regime crítico. Utilizando a Eq. (4.77), podemos escrever que

$$\gamma(T) = cT_F \left(\frac{m^*}{m} \right)^2 \left(\frac{T}{T_F} \right)^2, \quad (4.107)$$

com

$$c = CDZ_0^2 = CD \left(\frac{m}{m^*} \right)^2 \sim \mathcal{O}(1), \quad (4.108)$$

e $T_F = D$ ($k_B = 1$). Discutiremos melhor a Eq. (4.108) a seguir (veja, por exemplo, a Fig. (4.16)). Além disso, pelas Eqs. (2.96) e (3.33),

$$Z_0 = 1 - u^2 = \frac{m}{m^*}. \quad (4.109)$$

No caso de T_{imp}^* , ela é calculada na ausência do termo de bulk ($\eta = 0$), fazendo com que qualquer desvio do comportamento linear venha da função $w'(\gamma(T), T)$. Pela Fig. (4.14), vemos que $w'(\gamma(T), T)$ é constante e independente de T para $\gamma/T \lesssim 10^{-2}$, o que implica que até este ponto o comportamento linear sobrevive, de modo que temos

$$\frac{T_{imp}^*}{T_F} \approx 10^2 \frac{\gamma_{imp}}{T_F} = 10^2 c \left(\frac{m^*}{m} \right)^2 \left(\frac{T_{imp}^*}{T_F} \right)^2, \quad (4.110)$$

donde

$$\frac{T_{imp}^*}{T_F} \approx 10^{-2} \left(\frac{m}{m^*} \right)^2. \quad (4.111)$$

T_{bulk}^* , por sua vez, é calculada para $w'(\gamma(T), T) = w'(0, T) = 0.5$ e $\eta \neq 0$, de tal forma que o desvio da linearidade ocorre quando a contribuição quadrática do espalhamento inelástico do bulk supera aquela linear vinda do espalhamento elástico pelas oscilações de Friedel. Comparando estas duas contribuições, podemos estimar T_{bulk}^* , lembrando que, na região crítica, $\alpha(u) \sim 2$ e $A^2(u) \sim (1-u)^2 \sim (m/m^*)^2$

$$\begin{aligned} \frac{T_{bulk}^*}{T_F} (\tau_0 \varepsilon_F)^{-1} \left(\frac{m}{m^*} \right)^2 &\approx \eta \left(\frac{m^*}{m} \right)^2 \left(\frac{T_{bulk}^*}{T_F} \right)^2 \\ \frac{T_{bulk}^*}{T_F} &\approx (\tau_0 \varepsilon_F)^{-1} \left(\frac{m}{m^*} \right)^4. \end{aligned} \quad (4.112)$$

Comparando as Eqs. (4.111) e (4.112), vemos que, na região crítica, $T_{bulk}^* \sim (m/m^*)^4$, ao passo que $T_{imp}^* \sim (m/m^*)^2$, o que nos sugere que a temperatura limitante para o comportamento linear seja dada por T_{bulk}^* . Além disso, vemos que T_{bulk}^* também depende de $(\tau_0 \varepsilon_F)^{-1}$. Como assumimos a condição de espalhamento fraco em nossas derivações, devemos necessariamente ter que $\tau_0 \varepsilon_F \gg 1$, Eq. (4.90). Portanto, quanto mais fraco for o espalhamento, menor será o valor de T_{bulk}^* e, por consequência, menor o intervalo de validade da correção linear para $\rho(T)$.

Um cálculo quantitativo dessas temperaturas pode ser obtido numericamente a partir da Eq. (4.105). Para procedermos, precisamos de um modelo razoável que nos permita extrair os vários parâmetros da teoria⁸. Pelas Eqs. (4.91) e (4.92), vemos que um parâmetro que aparece em nossos cálculos é o produto $\rho(\varepsilon_F) U_c$. Da Eq. (3.30), temos que $U_c = 8 |\varepsilon_{kin}^0|$, onde ε_{kin}^0 é a energia cinética média no limite não interagente, que é da ordem da semilargura de banda D . Portanto, é razoável supormos que, de maneira geral, $\rho(\varepsilon_F) U_c \sim \mathcal{O}(1)$. Uma estimativa para este parâmetro é obtida, por exemplo, ao fazermos uma comparação direta dos nossos resultados analíticos com resultados experimentais para gases de elétrons bidimensionais. Pela Eq. (4.16), temos que o parâmetro de Landau F_0^a , próximo da transição, assume a seguinte forma

$$F_0^a \simeq -\frac{3}{8} \rho(\varepsilon_F) U_c. \quad (4.113)$$

⁸Os argumentos apresentados aqui são similares àqueles apresentados na Ref. [103], onde o autor descreve o comportamento do He³ líquido próximo do ponto de solidificação utilizando o cenário de Brinkman-Rice para a transição de Mott.

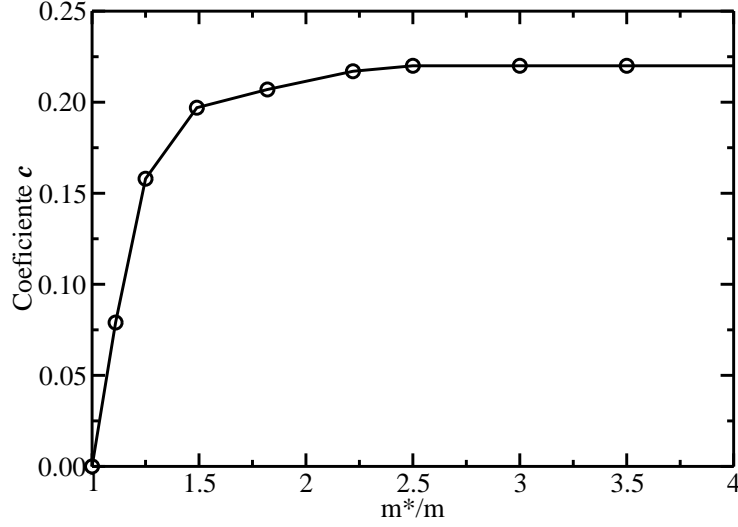


Figura 4.16: Coeficiente c , Eq. (4.108), da autoenergia eletrônica como função da massa efetiva m^* , retirado da Ref. [133]. Já para $m^* \gtrsim 1.5m$, temos que c é basicamente uma constante, indicando que mesmo aí já estamos capturando o comportamento crítico, no qual a única escala de energia do problema passa a ser dada por $Z_0 D$.

Pela Fig. (4.10), temos que $F_0^a \simeq -0.3$. Comparando ambos, temos que

$$\rho(\varepsilon_F) U_c = 0.8. \quad (4.114)$$

Com o objetivo de testarmos a razoabilidade desta escolha, também fizemos os cálculos considerando que $\rho(\varepsilon_F) U_c = 8.0$, Fig. (4.17). Encontramos que T_{bulk}^* possui uma pequena dependência com o valor de $\rho(\varepsilon_F) U_c$, ao passo que T_{imp}^* é basicamente independente dele. De qualquer forma, nossas conclusões gerais são inalteradas para qualquer uma das duas escolhas, pois os resultados coincidem, inclusive quantitativamente, para ambas.

Analisaremos agora a parametrização da função $\Lambda(u)$ descrevendo a parte imaginária da autoenergia eletrônica, Eq. (4.77). Pelas Eqs. (4.28), (4.107) e (4.108), podemos escrever que $\gamma(T) = c(m^*/m)^2 T_F (T/T_F^2)$, com $c = CD(m/m^*)^2$, donde concluímos que a função $\Lambda(u)$ é determinada pelo coeficiente c , que é naturalmente constante com relação apenas a ω e T , mas não com relação a u . Para estimarmos o valor de c em nossos cálculos numéricos, utilizamos os dados da Ref. [133], obtidos dentro da TDCM, e que estão reproduzidos na Fig. (4.16).

Já o fator geométrico η é estimado a partir da Eqs. (4.19), (4.35) e (4.77), e é dado por

$$\eta = \frac{4td}{D^2 \rho(\varepsilon_F) I_0} \approx I_0^{-1} \approx 10, \quad (4.115)$$

onde assumimos que $n = 1$, $t = 1/2m$, $D = 4dt$ e $D\rho(\varepsilon_F) \approx 1$.

Como podemos ver da Fig. (4.17), T_{bulk}^* é estritamente menor que T_{imp}^* , o que coincide com a tendência capturada por nossas estimativas, Eqs. (4.111) e (4.112). Portanto, para qualquer grau de correlação, é T_{bulk}^* que determina o limite superior para região linear de $\rho(T)$.

Também pela Fig. (4.17) vemos que, mesmo para correlações moderadas, a região do tipo não líquido de Fermi é restrita a temperaturas muito baixas. Por exemplo, para $m/m^* \sim 0.9$, $T_{bulk}^* \sim 10^{-2} T_F$, e para $m/m^* \sim 0.6$, $T_{bulk}^* \sim 10^{-4} T_F$. Supondo que esta teoria capture os elementos básicos para descrever a transição metal-isolante em gases de elétrons bidimensionais [48, 49], estimamos que $T^* \approx 1\text{mK}$ para $m/m^* \sim 0.6$, uma vez que, nesses sistemas, $T_F \sim 10\text{K}$, uma temperatura que está bem abaixo do intervalo de temperaturas relevantes experimentalmente.

Em última instância, como o comportamento linear em T também é limitado por uma temperatura inferior que marca a entrada no regime difusivo⁹, o intervalo balístico no qual as correções elásticas predominam pode nem mesmo estar presente, sendo questionada portanto sua relevância para a interpretação de dados experimentais [47].

⁹Em termos da temperatura, o regime difusivo é definido como $T\tau_{tr} \ll 1$, ao passo que o balístico é dado por $T\tau_{tr} \gtrsim 1$.

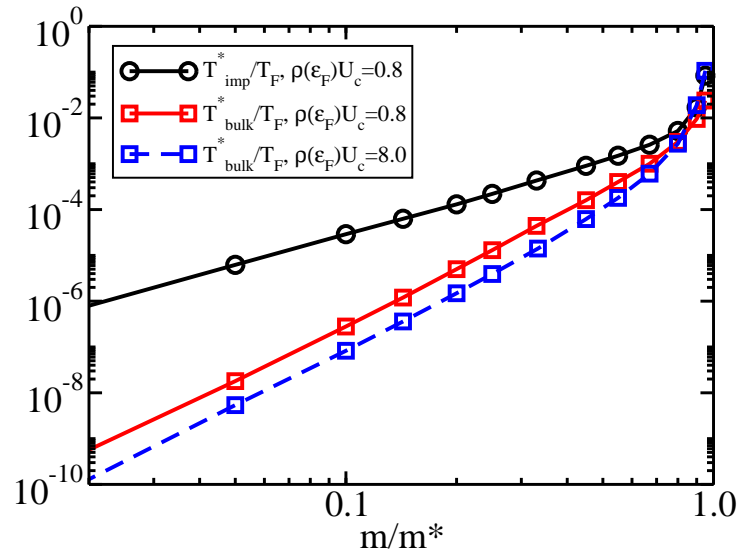


Figura 4.17: Temperaturas limitantes para o regime linear em T da resistividade $\rho(T)$ em um líquido eletrônico bidimensional como função das correlações em uma escala log-log. T_{imp}^* e T_{bulk}^* são calculadas através de duas hipóteses diferentes (veja o texto) para dois valores do parâmetro $\rho(\epsilon_F)U_c$. T_{imp}^* é basicamente independente de $\rho(\epsilon_F)U_c$, e apenas uma das curvas é mostrada. T_{bulk}^* é o “cutoff” dominante, acima do qual o comportamento linear desaparece. Aqui, utilizamos $\tau_0\epsilon_F = 10$, correspondendo a um potencial de impureza fraco. Mostrado pela primeira vez na Ref. [43].

Localização de Anderson na presença de correlações

A teoria de escala [50] do problema de localização de Anderson [19] prediz que a desordem faz com que os estados eletrônicos de sistemas não interagentes sejam todos localizados para $d \leq 2$. Para uma e duas dimensões, a condutância possui correções singulares (divergentes), um efeito conhecido como localização fraca [4, 9, 114], que a faz decrescer monotonicamente na medida em que a temperatura é baixada, levando, em última instância, a um estado isolante para $T = 0$ [50].

É natural que nos perguntemos neste ponto qual é a influência das correlações sobre este cenário. Uma das possíveis maneiras de incluirmos efeitos de interação no estudo da localização de Anderson é através de uma abordagem do tipo líquido de Fermi [10, 145], na qual as excitações de baixas energias deste metal desordenado e correlacionado são descritas por um pequeno número de parâmetros, como, por exemplo, a massa efetiva das quasipartículas e a constante de difusão. Esta descrição é válida apenas para desordem fraca, pois só trata a desordem na média. Como discutimos do Capítulo (3), o comportamento de sistemas desordenados pode ser completamente modificado pela física de eventos raros, que é ignorada neste tratamento médio.

Uma abordagem mais abrangente pode ser desenvolvida ao combinarmos o formalismo do Capítulo (3) com a teoria de escala. Dentro desta teoria de escala, a condutância ocupa um papel fundamental, pois ela é assumida como sendo a única variável relevante para este problema [50]. A condutância G é introduzida pela lei de Ohm, $I = GV$, como o fator de proporcionalidade entre a corrente total I e a queda de tensão V através do condutor, e corresponde naturalmente ao inverso da resistência R (como estamos no regime de resposta linear, $V \rightarrow 0$).

Dado o papel de destaque que a condutância ocupa no estudo da localização de Anderson, iremos adotá-la como a quantidade fundamental de nossa análise. Vimos na seção (4.2) que uma das possíveis maneiras de calcularmos a condutividade é através da fórmula de Kubo [60]. A maior parte dos trabalhos em teoria de localização utiliza este formalismo de Kubo juntamente com teoria de perturbação diagramática [4, 9, 127]. Existe, contudo, uma abordagem complementar dada pela fórmula de Meir-Wingreen [146, 147] para o cálculo da condutância, que é exata para qualquer valor de interação, temperatura ou voltagem do sistema. Para $T = 0$, e no limite de resposta linear, $V \rightarrow 0$, ela se reduz para a muito mais simples fórmula de Landauer [51, 52, 53, 54, 55], e é este formalismo que utilizaremos em nosso trabalho. Na seção (5.1), discutimos esta nossa abordagem, ao passo que na seção (5.2) a aplicamos para exemplos conhecidos a fim de mostrarmos que ela é adequada para abordarmos o problema proposto.

Uma vez calculada a condutância G , determinamos a função de escala $\beta(g) = d \ln g / d \ln L$, onde $g = Gh/2e^2$ é a condutância adimensional, para estudarmos de maneira sistemática a competição entre interação e desordem em sistemas unidimensionais.

5.1 Fórmula de Landauer

Uma das abordagens mais úteis para calcularmos a condutância vem do formalismo de Landauer [51, 52, 53, 54, 55]. Neste esquema, a corrente através de um condutor é expressa em termos da probabilidade que um elétron possui de se transmitir através dele. Este ponto de vista é muito atraente, pois parece natural que a condutância de uma amostra dependa da probabilidade com a qual portadores de cargas introduzidos em um de seus extremos cheguem

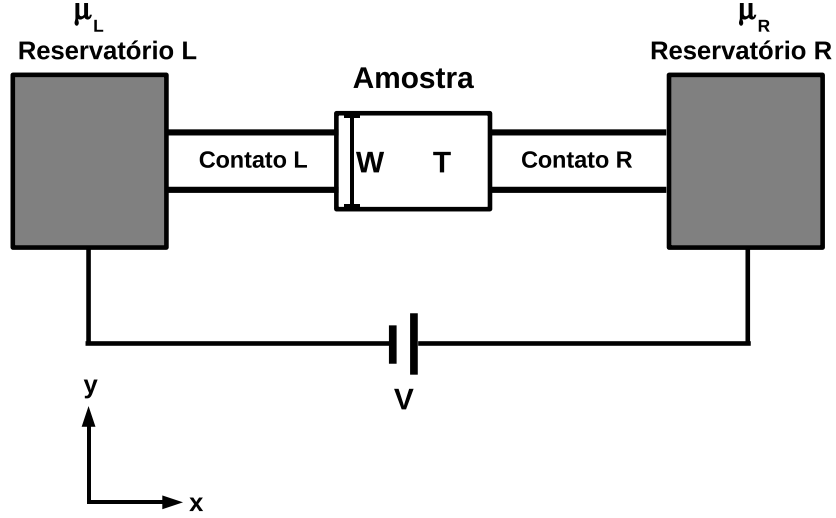


Figura 5.1: Uma amostra com probabilidade de transmissão T e seção transversal W está conectada a dois contatos L e R . Assumimos que estes contatos são condutores balísticos com M canais de condução cada um, e que estão conectados a dois reservatórios eletrônicos de partículas L e R que, por sua vez, estão sujeitos a uma diferença de potencial químico dada por $\mu_L - \mu_R = eV$, onde V é a diferença de potencial entre os reservatórios.

a seu outro extremo.

Uma derivação simples da fórmula de Landauer pode ser obtida considerando-se uma amostra conectada a dois reservatórios através de dois contatos, como na Fig. (5.1). Assumimos que estes contatos são condutores balísticos com M canais de condução cada um¹ e que T seja a probabilidade de transmissão média de um elétron através da amostra. Os reservatórios eletrônicos possuem potenciais químicos diferentes, dados por μ_L e μ_R , e assumimos que $\mu_L > \mu_R$, com $\mu_L - \mu_R = eV$, onde V é a diferença de potencial entre os reservatórios, que é a mesma quando calculada entre os contatos [54]. Além disso, consideramos que na junção dos contatos com os reservatórios os elétrons não sofrem reflexão.

Assumindo que a temperatura seja igual a zero, o fluxo de corrente ocorre apenas no intervalo de energia entre μ_R e μ_L . Deste modo, o fluxo de elétrons do condutor L para a amostra é

$$I_L^+ = \frac{2e}{h} M (\mu_L - \mu_R). \quad (5.1)$$

Já o fluxo que sai da amostra para o condutor R é dado por

$$I_R^+ = \frac{2e}{h} MT (\mu_L - \mu_R). \quad (5.2)$$

Naturalmente, o fluxo que retorna no condutor L é dado por

$$I_L^- = \frac{2e}{h} M (1 - T) (\mu_L - \mu_R). \quad (5.3)$$

A corrente em qualquer um dos condutores é dada então por

$$I = I_L^+ - I_L^- = I_R^+ = \frac{2e}{h} MT (\mu_L - \mu_R). \quad (5.4)$$

¹O número de modos transversos em uma energia E é obtido contando-se o número de modos com energia menor do que E : $M(E) = \sum_{\nu} \theta(E - \varepsilon_{\nu})$. Para um arranjo em $2d$ como o da Fig. (5.1), temos $M = 2Wk_F/\pi$; já para $3d$, temos $M = Ak_F^2/2\pi$, onde A é a área da seção transversal, com ambos resultados incluindo degenerescência de spin.

Logo, a condutância $G \equiv I/V$ é

$$G = \frac{I}{(\mu_L - \mu_R)/e} = \frac{2e^2}{h} MT. \quad (5.5)$$

Esta é a fórmula de Landauer, que relaciona a condutância do circuito mostrado na Fig. (5.1) com a probabilidade de transmissão T através da amostra.

Notamos que, mesmo para $T = 1$, caso em que temos uma amostra que conduz perfeitamente, a Eq. (5.5) fornece uma condutância, ou, equivalentemente, uma resistência finita, que é dada por

$$R_c = G_c^{-1} = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{M} \approx \frac{12.9k\Omega}{M}, \quad (5.6)$$

e que é conhecida como a resistência dos contatos, pois surge na interface entre os contatos e os reservatórios [54, 55]. Nos reservatórios, a corrente é transmitida por infinitos modos, ao passo que nos condutores, apenas por um número finito M . Esta diferença faz com que a corrente tenha que se redistribuir entre esses diferentes números de modos precisamente na interface, criando a resistência. De maneira geral, podemos escrever que

$$G_S^{-1} = G^{-1} - G_c^{-1} = \frac{h}{2e^2} \left(\frac{1}{M} - \frac{1}{MT} \right) = \frac{hM}{2e^2} \frac{T}{1-T}, \quad (5.7)$$

onde G é dada pela Eq. (5.5), G_c pela Eq. (5.6) e G_S^{-1} é a resistência apenas da amostra. Ou seja, entendemos a resistência total do sistema, obtida pela Eq. (5.5), como uma associação de resistores em série ($G^{-1} = G_S^{-1} + G_c^{-1}$), um correspondendo à amostra, e o outro, aos contatos.

Na Eq. (5.5), relacionamos a condutância em uma amostra com a probabilidade de transmissão T através dela. Neste cálculo, assumimos que todos os canais de condução possuem uma mesma probabilidade de transmissão T . Podemos agora generalizar a Eq. (5.5), levando em conta que nem todos os contatos conduzem igualmente, o que nos dá [54, 55, 148]

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr} [\mathbf{t}^\dagger(\varepsilon_F) \mathbf{t}(\varepsilon_F)] = \frac{2e^2}{h} \sum_{n=1}^M T_n(\varepsilon_F), \quad (5.8)$$

onde $T_n(\varepsilon_F) = \sum_m |t_{nm}(\varepsilon_F)|^2$ é a probabilidade de transmissão de um elétron do condutor L para o condutor R através do canal n , e $t_{nm} = [\mathbf{t}]_{nm}$ é um elemento da matriz de transmissão \mathbf{t} . Como estamos à temperatura zero, todas as quantidades são calculadas no nível de Fermi ε_F . Assim, a quantidade principal a ser calculada no formalismo de Landauer é a matriz de transmissão \mathbf{t} . Uma maneira conveniente de calcularmos \mathbf{t} é através do formalismo das funções de Green fora do equilíbrio ou formalismo de Keldysh [54, 60, 147]. Limitar-nos-emos aqui apenas a uma discussão geral acerca deste formalismo de não equilíbrio, simplesmente mostrando os principais resultados que serão utilizados em nosso trabalho.

5.1.1 Expressão geral para a corrente

Explicaremos, em seguida, a metodologia aplicada a essa abordagem de funções de Green fora do equilíbrio [146, 147] (novamente seguindo a notação da Fig. (5.1)). Consideramos que o sistema não perturbado consiste de três regiões desacopladas: os contatos L e R e a região central, referente à amostra. Nesta situação inicial, cada um dos contatos está em equilíbrio térmico e podemos associar-lhes potenciais químicos μ_L e μ_R (supondo que $\mu_L > \mu_R$). Note que a diferença entre esses potenciais químicos pode ser arbitrária. Na medida em que ligamos os acoplamentos entre os dois contatos e a amostra, uma corrente I flui do contato esquerdo para o direito. Após algum tempo, o sistema chega ao estado estacionário. Durante este processo, assumimos que os reservatórios sejam grandes o suficiente para que μ_L e μ_R não sejam alterados pela corrente I .

Por esta metodologia, vemos que podemos dividir o Hamiltoniano total do sistema em três partes

$$H = H_c + H_T + H_S, \quad (5.9)$$

onde

$$H_c = \sum_{k,\alpha \in L,R} \varepsilon_{k\alpha} d_{k\alpha}^\dagger d_{k\alpha}, \quad (5.10)$$

é o Hamiltoniano que descreve os contatos. Por simplicidade, assumiremos os contatos como metais não interagentes e limpos, cuja dispersão é dada por $\varepsilon_{k\alpha}$, com $d_{k\alpha}^\dagger$ ($d_{k\alpha}$) criando (destruindo) um elétron no canal α de momento k , tanto no contato direito quanto no esquerdo.

O Hamiltoniano H_T descreve o acoplamento entre os contatos e a região central, conectando os contatos com as bordas da amostra. Em princípio, as constantes de acoplamento dependem da configuração de cargas na região central e deveriam ser determinadas de forma autoconsistente. Não faremos esta análise aqui, e assumiremos que estes acoplamentos são conhecidos, de forma que

$$H_T = \sum_{i,k,\alpha \in L,R} \left[V_{k\alpha,i} d_{k\alpha}^\dagger c_i + \text{h.c.} \right], \quad (5.11)$$

onde $V_{k\alpha,i}$ dá a hibridização entre um estado no contato de momento k no canal α com o estado $|i\rangle$ da amostra e c_i destrói um elétron no estado $|i\rangle$ da amostra.

A forma do Hamiltoniano da região central H_S , ou da amostra, muda de acordo com o problema em questão. No nosso caso, H_S é dado pelo modelo de Hubbard desordenado, como definido na Eq. (2.70).

Utilizando este procedimento de não equilíbrio, podemos calcular a corrente I que flui pelo sistema. Este resultado foi obtido pela primeira vez na Ref. [146] e é reproduzido detalhadamente na Ref. [147]

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \text{Tr} \left[\mathbf{G}_S^\dagger(\omega) \mathbf{\Gamma}_R(\omega) \mathbf{G}_S(\omega) \mathbf{\Gamma}_L(\omega) [\text{Im}[\mathbf{\Sigma}_0(\omega)]]^{-1} [\text{Im}[\mathbf{\Sigma}(\omega)]] \right], \quad (5.12)$$

onde $f_{L(R)}(\varepsilon)$ é a função distribuição de Fermi-Dirac, não perturbada, do contato $L(R)$. $\mathbf{\Gamma}_{L(R)}(\varepsilon)$ é a matriz de acoplamento entre o contato $L(R)$ e o condutor, cujos elementos são dados por

$$[\mathbf{\Gamma}_{L(R)}(\omega)]_{ij} = 2\pi \sum_{\alpha \in L(R)} \rho_\alpha(\omega) V_{\alpha,i}(\omega) V_{\alpha,j}^*(\omega), \quad (5.13)$$

onde $\rho_\alpha(\omega)$ é a densidade de estados no condutor para o canal α e $V_{\alpha,i}(\omega) = V_{k\alpha,i}$ para $\omega = \varepsilon_{k\alpha}$. Já a matriz $\mathbf{G}_S(\omega)$ dá a função de Green da amostra na presença dos contatos, e é escrita como

$$\mathbf{G}_S(\omega) = [(\omega + \mu) \mathbf{1} - \mathbf{H}_S^0 - \mathbf{\Sigma}(\omega)]^{-1}, \quad (5.14)$$

com a autoenergia dada por

$$\mathbf{\Sigma}(\omega) = \mathbf{\Sigma}_S(\omega) + \mathbf{\Sigma}_0(\omega), \quad (5.15)$$

e

$$\mathbf{\Sigma}_0(\omega) = \mathbf{\Sigma}_L(\omega) + \mathbf{\Sigma}_R(\omega), \quad (5.16)$$

onde μ é o potencial químico da amostra e \mathbf{H}_S^0 é o seu Hamiltoniano não interagente. $\mathbf{\Sigma}_S(\omega)$ é a autoenergia eletrônica que contém os efeitos da correlação eletrônica e $\mathbf{\Sigma}_{L(R)}(\omega)$ é a autoenergia que descreve o acoplamento entre a região central e o contato $L(R)$. Diferentemente de $\mathbf{\Sigma}_S(\omega)$, que geralmente é obtida de maneira aproximada, $\mathbf{\Sigma}_{L(R)}(\omega)$ é conhecida de maneira exata, como mostraremos a seguir. A relação entre $\mathbf{\Sigma}_{L(R)}(\varepsilon)$ e $\mathbf{\Gamma}_{L(R)}(\omega)$ é dada por [54]

$$\mathbf{\Gamma}_{L(R)}(\omega) = -2\text{Im}[\mathbf{\Sigma}_{L(R)}(\omega)] > 0. \quad (5.17)$$

Para temperatura zero e no regime de resposta linear, apenas o espalhamento elástico é permitido por conservação de energia, como discutido na seção (4.1), o que faz com que $\text{Im}[\mathbf{\Sigma}(\varepsilon_F)] = \text{Im}[\mathbf{\Sigma}_0(\varepsilon_F)]$, e a Eq. (5.12) reduz-se assim a

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \text{Tr} \left[\mathbf{G}_S^\dagger(\omega) \mathbf{\Gamma}_R(\omega) \mathbf{G}_S(\omega) \mathbf{\Gamma}_L(\omega) \right]. \quad (5.18)$$

Como estamos no regime de resposta linear, podemos escrever $\mu_L = \mu$ e $\mu_R = \mu - eV$. Usando estas expressões e lembrando que estamos a temperatura zero, obtemos $f_L(\omega) - f_R(\omega) \approx \delta(\omega - \varepsilon_F) eV$, donde

$$I \simeq \frac{e^2}{h} \text{Tr} \left[\mathbf{G}_S^\dagger(\varepsilon_F) \mathbf{\Gamma}_R(\varepsilon_F) \mathbf{G}_S(\varepsilon_F) \mathbf{\Gamma}_L(\varepsilon_F) \right] V. \quad (5.19)$$

Como $I = GV$, e utilizando a Eq. (5.8), escrevemos

$$G = \frac{2e^2}{h} T(\varepsilon_F), \quad (5.20)$$

onde a função de transmissão é dada por

$$T(\varepsilon_F) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{G}_S^\dagger(\varepsilon_F) \mathbf{\Gamma}_R(\varepsilon_F) \mathbf{G}_S(\varepsilon_F) \mathbf{\Gamma}_L(\varepsilon_F) \right]. \quad (5.21)$$

Comparando a Eq. (5.21) com a Eq. (5.8), vemos que podemos escrever a matriz de transmissão \mathbf{t} da seguinte maneira

$$\mathbf{t} = \sqrt{\mathbf{\Gamma}_R(\varepsilon_F)} \mathbf{G}_S(\varepsilon_F) \sqrt{\mathbf{\Gamma}_L(\varepsilon_F)}, \quad (5.22)$$

onde utilizamos a propriedade cíclica do traço, e que $\mathbf{\Gamma}_{L(R)}(\varepsilon_F) \geq 0$, Eq. (5.17).

Logo, vemos que a fórmula de Landauer para condutância no regime linear vale não apenas para o caso não interagente, mas também para o caso interagente à temperatura zero. Para temperaturas finitas ou para voltagens finitas, processos inelásticos têm que ser levados em conta e a fórmula de Landauer deixa de valer.

5.1.2 Condutância em um modelo de rede

Aplicamos agora o formalismo de transporte acima desenvolvido a um modelo de rede. Como de praxe, utilizaremos o modelo de Hubbard desordenado, Eq. (2.70), em um rede hipercúbica d dimensional de comprimento linear L . Nos termos da Fig. (5.1), assumimos que os contatos $L(R)$ são redes semi-infinitas descritas pelo Hamiltoniano da Eq. (2.62) com $U = 0$, $\varepsilon_i = 0$ e $t_{ij} = t_c$. Esses contatos estão acoplados com a amostra através de um “hopping” t_T .

A função de Green total nosso sistema é dada por

$$\mathbf{G}(\omega) = [(\omega + \mu - i0^+) \mathbf{1} + \mathbf{H}]^{-1}, \quad (5.23)$$

onde H é dado pela Eq. (5.9). O cálculo direto da inversa é impossível, pois nosso sistema é infinito, uma vez que consideramos um sistema aberto que se acopla a contatos que se estendem até o infinito. Se simplesmente truncarmos essa matriz em um certo ponto, descreveremos um sistema com condições de contorno refletoras, ao invés de um sistema aberto no qual os elétrons podem entrar e sair. Este truncamento deve ser feito de maneira mais cuidadosa, Ref. [54, 149], tal que os efeitos dos contatos sejam introduzidos através de uma autoenergia, descrevendo seu acoplamento com a amostra finita, como antecipado pela Eq. (5.7).

Para simplificar a discussão, consideramos que a amostra está conectada a apenas um contato $L(R)$. Podemos particionar a função de Green total, Eq. (5.23), em submatrizes da seguinte forma

$$\mathbf{G}(\omega) = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{L(R)} & \mathbf{G}_{L(R)-S} \\ \mathbf{G}_{S-L(R)} & \mathbf{G}_S \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{L(R)}^{-1} & \mathbf{H}_T \\ \mathbf{H}_T^\dagger & \mathbf{g}_S^{-1} \end{bmatrix}^{-1}, \quad (5.24)$$

Aqui, $\mathbf{g}_{L(R)}^{-1} = [(\omega + \mu - i0^+) \mathbf{1} + \mathbf{H}_{L(R)}]$ representa o contato L isolado e $\mathbf{g}_S^{-1} = [(\omega + \mu - i0^+) \mathbf{1} + \mathbf{H}_S]$ é a função de Green da amostra também isolada. Novamente, seguimos a notação da Eq. (5.9). A partição acima segue da separação intrínseca dos estados no espaço de Hilbert, causada pela separação entre a amostra e os contatos no espaço definido pelos estados da rede. Os blocos diagonais são a matriz infinita $\mathbf{G}_{L(R)}$, conectando os sítios no contato $L(R)$, e a matriz finita \mathbf{G}_S , conectando os sítios dentro da amostra. Os blocos não diagonais $\mathbf{G}_{L(R)-S}$ e $\mathbf{G}_{S-L(R)}$ conectam os estados do contato com os da amostra.

Escrevendo que $\mathbf{H}\mathbf{G}(\omega) = \mathbf{1}$ e utilizando a Eq. (5.24), temos

$$\mathbf{g}_{L(R)}^{-1} \mathbf{G}_{L(R)-S} + \mathbf{H}_T \mathbf{G}_S = \mathbf{0}, \quad (5.25)$$

$$\mathbf{H}_T^\dagger \mathbf{G}_{L(R)-S} + \mathbf{g}_S^{-1} \mathbf{G}_S = \mathbf{1}, \quad (5.26)$$

e, resolvendo para \mathbf{G}_S , obtemos

$$\mathbf{G}_S = \left[\omega + \mu - \mathbf{H}_S - \mathbf{H}_T^\dagger \mathbf{g}_{L(R)} \mathbf{H}_T \right]^{-1}. \quad (5.27)$$

Notamos que $\mathbf{g}_{L(R)}$ ainda é uma matriz infinita, contudo ela pode ser calculada exatamente para um Hamiltoniano do tipo “tight binding” que consideramos aqui [149]. Como resultado final, temos a função de Green da amostra finita, na qual todas as informações acerca dos contatos entram através de uma autoenergia, Eqs. (5.14)-(5.17), e que é dada por

$$\Sigma_{L(R)}(\omega) = \mathbf{H}_T^\dagger [(\omega + \mu)\mathbf{1} + \mathbf{H}_{L(R)}]^{-1} \mathbf{H}_T. \quad (5.28)$$

Uma vez que a autoenergia produz uma parte imaginária bem definida, omitimos o agora irrelevante fator de convergência $i0^+$. Esta autoenergia é diferente de zero apenas para sítios da borda da amostra, devido à forma de \mathbf{H}_T . Sendo a amostra conectada a vários contatos, devemos então somar as autoenergias geradas por cada um deles. Como consideramos dois contatos, a forma final da autoenergia é aquela já apresentada na Eq. (5.16), com cada um de seus termos dado, naturalmente, pela Eq. (5.28).

Estas autoenergias medem o acoplamento da amostra com os contatos e podem ser relacionadas ao tempo que o elétron permanece dentro da amostra antes de escapar para um dos contatos. Para vermos isso, considere o seguinte argumento. Temos um sistema aberto cercado por condutores perfeitos, caso em que não podemos falar em autoestados. Contudo, podemos ainda definir um Hamiltoniano efetivo que aparece na definição de G_S em (5.27)

$$\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H}_S + \Sigma_0(\varepsilon_F). \quad (5.29)$$

Naturalmente, \mathbf{H}_{eff} não é mais um operador Hermiteano e a probabilidade total não é conservada. Mesmo assim, ainda podemos diagonalizá-lo, definindo autoestados pela esquerda e pela direita, bem como autoenergias que, de modo geral, são complexas

$$\mathbf{H}_{eff} |\Psi_\alpha^{eff}\rangle = E_\alpha^{eff} |\Psi_\alpha^{eff}\rangle, \quad (5.30)$$

onde

$$E_{eff}^\alpha = E_\alpha - \zeta_\alpha' - i\frac{\zeta_\alpha}{2}, \quad (5.31)$$

com E_α correspondendo às autoenergias do sistema isolado definido por \mathbf{H}_S . Assim, a parte imaginária ζ_α determina a taxa de decaimento de um elétron no estado (canal) α , antes de ele escapar para os contatos. A probabilidade de um elétron permanecer no estado α após um tempo t é dada por $|\langle \Psi_\alpha^{eff}(0) | \Psi_\alpha^{eff}(t) \rangle|^2$, que decai como $|\exp(-iE_\alpha^{eff}t/\hbar)|^2 = |\exp(-\zeta_\alpha t/\hbar)|^2$ e, portanto, a meia-vida do elétron dentro do condutor, no estado α , é $\tau_\alpha = \hbar/2\zeta_\alpha$.

5.1.3 Aproximação de banda larga e inclusão das interações

Na última seção, conseguimos eliminar os contatos semi-infinitos pela introdução de autoenergias. Ainda nos falta, contudo, determinar a forma exata de $\Sigma_{L(R)}(\omega)$. Utilizaremos aqui o que é conhecido como aproximação de banda larga, na qual assumimos que a amplitude de “hopping” dentro dos contatos $t_c \gg D$, onde $D = dt$ é a meia-largura de banda dentro da amostra, sendo d a dimensão do sistema e t a amplitude de “hopping” dentro da amostra. Isso equivale a assumirmos a densidade de estados do condutor como constante. Esta aproximação nos fornece autoenergias puramente imaginárias e constantes

$$\Sigma_{L(R)}(\omega) = -i\frac{\eta}{2}\mathbf{B}_{L(R)}, \quad (5.32)$$

onde a matriz $\mathbf{B}_{L(R)}$ vale 1 para sítios na borda da amostra que estão conectados aos contatos, e 0 caso contrário. Esta constante η entra como mais um parâmetro da teoria e modela todo o nosso contato. Em breve, mostraremos não apenas que esta aproximação simplifica consideravelmente nossos cálculos, mas que é também bem definida para o problema que nos propomos a resolver.

Para considerarmos efeitos de correlação dentro de nossa amostra, utilizaremos a aproximação de campo médio de bósons escravos, cuja autoenergia é dada pela Eq. (2.111) (uma abordagem mais completa, empregando TDCM juntamente com um cálculo de estrutura banda, é discutida na Ref. [150]). Utilizando as Eqs. (5.14)-(5.17), juntamente com a Eqs. (2.111) e (5.32), temos que

$$\mathbf{G}_S(\omega) = \sqrt{\mathbf{Z}} \left[\omega\mathbf{1} - \mathbf{Z}\mathbf{v} - \sqrt{\mathbf{Z}}\mathbf{H}_S^0\sqrt{\mathbf{Z}} + i\frac{\eta}{2}\sqrt{\mathbf{Z}}(\mathbf{B}_L + \mathbf{B}_R)\sqrt{\mathbf{Z}} \right]^{-1} \sqrt{\mathbf{Z}}. \quad (5.33)$$

Esta equação ilustra bem o porquê do uso de uma autoenergia constante ser conveniente. Com ela, podemos determinar a função de Green ainda através da diagonalização de um Hamiltoniano efetivo, Eq. (5.29). O que muda é que agora temos uma matriz que não é mais Hermiteana. Pela Eq. (5.33), notamos também que precisamos resolver as equações que determinam as amplitudes dos bósons escravos na presença dos contatos (codificados por suas autoenergias), pois não é somente a amplitude de “hopping” dentro da amostra que é renormalizada pelas correlações, mas também o acoplamento entre a amostra e os contatos.

A condutância é obtida através da função de transmissão dada pela Eq. (5.21), a qual utilizando as Eqs. (5.32) e (5.17), podemos reescrever da seguinte forma

$$T(\varepsilon_F) = \frac{1}{2}\eta^2 \text{Tr} \left[\mathbf{G}_{1N}(\varepsilon_F) \mathbf{G}_{N1}^\dagger(\varepsilon_F) \right], \quad (5.34)$$

onde \mathbf{G}_{1N} é a função de Green da amostra que conecta a camada 1 (conectada ao contato L) à camada N (conectada ao contato R). Embora um primeiro olhar sobre a Eq. (5.21) sugira que todos os elementos de \mathbf{G}_S estejam envolvidos no cálculo, apenas aqueles citados acima, conectando as bordas da amostra, aparecem. Este resultado é geral [54, 149], e deve-se ao fato de que as matrizes $\mathbf{\Gamma}_{L(R)}$ só possuem elementos não nulos entre as camadas 1 e N da amostra. Portanto, a expressão dentro do traço da Eq. (5.34) é avaliada apenas neste subespaço gerado pelos orbitais nos dois extremos da amostra. Isto está de acordo com o espírito da fórmula de Landauer, que consiste em calcular a condutância sem se preocupar com o estados internos da amostra.

5.2 Aplicações iniciais do formalismos de Landauer

Antes de investigarmos a competição entre desordem e interação para valores arbitrários de U e W , verificaremos que o procedimento descrito na seção anterior contém todos os elementos para descrevermos este problema, estudando separadamente as transições metal-isolante de Mott ($W = 0$ e $U \neq 0$) e de Anderson ($W \neq 0$ e $U = 0$).

5.2.1 Transição de Mott na presença dos contatos

Quando utilizamos condições periódicas de contorno, podemos calcular o valor crítico de interação U_c , para o qual o sistema sofre uma transição de Mott, utilizando a Eq. (3.30). Concentraremos nossa discussão no caso de uma rede cúbica de dimensão linear L (medida com relação ao espaçamento de rede a), onde encontramos que $U_c \simeq 16.04t$.

Na presença dos contatos a situação fica diferente, pois agora o arranjo da Fig. (5.1) pode ser pensado como uma heteroestrutura, na qual acoplamos um metal correlacionado (a parte central) a dois metais não interagentes (descrevendo os contatos). O que acontece aqui é que, mesmo quando a parte central possui $U > U_c$, ainda temos $Z \neq 0$, pois o metal consegue penetrar o isolante de Mott [138, 139]. Este resultado pode ser entendido à luz da teoria descrita na seção (4.3), onde descrevemos o comportamento de uma única impureza em um metal correlacionado. Pela Fig. (4.8) e pela Eq. (4.71) vemos que a presença de uma impureza no sítio o (com energia ε_o) tira este sítio da situação de semipreenchimento, fazendo com que $Z(\varepsilon_o) > Z(0)$ e, conseqüentemente, torna este sítio mais metálico. À medida que U aumenta, vimos que esta “metalização” tende a se espalhar pela rede. Aqui ocorre o mesmo fenômeno, só que em vez de uma impureza temos os planos $x = 1$ e $x = L$, que são metálicos devido aos contatos. Esta imagem é corroborada pela Fig. (5.2), onde vemos que $Z(x) \sim e^{-x/\xi}$, em concordância com a Eq. (4.71), e que este comprimento de correlação ξ possui um expoente crítico do tipo campo médio $\nu = 0.52 \pm 0.02$, exatamente como aquele determinado pela Eq. (4.72). O processo físico que domina esta interface entre o metal e o isolante de Mott é o efeito Kondo. Os momentos magnéticos localizados que se formam no isolante de Mott são blindados quando entram em contato com o metal, tornando-se assim parte deste metal. Este mecanismo é contudo ineficiente, pois para termos $\xi \approx 10$, precisaríamos ficar muito próximos da transição de Mott, com $(U - U_c)/U_c \approx 10^{-4}$.

5.2.2 Teoria de escala e a transição de Anderson

Em um trabalho pioneiro [19], Anderson mostrou que estados eletrônicos em um meio desordenado não interagente podem ser profundamente modificados para valores de desordem suficientemente grande. Dentro da visão tradicional da teoria de metais [3], esperamos que os estados (ondas) de Bloch sofram espalhamentos devido à desordem do meio, mas que estes estados ainda assim permaneçam estendidos sobre todo o sistema. O que Anderson mostrou é que existe um valor crítico de desordem W_c acima do qual todos os estados eletrônicos são localizados no espaço, ou

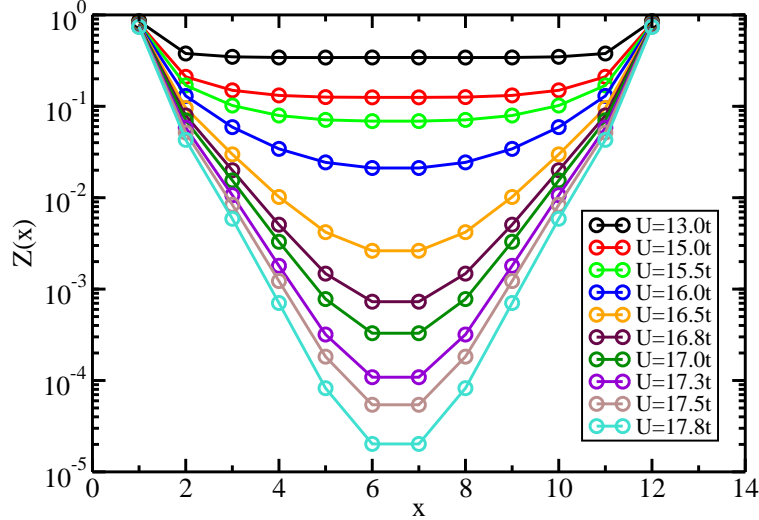


Figura 5.2: Corte no plano (y, z) do perfil espacial do peso de quasipartícula Z em uma rede cúbica como função da posição x no metal correlacionado, onde em $x = 1$ e $x = L$ temos a presença dos contatos metálicos. Vemos que, mesmo para $U > U_c$, onde $U_c = 16.04t$, $Z(x) \sim e^{-x/\xi} > 0$, pois o metal consegue penetrar no isolante de Mott. Este comprimento de correlação é dado por $\xi^{-1} \sim (U - U_c)^{0.52 \pm 0.02}$. Aqui temos $t = 1$, $\eta = 1.5t$, $W = 0$ e $L = 12$.

seja, a função de onda de um elétron localizado em um ponto \mathbf{r}_0 do espaço decai exponencialmente a partir deste ponto

$$|\psi(r)| \sim \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/\xi), \quad (5.35)$$

onde ξ é conhecido como comprimento de localização. Esta transição entre estados estendidos e localizados por efeitos de desordem é conhecida como transição metal-isolante de Anderson [9].

A teoria padrão corrente para o estudo do problema de localização de Anderson é a teoria de escala [50]. Esta teoria assume que o único parâmetro relevante para descrever a localização em um sistema é a condutância adimensional g

$$g = \frac{G}{2e^2/h}, \quad (5.36)$$

que, pela Eq. (5.20), vemos que nada mais é do que a matriz de transmissão deste sistema. A condutância g é sensível a efeitos de localização, pois em um metal (isolante) ela aumenta (diminui) monotonicamente com o tamanho L do sistema, como discutimos a seguir.

A condutância g_0 , definida na escala de comprimento do livre caminho médio l , é uma medida microscópica da desordem, pois é pequena se a desordem é grande e vice-versa. O ponto é que $g(L)$ possui dois limites assintóticos bem diferentes para $L \gg l$, dependendo do valor da desordem microscópica. Para estados estendidos, vale a lei de Ohm e podemos escrever, assumindo que $L \gg l$

$$g(L) = \sigma L^{d-2}, \quad (5.37)$$

onde σ é a condutividade do sistema, que é uma quantidade intensiva, independente de L . Já para estados localizados, podemos escrever que

$$g(L) \propto e^{-L/\xi}, \quad (5.38)$$

assumindo que $L \gg \xi$, e de maneira geral, temos que $\xi > l$. Para dado valor de desordem, na medida em que L fica maior que l , $g(L)$ evolui de maneira suave a partir de g_0 , indo para uma das formas assintóticas dada pelas Eq. (5.37) e (5.38).

A teoria de escala descreve o comportamento de $g(L)$ com L para os todos $L \gg l$, em várias dimensões. Na Ref. [50], os autores argumentam que a quantidade $\beta(g) = d \ln g / d \ln L$ é uma função apenas da condutância g . A ideia é

que uma mudança na desordem efetiva quando o sistema se torna maior é determinada pelo valor da desordem na escala de comprimento anterior e que a condutância é a única medida da desordem. $\beta(g)$ é conhecida como função de escala para a condutância. Como trabalhamos com sistemas finitos, supomos que $\beta(g)$ seja uma função contínua e que cresça monotonicamente com g para espalhamentos do tipo potencial (independentes do spin) considerados aqui. Seus regimes assintóticos podem ser obtidos a partir das Eqs. (5.37) e (5.38), donde vem que

$$\beta(g) = d - 2 \quad (5.39)$$

no regime ôhmico, que assumimos válido para $g \gg g^*$, onde g^* é uma condutância característica do sistema que determina o “crossover” entre o limite ôhmico (Eq. (5.37)) e o não ôhmico de g (Eq. (5.38)). Podemos também calcular correções perturbativas ao valor de g utilizando a chamada teoria de localização fraca [9, 114]

$$\beta(g) = (d - 2) - \frac{g^*}{g}. \quad (5.40)$$

Portanto, vemos que $\beta(g)$ é sempre menor do que seu valor ôhmico. Para o regime não ôhmico, $\beta(g)$ é dada por

$$\beta(g) = \ln\left(\frac{g}{g^*}\right), \quad (5.41)$$

Neste limite, vemos que a função de escala $\beta(g)$, além de ser independente da dimensionalidade, é sempre negativa, o que corresponde a uma diminuição de g ao aumentarmos a escala L .

A teoria de escala prediz que a transição metal-isolante ocorra para uma condutância $g_c = g(W_c)$, na qual $\beta(g_c) = 0$. Esta condutância crítica g_c é invariante sob mudanças de escala. A menor dimensão na qual temos a transição de Anderson é $d = 3$ [50]. Para $d \leq 2$, a interferência destrutiva entre as funções de onda eletrônicas, causada por efeitos de retroespalhamento [114], faz com que todos os estados eletrônicos sejam localizados para qualquer quantidade de desordem no limite $L \rightarrow \infty$. Já a dimensão crítica superior para esta transição, aquela dimensão acima da qual a aproximação de campo médio torna-se exata, é $d = \infty$ [151, 152]. Dentro desta abordagem, a transição de Anderson é vista como uma transição de fase de segunda ordem com expoentes críticos s , ν caracterizando, respectivamente, como a condutividade $\sigma \propto |W - W_c|^s$ vai a zero e como o comprimento de correlação $\xi \propto |W - W_c|^{-\nu}$ diverge quando nos aproximamos da desordem crítica W_c .

5.2.2.1 Transição de Anderson em $3d$

Podemos aplicar o formalismo desenvolvido anteriormente para o estudo da transição metal-isolante em $d = 3$ utilizando as ideias da teoria de escala. Consideraremos o modelo de Hubbard desordenado, Eq. (2.70), com $U = 0$ (que se reduz ao modelo tight-binding) em uma rede cúbica de lado L (medido com relação ao espaçamento de rede a). Este sistema é muito bem estudado [151, 153, 154] e conhecemos precisamente tanto W_c quanto os expoentes críticos, o que nos permite uma confrontação direta contra nossos resultados. Consideramos condições abertas de contorno na direção \hat{x} , pois acoplamos nossos contatos aos planos $x = 1$ e $x = L$. Já nas direções \hat{y} e \hat{z} consideramos, por simplicidade, condições periódicas de contorno. Rodamos o código para $L = 4, 6, 8, 10$ e 12 considerando 1000 realizações de desordem (cada realização corresponde a uma amostra diferente) e calculamos o valor típico da condutância g_{typ} na energia de Fermi. Consideramos o valor típico e não o valor médio de g porque sua distribuição é muito larga [54, 149, 155] e seu valor mais provável é dado por seu valor típico, e não pelo médio. Voltaremos a este ponto na próxima subseção.

De modo geral, não sabemos a localização precisa de W_c , ou o valor dos expoentes críticos s e ν , e nossa abordagem é baseada no escalamento de tamanho finito [11]. O fato de considerarmos tamanhos finitos de rede faz com que L introduza um limite na escala de comprimento do sistema, pois mesmo que um estado eletrônico seja localizado, ele será efetivamente estendido se tivermos $\xi > L$. Isso faz com a que a transição de Anderson fique “arredondada”, e que não seja claro onde ela de fato ocorre.

Nosso procedimento começa utilizando o fato de que $g_c = g_{typ}(W_c)$ é invariante sob mudanças de escala, ou seja, o valor da condutância para o qual a transição de Anderson ocorre não depende de L . Assim, podemos ter uma ideia de onde W_c se localiza fazendo gráficos de g_{typ} como função de W para vários L , como mostrado na Fig. (5.3). O ponto no qual todas as curvas se cruzam define W_c . Pela Fig. (5.3), temos que $W_c \approx 16.5t$, o que coincide com o valor aceito [151, 154]. Os próximos passos de nossa abordagem podem ser sistematizados da seguinte maneira:

1. Fazemos um gráfico de g_{typ} como função de L^{-1} para vários valores de W em uma escala log-log, como na Fig. (5.3);

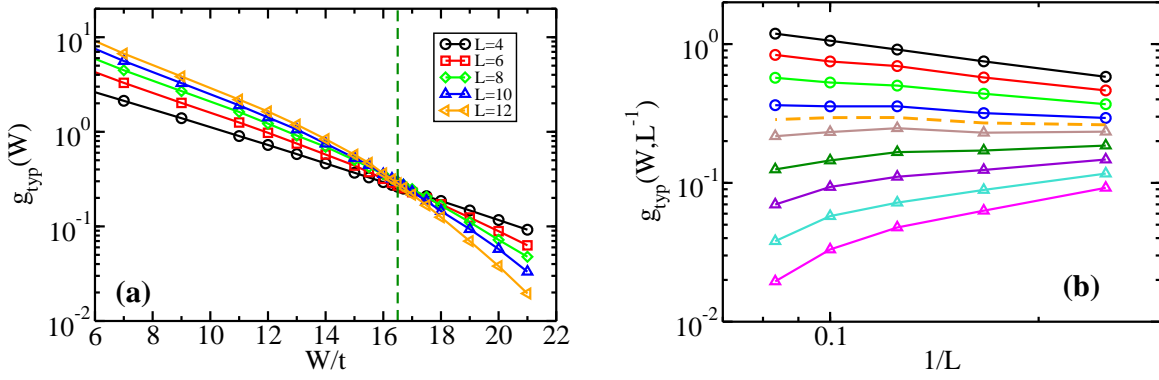


Figura 5.3: **(a)** Valor típico da condutância g_{typ} em rede cúbica como função da desordem W (medida em unidades da amplitude de “hopping” t) para vários valores do comprimento linear do sistema L (medido com relação ao espaçamento de rede). Como $g_c = g_{typ}(W_c)$ é invariante sob mudanças de escala, o ponto no qual todas as curvas se cruzam define $W_c \approx 16.5t$ (linha tracejada vertical). **(b)** g_{typ} como função de L^{-1} para $W = 13t - 21t$, contando de cima para baixo, em uma escala log-log. A curva tracejada corresponde a $W = W_c = 16.5t$. Como esperado pelas Eqs. (5.37) e (5.38), g_{typ} aumenta com L no lado metálico e diminui no lado isolante. Note que aqui a resistência dos contatos está incluída, uma vez que para estes valores de desordem ela pode ser desprezada, dado que $g_s^{-1} \approx g_c^{-1} \gg g_c^{-1}$, Eq. (5.7). Aqui, temos $t = 1$, $\eta = 1.5t$, $U = 0$ e 10^3 realizações de desordem.

2. Pelas Eqs. (5.37) e (5.38), vemos que, na fase metálica, g_{typ} tende a aumentar linearmente com L , o que faz com as curvas curvem-se para cima para L grande. Já na fase isolante, g_{typ} decai exponencialmente com L e as curvas curvam-se para baixo para L grande, Fig. (5.3);
3. Somente para $W = W_c$, g_{typ} é independente de L . Ao dividirmos todas as curvas por $g_{typ}(W_c, L^{-1})$, esta curva crítica torna-se uma reta horizontal de valor 1 e todas as outras espalham-se a seu redor, Fig. (5.4);
4. O último passo envolve colapsarmos todas as curvas através de um reescalamto do eixo horizontal, o que, na escala log-log, corresponde a deslocarmos as curvas resultantes para a esquerda ou para a direita. O fator utilizado para este reescalamto, que é naturalmente diferente para cada valor de W , define o comprimento de localização $\xi(W)$ a menos de uma constante, o que nos permite o cálculo do expoente crítico ν , Fig. (5.4).

Uma vez realizado este processo de escalamento de tamanho finito, vemos que todas as curvas, como função de ξ/L , caem em dois ramos. Um dos ramos corresponde à solução metálica, e o outro, naturalmente, à isolante, Fig. (5.4). Deste escalamento, obtemos que $\nu = 1.51 \pm 0.02$, que também é consistente com o valor aceito de 1.58 [154].

Para este estudo da transição de Anderson em $3d$, não precisamos levar em conta a resistência dos contatos, uma vez que para estes valores de desordem ela pode ser desprezada, dado que $g_s^{-1} \gg g_c^{-1}$. Contudo, quando trabalhamos com $W \ll D$, onde D é a semilargura de banda do sistema limpo, essa resistência dos contatos g_c^{-1} passa a ser importante. Na Fig. (5.5), mostramos como essa resistência dos contatos depende de L para uma rede cúbica: $g_c = L^2$, precisamente como esperado pela Eq. (5.6).

5.2.2.2 Localização de Anderson em $1d$

Estudaremos agora o caso unidimensional. Como discutido acima, todos os estados eletrônicos são localizados em uma dimensão para qualquer valor de desordem [50] e nosso estudo fica concentrado apenas na fase isolante. Nosso objetivo principal aqui é construir a função de escala $\beta(g)$. Pelas Eqs. (5.40) e (5.41), vemos que $\beta(g)$ é sempre menor que -1 , o que implica que não importa qual seja o valor inicial de g , ele sempre diminui com o aumento de L , fazendo com que se chegue rapidamente ao regime localizado. Para o estudo de uma rede unidimensional temos também que levar em consideração a resistência dos contatos g_c^{-1} , uma vez que $W_c = 0$. Naturalmente, g_c não depende de L , pois não há modos transversos, e para $\eta = 1.0t$ e $t = 1.0$, encontramos $g_c = 1.0$. Sempre trabalharemos com a condutância do sistema g_S , que é definida pela Eq. (5.7).

Como enfatizado pela primeira vez na Ref. [155], a condutância de uma determinada amostra flutua fortemente, e sua função de distribuição $P(g_S)$ vai se tornando mais larga na medida em que L aumenta. Podemos verificar este fato por meio de simulações numéricas. Na Fig. (5.6), mostramos que g_S possui uma distribuição log-normal,

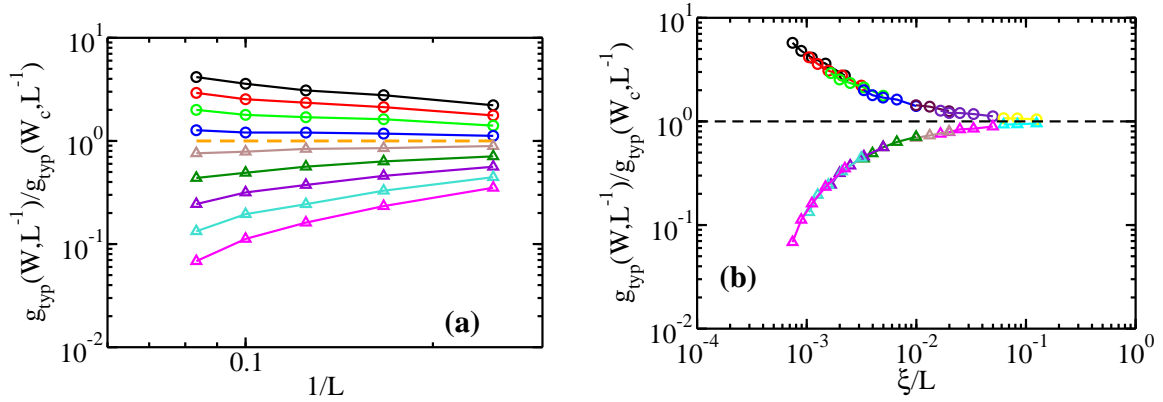


Figura 5.4: **(a)** Valor típico da condutância $g_{typ}(W, L^{-1})$ em uma rede cúbica, como função de L^{-1} , normalizado por $g_{typ}(W_c, L^{-1})$ para vários valores de W em uma escala log-log. Os círculos correspondem a $W < W_c$, e os triângulos, a $W > W_c$. **(b)** Novamente $g_{typ}(W, L^{-1})$ normalizado por $g_{typ}(W_c, L^{-1})$ em uma escala log-log, só que agora como função de ξ/L para vários valores de W . O comprimento de localização ξ é obtido ao realizarmos o colapso das curvas apresentadas em (a). Vemos claramente que todas as curvas se distribuem em dois ramos, com o de cima correspondendo à solução metálica, e o de baixo, à isolante. Aqui, temos $t = 1$, $\eta = 1.5t$, $U = 0$ e 10^3 realizações de desordem.

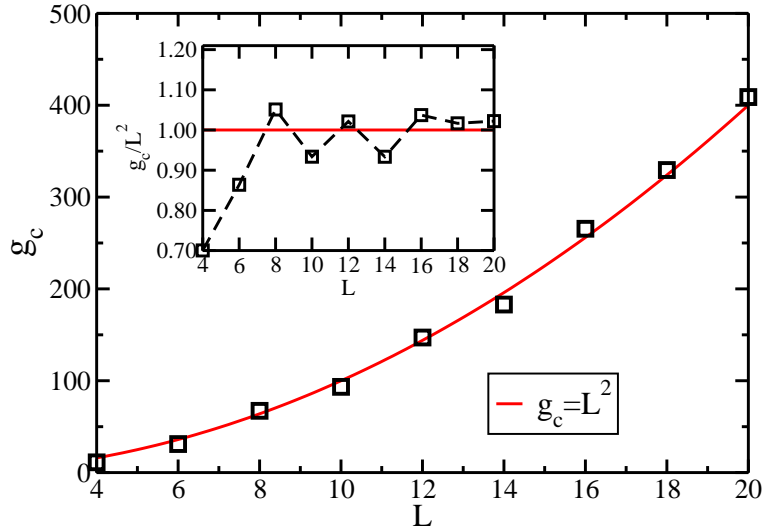


Figura 5.5: Condutância dos contatos g_c como função do comprimento linear L para uma rede cúbica. Pela Eq. (5.6) esperamos que g_c seja dada pelo número de modos transversos, o que, no presente caso, nada mais é do que L^2 . A inserção mostra g_c/L^2 como função de L , indicando que, para $L > 4$, esta quantidade de fato oscila em torno do valor esperado 1. Aqui, temos $t = 1$, $\eta = 1.5t$ e $W = 0$.

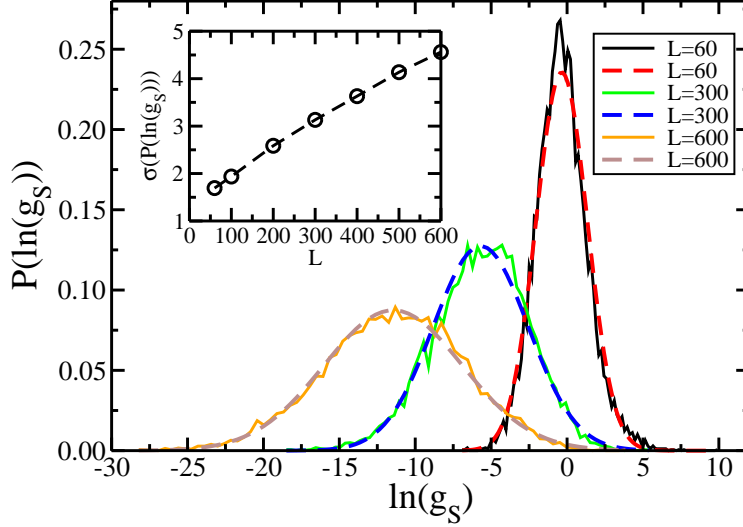


Figura 5.6: Distribuição de probabilidade $P(\ln g_S)$ do logaritmo da condutância do sistema g_S para três tamanhos L de uma cadeia unidimensional. As linhas tracejadas são distribuições Gaussianas ajustadas com a média e variância dos dados numéricos para realçar o fato de que g_S possui uma distribuição log-normal. Na inserção, mostramos como a variância de $P(\ln g_S)$ aumenta com o tamanho da rede. Aqui temos $t = 1$, $\eta = 1.0t$, $U = 0$ e consideramos 10^4 realizações de desordem.

ou seja, $P(\ln g_S)$ é uma Gaussiana. Sabendo como g_S é distribuída, podemos calcular as flutuações ao redor de seu valor médio [156]

$$\Delta g_S \equiv \frac{\overline{g_S}}{\sqrt{\text{var}[g_S]}} = \sqrt{e^{\sigma^2} - 1}, \quad (5.42)$$

onde $\overline{g_S}$ denota a média de g_S , $\text{var}[g_S]$ é a variância de g_S e $\sigma = \text{var}[\ln g_S]$. Como σ aumenta com L , Fig. (5.6), vemos que as flutuações ao redor da média de g_S aumentam exponencialmente com o tamanho do sistema, fazendo com que o valor médio não dê uma boa medida da condutividade. Isso é consequência do fato de $P(g_S)$ ser muito larga, o que faz com que haja uma probabilidade pequena, mas finita, de encontrarmos grandes valores de g_S . Tais valores, embora altamente improváveis, dominam o valor médio $\overline{g_S}$, fazendo com que ele não seja uma boa medida da condutância mais provável das amostras. O valor mais provável de g_S , ou seu valor típico, é, na verdade, dado pela sua média geométrica $g_{\text{typ}} = \exp[\overline{\ln g_S}]$, onde $\overline{\ln g_S}$ denota o valor médio de $\ln g_S$.

Aplicando o algoritmo de escalamento de tamanho finito, encontramos a curva $g_{\text{typ}}(L/\xi)$ mostrada na Fig. (5.7). Para este caso não interagente, ξ é proporcional a W^{-2} . [117, 157]. Nesta figura, fica claro o efeito da resistência dos contatos. Se calculamos g_{typ} como a média geométrica de g em vez de g_S , o resultado para $L/\xi \lesssim 1$ fica comprometido, uma vez que obtemos $g_{\text{typ}} \sim 1$ em vez de $g_{\text{typ}} \sim \xi/L$, como esperado pela Eq. (5.37).

Na Ref. [155], os autores encontram uma forma analítica para a curva $g_{\text{typ}}(L/\xi)$

$$g\left(\frac{L}{\xi}\right) = \frac{g^*}{e^{L/\xi} - 1}, \quad (5.43)$$

onde incluímos explicitamente a escala de “crossover” g^* . De posse desta expressão, podemos determinar imediatamente a função $\beta(g)$

$$\beta(g) = \frac{d \ln g}{d \ln L} = -\left(1 + \frac{g}{g^*}\right) \ln\left(1 + \frac{g^*}{g}\right), \quad (5.44)$$

que possui precisamente as formas assintóticas dadas pelas Eqs. (5.40) e (5.41).

Neste ponto, vemos que possuímos um procedimento geral para estudarmos a localização de Anderson, e o aplicaremos agora ao caso em que $U \neq 0$.

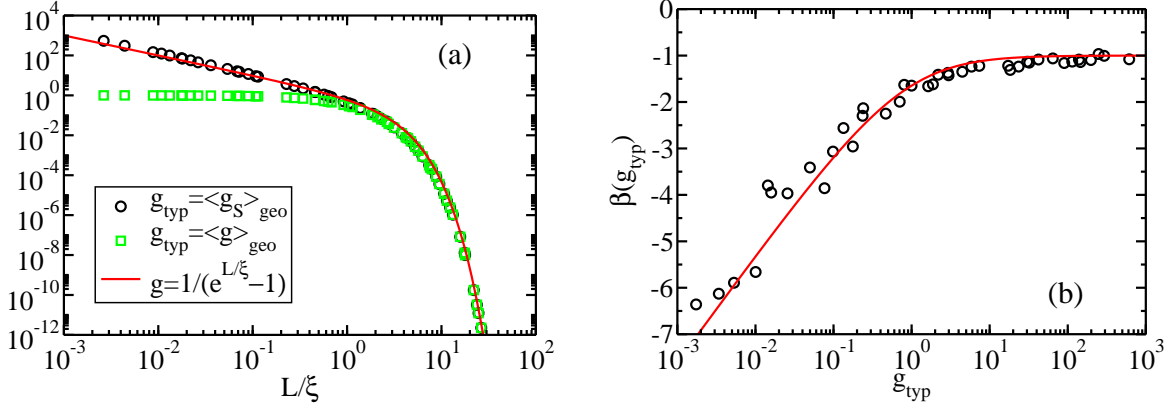


Figura 5.7: **(a)** $g_{typ}(L/\xi)$ em uma escala log-log, com $\xi^{-1} \propto W^{(2.030 \pm 0.003)}$. Os círculos correspondem ao valor típico de g_S , enquanto os quadrados representam o valor típico g , que inclui a resistência dos contatos. A linha contínua corresponde à solução analítica dada pela Eq. (5.43), com $g^* = 1$. Diferentemente do caso em $3d$ (Fig. (5.4)), aqui só temos o ramo isolante, pois em $1d$ todos os estados são localizados. **(b)** Função de escala $\beta(g)$. Os círculos correspondem à solução numérica, e a linha contínua, à solução analítica, dada por (5.44), com $g^* = 1$. Vemos aqui que o “crossover” entre os limites ôhmico $\beta(g) \sim -1$ (Eq. (5.39)) e não ôhmico $\beta(g) \sim -\ln(g/g^*)$ (Eq. (5.41)) ocorre para $g_{typ} \simeq 1$, justificando assim $g^* = 1$. Consideramos aqui $t = 1$, $\eta = 1.0t$, $U = 0$ e 10^4 realizações de desordem.

5.3 Localização de Anderson na presença de correlações em $1d$

Para estudarmos efeitos de interação sobre a localização de Anderson, resolveremos o Hamiltoniano de Hubbard desordenado em uma cadeia linear de átomos, que é o sistema mais simples que podemos considerar, e para o qual o cálculo numérico é mais acessível. Consideramos valores pequenos e intermediários de U , longe do valor $U_c^0 = 32t/\pi \simeq 10.2t$, para o qual a transição de Mott ocorre no caso limpo.

A quantidade central de nosso estudo será a condutância adimensional g , Eq. (5.36), e nosso objetivo final é entender quais são os efeitos da interação sobre a função de escala $\beta(g)$. Utilizando a Eq. (5.33) podemos calcular a função de Green do nosso sistema, e com ela obtermos g (ou a matriz de transmissão) pela Eq. (5.34). O que notamos é que, na energia de Fermi ($\omega = 0$), esta função de Green só depende das energias renormalizadas v_i 's, pois toda a sua dependência com os pesos de quasipartícula Z_i 's se cancela

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_S(0) &= \sqrt{\mathbf{Z}} \left[-\mathbf{Z}\mathbf{v} - \sqrt{\mathbf{Z}}\mathbf{H}_S^0\sqrt{\mathbf{Z}} + i\frac{\eta}{2}\sqrt{\mathbf{Z}}(\mathbf{B}_L + \mathbf{B}_R)\sqrt{\mathbf{Z}} \right]^{-1} \sqrt{\mathbf{Z}}. \\ &= - \left[\mathbf{v} + \mathbf{H}_S^0 + i\frac{\eta}{2}(\mathbf{B}_L + \mathbf{B}_R) \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Assim, podemos analisar os resultados para a condutância olhando apenas para $P(v)$, a função distribuição de probabilidade de v_i . A Eq. (5.45) também sugere que introduzamos um Hamiltoniano efetivo

$$\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{v} + \mathbf{H}_S^0 + i\frac{\eta}{2}(\mathbf{B}_L + \mathbf{B}_R), \quad (5.46)$$

mapeando assim nosso problema interagente a um problema não interagente definido por H_{eff} . Exploraremos esta correspondência mais adiante.

Como utilizamos uma distribuição uniforme para as energias dos sítios, Eq. (3.35), o desvio padrão de $\sigma(v)$ de $P(v)$ para $U = 0$ é dado por $W/2\sqrt{3}$. Na Fig. (5.8), mostramos como $P(v)$ depende da interação e vemos que, ao aumentarmos U , sua largura diminui, embora ela ainda mantenha aproximadamente sua forma não interagente de distribuição uniforme. Já seu desvio padrão mantém uma relação linear com W para valores cada vez menores de desordem. Já na Fig. (5.9), mostramos como $P(v)$, e, naturalmente, $\sigma(v)$, são independentes do tamanho da rede para os tamanhos considerados aqui.

Diante desta supressão dos efeitos da desordem pela correlação, esperamos que com o aumento de U tenhamos um correspondente aumento da condutividade g de uma amostra se mantivermos a desordem constante, pois a desordem efetiva W_{eff} vista pelo sistema é menor. Na Fig. (5.10), vemos que, de fato g_{typ} , aumenta por várias

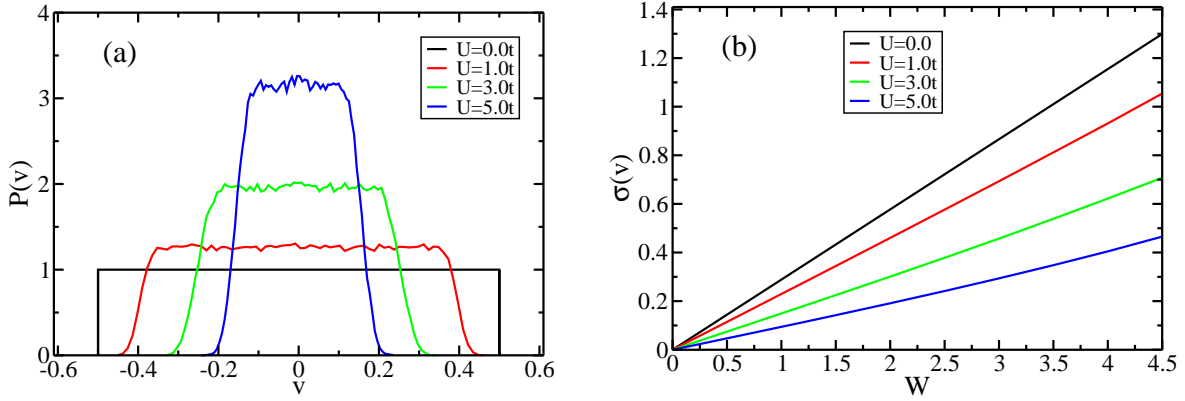


Figura 5.8: **(a)** Distribuição de probabilidade das energias renormalizada dos sítios $P(v)$ para $W = 1t$ e $L = 300$ para vários valores de U . À medida que aumentamos a interação, a largura de $P(v)$ diminui, embora elas ainda mantenham aproximadamente sua forma não interagente de distribuição uniforme. **(b)** Desvio padrão $\sigma(v)$ de $P(v)$ como função de W para $L = 300$ e vários valores de U . Com o aumento de U , as distribuições ficam mais estreitas. Consideramos aqui $t = 1$, $\eta = 1.0t$ e 10^3 realizações de desordem.

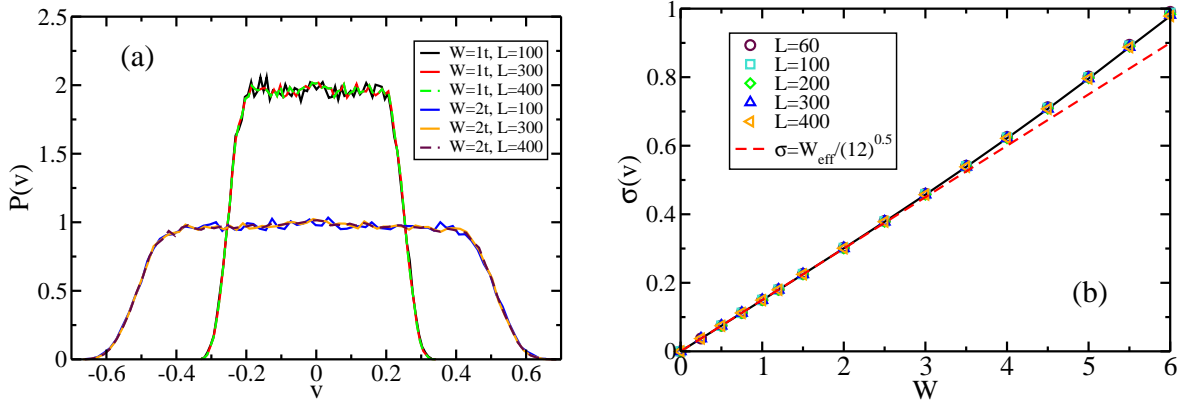


Figura 5.9: **(a)** Distribuição de probabilidade das energias renormalizada dos sítios $P(v)$ para $U = 3t$, $W = 1t$ e $W = 2t$ e vários valores de L , mostrando que $P(v)$ é independente do tamanho da rede para os valores considerados aqui. **(b)** Desvio padrão $\sigma(v)$ de $P(v)$ como função de W para $U = 3t$ e vários valores de L . Assim como $P(v)$, $\sigma(v)$ não depende de L para os tamanhos que consideramos. Para $W \lesssim 3t$, podemos escrever que $\sigma(v) = W_{eff}/2\sqrt{3}$ (linha tracejada), onde definimos W_{eff} como uma desordem efetiva e que, neste caso, vale $W_{eff} = 0.52W$. Consideramos aqui $t = 1$, $\eta = 1.0t$ e 10^3 realizações de desordem.

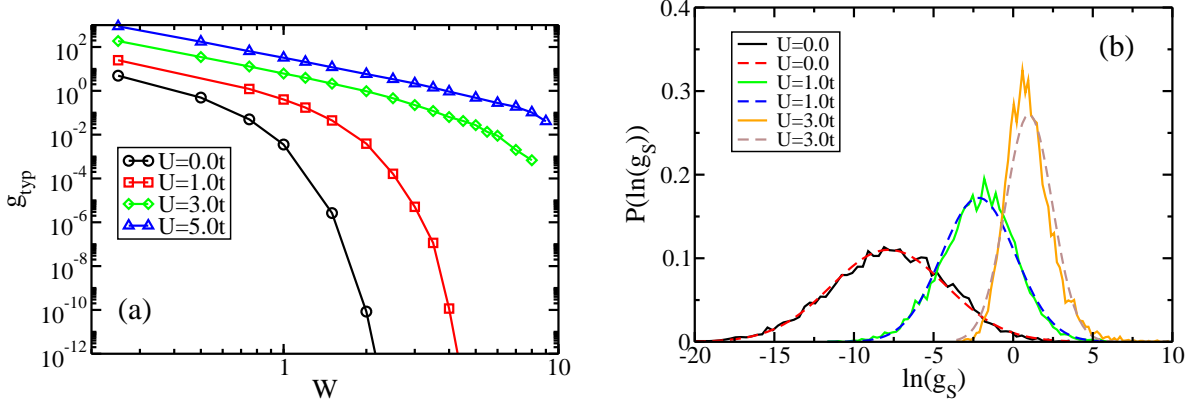


Figura 5.10: **(a)** Valor típico da condutância g_{typ} como função da desordem W para uma cadeia linear de tamanho $L = 300$. Vemos que, ao ligarmos U , o valor de g_{typ} aumenta por várias ordens de magnitude. Utilizando a notação da Fig. (5.9), podemos escrever que $W_{eff}/W = 0.80, 0.52$ e 0.33 para $U = 1t, 3t$ e $5t$, respectivamente. **(b)** Distribuição de probabilidade $P(\ln g_S)$ do logaritmo da condutância do sistema g_S , para três valores da interação U , com $W = 2t$, em uma cadeia linear de tamanho $L = 100$. As linhas tracejadas são distribuições Gaussianas ajustadas com a média e com a variância dos dados numéricos, para realçar o fato de que, mesmo quando $U > 0$, g_S ainda possui uma distribuição log-normal. Aqui, temos $t = 1$, $\eta = 1.0t$ e consideramos 10^3 realizações de desordem para **(a)** e 10^4 para **(b)**.

ordens de magnitude para $U > 0$, fato que também se reflete na distribuição de $P(\ln(g_S))$. Podemos tentar entender estes resultados quantitativamente, assumindo um cenário simples, no qual todo o efeito das correlações consiste em fazer com que o Hamiltoniano efetivo da Eq. (5.46) seja idêntico àquele do caso não interagente, apenas com W_{eff} no lugar de W . Se esta hipótese for verdadeira, o único efeito será o aumento do comprimento de correlação, mas com ξ mantendo a mesma forma funcional de $U = 0$: $\xi_{eff} \sim W_{eff}^{-2}$. Considere, por exemplo, o valor $W = 2t$, da Fig. (5.10), para $U = 0$ e para $U = 1t$. Para este valor de W , já estamos no regime fortemente localizado, onde $g_{typ} \sim e^{-L/\xi}$. Como $W_{eff} = 0.8W$ para $U = 1t$, temos que $\xi_{eff} \simeq 1.6\xi$ e obtemos que $g_{typ}(U = 1t) \sim [g_{typ}(U = 0)]^{0.6} \sim 10^{-6}$. Pelo gráfico, contudo, temos, que na verdade, $g_{typ} \sim 10^{-3}$. Essa diferença de três ordens de grandeza nos indica que as interações fazem mais do que apenas renormalizar a desordem, e que existe algum outro mecanismo por trás deste aumento colossal de g_{typ} na presença de interações. Um dos possíveis candidatos são as correlações espaciais nos valores de v que discutimos a seguir.

5.3.1 Correlações espaciais na energia renormalizada v_i

Vimos que, para desordem descorrelacionada, todos os estados eletrônicos são exponencialmente localizados em uma dimensão. Contudo, ao ligarmos as interações, as energias renormalizadas v_i tornam-se correlacionadas espacialmente. Podemos explorar este fato utilizando os resultados analíticos da seção (4.3), numa abordagem que denominaremos como “aproximação de resposta linear” (ARL). Embora derivados para $\varepsilon_i \rightarrow 0$, estes resultados são úteis aqui, pois a variável de escala relevante é L/ξ e, portanto, todos os estados eletrônicos são exponencialmente localizados, mesmo para desordem pequena, contanto que o tamanho L do sistema seja grande o suficiente. Com a Eq. (4.52), podemos calcular a função de correlação $B(q) = \langle v(q)v(p) \rangle$, onde $\langle \dots \rangle$ denota média sobre configurações (realizações) de desordem

$$B(q) = \langle v(q)v(p) \rangle = \delta(p+q) \frac{1}{(1-u^2)^2} \left[1 - \frac{1}{M_{\mathbf{q}}(u)} \right]^2 \frac{W^2}{12}, \quad (5.47)$$

uma vez que $\langle \varepsilon_i \varepsilon_j \rangle = \delta_{ij} W^2/12$ e, portanto, $\langle \varepsilon(q)\varepsilon(p) \rangle = \delta(p+q) f(q)$, onde $f(q) = W^2/12$.² Também mantivemos a notação da seção (4.3), $u = U/U_c^0$, e aqui $U_c^0 = 10.2t$. Utilizando a forma da função de Lindhard para uma dispersão tight-binding (Eq. (F.5)), podemos calcular a transformada de Fourier da Eq. (5.47) numericamente para qualquer valor de u e investigarmos, assim, como esta correlação entre os valores de $v(q)$ se reflete no espaço real,

²Um cálculo similar pode ser feito dentro da aproximação de Hartree-Fock (que é equivalente à nossa para $u \rightarrow 0$) e é discutido na Ref. [158]

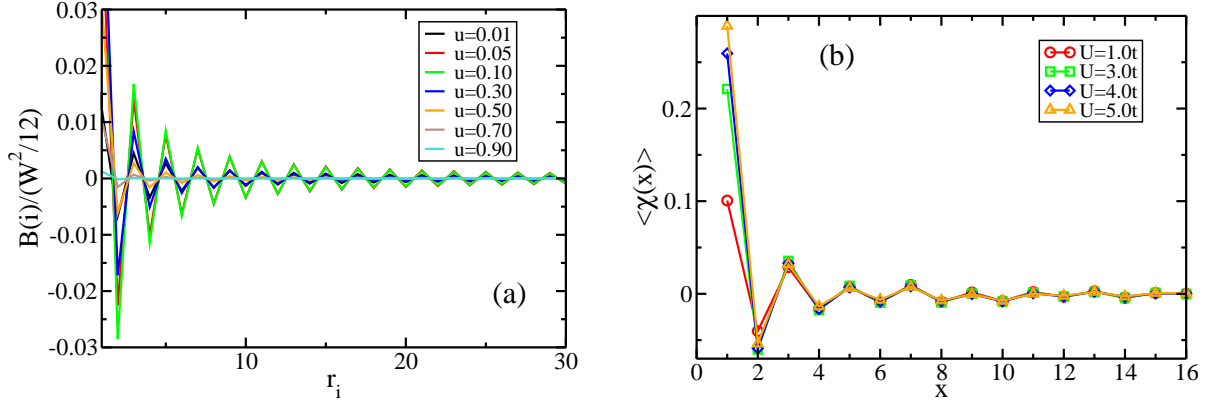


Figura 5.11: **(a)** Função de correlação $B(i) = \langle v(i)v(0) \rangle$ normalizada pela variância de ε_i e calculada como a transformada de Fourier da Eq. (5.47). Como a parte não local de v_i só surge para $u > 0$, vemos que a amplitude de $B(i)$ aumenta para u pequena até $u \approx 0.1$ e então decresce, pois as oscilações de Friedel são suprimidas pelas interações. Aqui, $u = U/U_c^0$ e $U_c^0 \simeq 10.2t$. **(b)** Valor médio do coeficiente de correlação linear $\langle \chi(x) \rangle$ das energias renormalizadas v_i , Eq. (5.48), para alguns valores de U , $W = 1t$ e $L = 200$, apresentando oscilações do tipo Friedel. Como utilizamos condições abertas de contorno, a estatística fica mais pobre para x maiores. Utilizamos em **(b)** $t = 1$, $\eta = 1.0t$ e consideramos 10^3 realizações de desordem.

o que mostramos na Fig. (5.11). Os resultados numéricos completamente autoconsistentes podem ser contrastados com este resultado da ARL ao estudarmos o seguinte coeficiente de correlação linear

$$\chi(x) = \frac{\langle v(x)v(0) \rangle}{\text{var}[v]}. \quad (5.48)$$

Pela sua definição, temos que $-1 \leq \chi(x) \leq 1$. $\chi(x)$ é igual a 1 (-1) quando todos os dados caem em uma reta de inclinação positiva (negativa). $\chi(x) \approx 0$ significa que os dados são descorrelacionados. Como esta quantidade está normalizada pela variância de v , podemos analisar como as correlações espaciais se comportam para diferentes valores de U e W , Fig. (5.11). Embora os resultados numéricos autoconsistentes sejam obtidos para uma desordem grande, tal que nossa expansão em primeira ordem de ε_i não seja mais tão bem justificada, vemos que, em ambos os casos, as oscilações de Friedel parecem estar por trás desta correlação espacial entre os valores de v_i .

Pelo menos nos limites $u \rightarrow 0$ e $u \rightarrow 1$, podemos calcular a transformada de Fourier da Eq. (5.47) analiticamente no regime assintótico, utilizando os resultados do Apêndice (F). Para $u \rightarrow 0$, temos $v_i \simeq \left(1 + U\Pi_{ij}^{(0)}\right) \varepsilon_j$, e pela Eq. (F.11)

$$B(i) \underset{i \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{\cos(2k_F r_i)}{r_i}, \quad u \rightarrow 0. \quad (5.49)$$

Já para $u \rightarrow 1$, temos $v_i \simeq -(1-u)U_c^{-1} [\mathbf{\Pi}^{(0)}]_{ij}^{-1} \varepsilon_j$ (Eq. (4.70)), e pela Eq. (F.17)

$$B(i) \underset{i \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\cos(2k_F r_i)}{r_i (\ln(4k_F r_i))^3}, \quad u \rightarrow 1. \quad (5.50)$$

Em ambos limites vemos que as correlações espaciais oscilam como uma oscilação de Friedel usual. Contudo, nas proximidades da transição de Mott, aparece uma correção logarítmica ao decaimento usual do tipo lei de potência.

Vemos assim que, no nosso modelo efetivo, (5.46), as energias dos sítios, agora dadas por v_i , são correlacionadas no espaço. O estudo da transição de Anderson na presença de desordem correlacionada possui uma longa literatura e existem alguns exemplos nos quais certos tipos de correlação fazem com que estados estendidos emergjam, mesmo em $1d$. Na Ref. [159], por exemplo, os autores consideram uma desordem correlacionada tal que $B(q) \propto q^{-\alpha}$, e encontram que estados metálicos podem existir para $\alpha > 2$. Já em [160], os autores também encontram estados estendidos em $1d$, mas agora utilizando diferentes processos de filtragem, de maneira a fazer com que um dado potencial descorrelacionado inicial seja transformado em um potencial suave correlacionado.

Governando a existência ou não de estados estendidos em $1d$ está o teorema de Kotani [160, 161], que estabelece a seguinte condição necessária: estados metálicos em uma dimensão não podem existir se $\lim_{i \rightarrow \infty} B(i) \rightarrow 0$ como uma

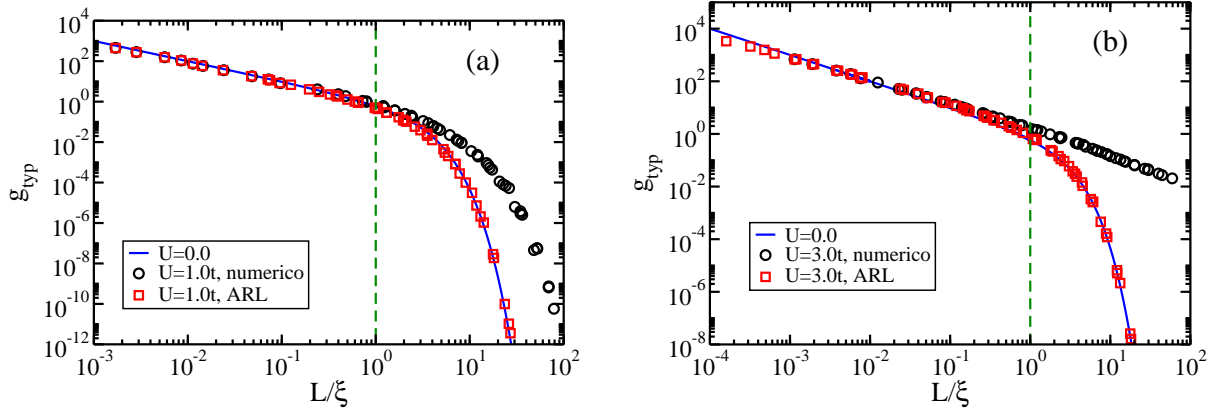


Figura 5.12: **(a)** Valor típico da condutividade do sistema g_S como função da variável de escala L/ξ para $U = 1t$. A curva correspondente à ARL descreve bem os dados numéricos até o ponto de “crossover” $L/\xi \approx 1$, onde estes continuam com um comportamento aproximadamente ôhmico $g_{typ} \sim \xi/L$ enquanto a curva correspondente à ARL já entra no regime não ôhmico $g_{typ} \sim e^{-L/\xi}$. Naturalmente, o comprimento de localização é diferente para cada um dos casos acima: $\xi_{ARL}^{-1} \propto W^{(2.38 \pm 0.01)}$ e $\xi^{-1} \propto W^{(2.48 \pm 0.02)}$, veja Fig. (5.13). Para efeitos de comparação, incluímos a curva para $U = 0$, dada pela Eq. (5.43) com $g^* = 1$. **(b)** O mesmo que a curva anterior, só que agora para $U = 3t$. Neste caso, a diferença entre as duas soluções é mais acentuada e temos: $\xi_{ARL}^{-1} \propto W^{(2.79 \pm 0.03)}$ e $\xi^{-1} \propto W^{(2.95 \pm 0.05)}$. Utilizamos aqui $t = 1$, $\eta = 1.0t$ e consideramos 10^3 realizações de desordem

lei de potência ou mais rápido. Olhando a expressão assintótica de nossas funções de correlação, Eqs. (5.49) e (5.50), vemos que nosso potencial correlacionado não preenche os requisitos para a emergência de estados estendidos em uma dimensão. Naturalmente, esta conclusão baseia-se em um resultado válido dentro da aproximação de Born (ou, equivalentemente, da ARL). Acreditamos, contudo, que ela seja restritiva o suficiente, pois, mesmo para desordem fraca, já esperaríamos algum efeito quantitativo se houvesse estados estendidos dentro de nossa abordagem.

5.3.2 Função de escala $\beta(g)$

Calcularemos agora a função de escala $\beta(g)$ na presença das interações através da teoria de escalamento finito descrita na seção (5.2.2), tanto por um cálculo numérico autoconsistente, como utilizando a ARL. O cálculo utilizando a ARL possui dois objetivos. O primeiro e mais imediato é permitir uma comparação direta com nossos resultados numéricos; o outro, mais ambicioso, e que não desenvolveremos aqui, é fornecer uma ligação com as teorias usuais de localização de Anderson [9]. Por exemplo, a chamada teoria de localização fraca [114, 127] trata o potencial das impurezas dentro da aproximação de Born, exatamente como na Eq. (4.52). A diferença é que, em vez de somarmos uma classe especial de diagramas para calcularmos a condutividade, utilizaremos a abordagem de Landauer, que embora restrita ao cálculo numérico, é exata.

Começamos por escrever as curvas de g_{typ} como função da variável de escala L/ξ , como mostrado na Fig. (5.12). Os comprimentos de localização resultantes deste procedimento são mostrados na Fig. (5.13). Vemos que ξ aumenta com a interação mesmo quando fazemos o cálculo dentro da ARL. Contudo, o expoente crítico é diferente para os dois métodos, com $\nu > 2$ em ambos. Deste modo, as interações não introduzem a apenas uma desordem efetiva W_{eff} , mas também renormalizam os expoentes críticos. Na medida em que ξ é fortemente renormalizado, teremos, em algum momento, que $\xi > L$, e os estados tornam-se efetivamente estendidos. Contudo, para estabelecermos a existência de um metal, precisamos calcular a função de escala $\beta(g)$.

Voltando para a Fig. (5.12), vemos que, embora a ARL dê uma resposta não trivial para o comprimento de correlação, quando $g_{typ}(L/\xi)$ é calculada dentro desta aproximação, ela se reduz àquela não interagente. Ou seja, sob o escalamento apropriado, o sistema comporta-se exatamente como no caso não interagente. Já as curvas obtidas pelo cálculo numérico completamente autoconsistente mostram que $g_{typ}(L/\xi)$ difere daquela do caso não interagente. Em particular, o regime ôhmico, onde $g_{typ} \sim \xi/L$, estende-se por uma região maior da variável ξ/L . O caso $U = 3t$ é o mais emblemático, pois lá nem mesmo vemos a entrada no regime não ôhmico para a janela de parâmetros considerados.

Pode-se argumentar, contudo, que, como o comprimento de correlação é determinado a menos de uma constante, estamos apenas fixando esta constante de modo impróprio, e eventualmente acessando valores de ξ tais que $\xi \gtrsim L$,

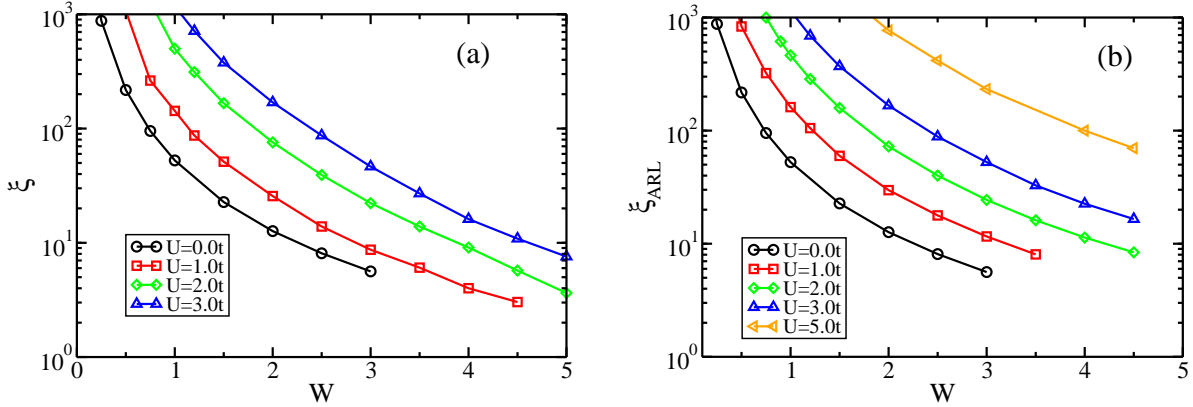


Figura 5.13: **(a)** Comprimento de localização resultante do colapso das curvas da condutividade típica. Estes comprimentos de localização correspondem à solução numérica. **(b)** O mesmo que a curva anterior, só que agora considerando a aproximação de resposta linear. Em ambos os gráficos, vemos que há um considerável aumento do comprimento de localização com as interações. Nossos resultados deixam de ser confiáveis para $\xi \gtrsim L \sim 10^3$, devido aos tamanhos considerados. Utilizamos aqui $t = 1$, $\eta = 1.0t$ e consideramos 10^3 realizações de desordem.

levando a resultados inacurados. Na Fig. (5.14), reexaminamos a curva $g_{typ}(L/\xi)$ para o caso numérico com $U = 1t$, mas agora reescalamos tanto o eixo x (comprimento de correlação $\xi \rightarrow \xi/a$) quanto o y (escala de “crossover” g^*). Com este procedimento, vemos que a curva numérica agora também coincide com aquela para $U = 0$. O reescalamento do comprimento de correlação pode ser encarado de forma mais natural, pois, como temos dito ao longo deste capítulo, sempre definimos ξ a menos de uma constante. Já o reescalamento de g^* possui um significado mais profundo. Primeiramente, ele não é capturado pela ARL, portanto precisamos de um tratamento não perturbativo na desordem para descrevê-lo. Como g^* marca o “crossover” entre o regime ôhmico ($g > g^*$) e o não ôhmico ($g < g^*$), uma diminuição de g^* implica em um alargamento do regime ôhmico, e como g^* diminui com U , esta escala pode tornar-se tão pequena de modo a deixar a região não ôhmica virtualmente inacessível.

O comportamento de g^* é melhor entendido ao olharmos diretamente para a função de escala $\beta(g)$, Fig. (5.15). Como $\beta(g)$ é a derivada logarítmica de g com relação a L , toda a dependência com ξ desaparece, deixando a renormalização de g^* ainda mais evidente. Baseada em sua forma geral, obtida dentro da teoria de localização fraca, Eq. (5.40), temos que $\beta(g) = -1 - g^*/g$, consistente novamente com o fato de que reduzir g^* expande o regime ôhmico ($\beta = -1$). Utilizamos a Eq. (5.44) para ajustarmos nossos dados, considerando agora $g^* < 1$. Devido a flutuações numéricas, os dados ficam espalhados, mas vemos que as curvas analíticas capturam bastante as tendências desses dados. O fato de a mesma curva não interagente descrever os resultados interagentes deixa claro que não há a emergência de estados estendidos, que correspondem, nesta linguagem, a $\beta(g) > 0$, apesar deste grande aumento da região ôhmica. Cenários análogos ao descrito por este resultado já foram encontrados, tanto numérica, [56, 57] quanto experimentalmente [58] (Fig. (1.4)), para gases de elétrons bidimensionais.

Devido ao alto custo computacional deste método de escala, ainda não produzimos uma estatística suficientemente boa para, por exemplo, realizar um estudo mais quantitativo de como g^* diminui com U . Isso sem mencionar um objetivo mais ambicioso, que seria estudar este problema em $d > 1$. Se assumirmos por um instante que o cenário descrito acima esteja correto e que permaneça válido para $d > 1$, vemos que, em $d = 2$, assim como $d = 1$, não há a emergência de estados verdadeiramente estendidos. Já para $d = 3$, temos o valor de W_c consideravelmente aumentado, o que pode deixar o regime localizado praticamente inacessível.

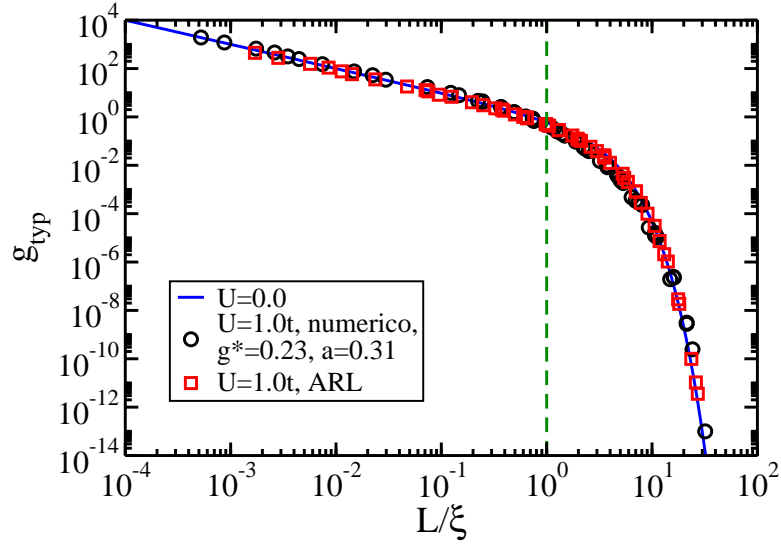


Figura 5.14: Valor típico da condutividade do sistema g_S como função da variável de escala L/ξ para $U = 1t$, com a mesma notação da Fig. (5.12). Vemos que, ao reescalarmos tanto o comprimento de correlação ξ ($\xi' = \xi/a$) quanto a escala de “crossover” g^* , os dados numéricos são bem descritos pela curva não interagente.

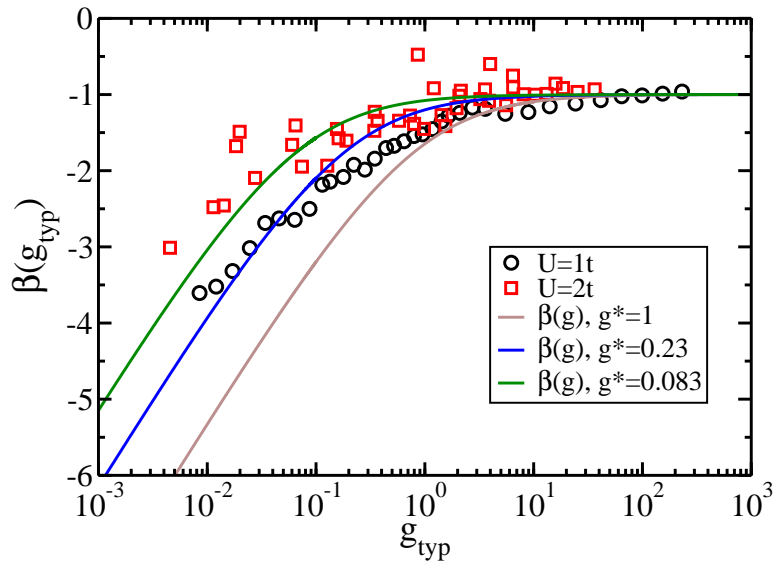


Figura 5.15: Função de escala $\beta(g)$. Os símbolos correspondem às soluções numéricas e as curvas contínuas à solução analítica dada por (5.44) com o valor de g^* indicado na legenda. Como $\beta(g)$ é a derivada logarítmica de g com relação a L , toda a dependência com ξ desaparece, ficando realçada aqui a diminuição de g^* com as interações. Consideramos aqui $t = 1$, $\eta = 1.0t$, $U = 0$ e 10^3 realizações de desordem.

Capítulo 6

Conclusão

Nesta tese, estudamos a competição entre fortes correlações - física de Mott - e os efeitos da desordem associados com a localização de Anderson. Nosso estudo teórico baseou-se no modelo de Hubbard desordenado que tratamos dentro de uma abordagem variacional que reproduz o cenário de Brinkman-Rice para a transição de Mott. Já os efeitos da desordem foram incluídos de maneira exata através da diagonalização de redes finitas.

Primeiramente, realizamos uma investigação detalhada da transição de Mott desordenada em $d = 2$ por meio de cálculos numéricos para o regime de desordem fraca e moderada. Nossos resultados indicam que configurações raras de desordem podem dominar a criticalidade quântica mesmo na ausência de qualquer tipo de ordem magnética, uma ideia a ser testada experimentalmente em uma vasta gama de materiais [2].

Uma das principais características dos nossos cálculos é que temos um comportamento totalmente diferente para a energia renormalizada do sítio e para o peso de quasipartícula na medida em que nos aproximamos da transição de Mott. Enquanto a desordem é suprimida no primeiro, a distribuição do último se alarga. O resultado final desta dicotomia é uma paisagem não trivial no espaço de energia, que é caracterizada por inomogeneidades dependentes da energia.

Em seguida, apresentamos um cálculo detalhado, em boa parte analítico, estudando os efeitos de uma única impureza não magnética colocada em um metal fortemente correlacionado. Descobrimos que fortes correlações tendem a reduzir o efeito da parte de longo alcance das oscilações de Friedel e nosso trabalho dá uma ideia analítica clara de como isso ocorre. Utilizando a presente geração dos métodos de microscopia de varredura por tunelamento deve ser possível testar diretamente várias de nossas previsões, ajudando a entender o comportamento de sistemas desordenados nas proximidades da transição metal-isolante de Mott.

Como uma aplicação de nossos resultados, estudamos a relação entre espalhamentos elástico e inelástico na presença das oscilações de Friedel. No caso singular de duas dimensões, mostramos que o termo anômalo (linear em T) que aparece na resistividade no regime balístico fica confinado a temperaturas extremamente baixas, uma vez que o espalhamento inelástico é levado em consideração.

Gostaríamos de salientar que impurezas colocadas em supercondutores do tipo “D-wave” também produzem perturbações que decaem lentamente no espaço real, refletindo sua natureza sem “gap”, através de um mecanismo muito parecido com as oscilações de Friedel em metais usuais. Um trabalho recente desenvolvido por Garg *et al.* [45], utilizando uma abordagem teórica muito similar à nossa, mostra que, nesses sistemas, fortes correlações também levam a uma pronunciada “cura” espacial. Acreditamos que ambos os fenômenos possuem uma origem similar e nossos resultados sugerem fortemente que o efeito de “cura” é uma propriedade mais geral de metais correlacionados nas proximidades da transição de Mott, não um efeito específico dos cupratos ou do estado supercondutor.

Finalmente, estudamos como as interações afetam o isolante de Anderson em $d = 1$ olhando para a função de escala $\beta(g)$, com a condutância g calculada pelo formalismo de Landauer. De forma robusta, encontramos que a escala g^* , marco da transição entre o regime ôhmico e o localizado da condutividade, é fortemente renormalizada pelas interações, mesmo para pequenos valores de interação, com a função de escala mantendo sua forma não inter-gente. Este resultado diz que, na presença de interações, a região na qual o sistema apresenta um comportamento ôhmico é consideravelmente aumentada, embora não haja a emergência de estados verdadeiramente estendidos para os quais $\beta(g) > 0$.

A extensão deste resultado para dimensões superiores seria extremamente interessante. Em $d = 3$, poderíamos monitorar como o valor crítico de desordem para a transição de Anderson muda com a interação. Pela tendência

capturada em $d = 1$, esperamos que este valor aumente consideravelmente, e que a fase metálica se torne muito mais estável. Já para $d = 2$, poderíamos entender melhor se há ou não a emergência de uma fase metálica termodinâmica.

O cenário de Brinkman-Rice que utilizamos em nossos estudos foca apenas nos aspectos locais da interação (tipo Kondo) e negligencia qualquer tipo de correlação magnética entre os sítios. Este tipo de aproximação só é relevante para sistemas que apresentem uma forte frustração magnética. A introdução de um termo de troca nesse tipo de abordagem variacional [162] é um passo importante a ser tomado no futuro, se quisermos descrever sistemas como os cupratos ou semicondutores dopados, nos quais a interação de “superexchange” entre os sítios é muito forte. Uma maneira alternativa para introduzirmos este termo de troca pode ser a utilização de um “cluster” de impurezas [82, 83], ao invés de uma única impureza na solução da TEDCM. Embora custoso, este método dá conta das correlações magnéticas de curto alcance.

Além disso, o cenário de Brinkman-Rice descreve bem apenas a física de baixas energias, para a qual temos quasipartículas bem definidas, perdendo completamente a física incoerente de altas energias (bandas de Hubbard). Melhorias neste sentido podem ser feitas ao resolvermos os problemas de uma impureza associados não com os bósons escravos, mas com técnicas exatas como o Monte Carlo Quântico [163, 164]. Com esta abordagem, podemos estudar, por exemplo, a transição de Mott a temperaturas finitas, um problema que também possui relação direta com os experimentos, Fig. (3.3). O preço que temos que pagar é o alto custo computacional envolvido nessa técnica, o que, contudo, pode ser reduzido com a implementação das otimizações numéricas descritas nesta tese.

Métodos numéricos utilizados

Neste apêndice, discutimos os métodos numéricos utilizados para a obtenção dos resultados descritos ao longo da tese. De maneira geral, utilizamos a linguagem FORTRAN 90 [165] para escrevermos os códigos computacionais e o Compilador Fortran Intel® para Linux para compilá-los [166]. Fizemos uso intenso de paralelismo, através da interface de programação OpenMP [167]. Para uma visão mais detalhada, discutiremos passo a passo a implementação numérica do algoritmo de solução da Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio, que é descrito na seção (2.2.3), e que reproduzimos aqui por conveniência:

1. Começamos com um palpite inicial para a função de hibridização $\Delta_l^{(antigo)}(\omega)$;
2. Resolvemos os problemas de uma impureza associados a cada um dos sítios da rede, Eq. (2.85), para encontrarmos a autoenergia $\Sigma_l^{(antigo)}(\omega)$ e as funções de Green $G_l^{(loc)(antigo)}(\omega)$ locais (Eq. (2.87));
3. Utilizando $\Sigma_l^{(antigo)}(\omega)$, calculamos as funções de Green locais da rede interagente $G_{ll}^{(antigo)}(\omega)$, Eq. (2.88);
4. Aplicando a condição de autoconsistência da TEDCM $G_{ll}^{(antigo)}(\omega) \equiv G_l^{(loc)(antigo)}(\omega)$ a cada um dos sítios da rede, calculamos os novos valores da função de hibridização $\Delta_l^{(novo)}(\omega)$, através da Eq. (2.89). Comparamos agora os valores de $\Delta_l^{(antigo)}(\omega)$ e $\Delta_l^{(novo)}(\omega)$ e retornamos ao passo 1, caso a condição de convergência não tenha sido atingida.

A.1 Passo 1

O primeiro passo do algoritmo envolve uma boa escolha de um palpite inicial para a função de hibridização $\Delta_i(i\omega_n)$. Como ao longo de nossos estudos sempre mantivemos a amplitude de “hopping” t fixa e trabalhamos em semipreenchimento $\mu = U/2$, ficamos com três parâmetros a serem variados: L , W e U . Deste modo, o palpite inicial para $\Delta_i(i\omega_n)$ para um dado valor desta trinca, digamos, $(L, W, U + \Delta U)$, é sempre tomado como o valor convergido de $\Delta_i(i\omega_n)$ para a trinca anterior, neste exemplo dada por (L, W, U) . Naturalmente, a escolha da variação ΔU depende da região de parâmetros considerada. Por exemplo, nas proximidades da transição de Mott sempre utilizamos valores menores de ΔU , quando comparados àqueles da região fracamente correlacionada. Em todos os nossos testes, verificamos que nosso código converge para uma única solução, independentemente do palpite inicial.

A.2 Passo 2

O passo 2 do algoritmo envolve a solução dos problemas de uma impureza associados. Como a TEDCM é uma abordagem local, a solução do problema de uma impureza no sítio i é completamente independente da solução no sítio j , uma vez dadas as funções de hibridização $\Delta_i(i\omega_n)$ e $\Delta_j(i\omega_n)$. Este fato permite a implementação direta deste passo em paralelo.

Embora facilmente paralelizável, este segundo passo do algoritmo é o mais difícil, pois envolve a solução de problemas de uma impureza de Anderson em um banho arbitrário, determinado pela função de hibridização. Como discutido na seção (2.2.5), utilizamos a aproximação de campo médio de bósons escravos para resolvermos estes

problemas de uma impureza associados. Ao aplicarmos este procedimento, obtemos duas equações de campo médio para cada sítio, Eqs. (2.107) e (2.109), que, novamente por conveniência, reproduzimos aqui

$$T \sum_n \tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) = \frac{1}{2} (1 - e_i^2 + d_i^2). \quad (\text{A.1})$$

$$- \left(\frac{\partial Z_i}{\partial e_i} + \frac{\partial Z_i}{\partial d_i} \right) T \sum_n \Delta_i(i\omega_n) \tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) = U d_i + (\tilde{\varepsilon}_i - \varepsilon_i + \mu) (e_i - d_i), \quad (\text{A.2})$$

onde

$$\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - Z_i v_i - Z_i \Delta_i(i\omega_n)} \quad (\text{A.3})$$

é a função de Green das quasipartículas, e a função de Green dos elétrons é dada por $G_i^{(loc)}(i\omega_n) = Z_i \tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n)$, com

$$\tilde{\varepsilon}_i = \varepsilon_i - \mu + \frac{U d_i}{\left(\frac{\partial Z_i}{\partial e_i} d_i + \frac{\partial Z_i}{\partial d_i} e_i \right)} \frac{\partial Z_i}{\partial e_i}, \quad (\text{A.4})$$

$$v_i = \frac{\tilde{\varepsilon}_i}{Z_i}, \quad (\text{A.5})$$

e

$$Z_i = 2 \left[1 - (e_i^2 - d_i^2)^2 \right]^{-1} (e_i + d_i)^2 (1 - e_i^2 - d_i^2). \quad (\text{A.6})$$

Escritas como estão, as Eqs. (A.1) e (A.2) são válidas a uma temperatura finita T . Contudo, todos os nossos resultados são obtidos para $T = 0$. Embora bem definido, o limite $T = 0$ tem que ser avaliado cuidadosamente. Seguiremos o procedimento descrito pela Ref. [127] (veja especialmente a seção 17).

O primeiro fato a ser notado é que a soma $S = T \sum_n \tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n)$ não é absolutamente convergente. Para vermos isso, lançaremos mão da representação de Lehmann¹ para $\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n)$ [59, 60, 127]

$$\tilde{G}^{(loc)}(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{A(\epsilon)}{i\omega_n - \epsilon}, \quad (\text{A.7})$$

onde

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} A(\epsilon) d\epsilon = 1, \quad (\text{A.8})$$

e $A(\epsilon) \in \mathbb{R}$ é a função espectral do sistema, que, no caso não interagente, reduz-se à densidade de estados local do sistema. Através das Eqs. (A.7) e (A.8), podemos escrever

$$\text{Im} \left[\tilde{G}^{(loc)}(i\omega_n) \right] = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{-\omega_n A(\epsilon)}{\omega_n^2 + \epsilon^2} \approx -\frac{1}{\omega_n}, \quad |\omega_n| \rightarrow \infty, \quad (\text{A.9})$$

$$\text{Re} \left[\tilde{G}^{(loc)}(i\omega_n) \right] = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{\epsilon A(\epsilon)}{\omega_n^2 + \epsilon^2} \approx \frac{1}{\omega_n^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \epsilon A(\epsilon), \quad |\omega_n| \rightarrow \infty. \quad (\text{A.10})$$

Pelas Eqs. (A.9) e (A.10), temos que $\tilde{G}_i^{(loc)} \approx 1/i\omega_n$ para $\omega_n \gg 1$, mostrando que, para avaliarmos a soma $S = T \sum_n \tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n)$, precisamos introduzir um fator de convergência $\tau < 0$, sem o qual ela diverge logaritmicamente. Com este fator de convergência, S é dada por

$$S = \lim_{\tau \rightarrow 0^-} T \sum_n \tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}, \quad (\text{A.11})$$

¹A representação de Lehmann é mais geral do que esta mostrada aqui, uma vez que ela também vale para funções de Green que possuem uma dependência com o momento.

Utilizando o fato de que $\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) = \tilde{G}_i^{(loc)*}(-i\omega_n)$ [59, 60, 127], que decorre imediatamente da Eq. (A.7), podemos reescrever a soma acima como

$$S = 2T \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \sum_{n \geq 0} \operatorname{Re} \left[\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) \right] \cos(\omega_n \tau) + 2T \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \sum_{n \geq 0} \operatorname{Im} \left[\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) \right] \sin(\omega_n \tau). \quad (\text{A.12})$$

No primeiro termo, podemos tomar $\tau = 0$, uma vez que $\operatorname{Re} \left[\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) \right]$ vai a zero mais rápido que $1/\omega_n$ para $\omega_n \gg 1$, Eq. (A.10). Já para o segundo termo, notamos que a principal contribuição para a soma vem da região em que temos $\omega_n \tau \sim 1$, correspondendo ao limite $\omega_n \rightarrow \infty$, uma vez que $\tau \rightarrow 0^-$. Neste caso, é lícito não só que usemos o valor assintótico de $\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n)$, mas que também tomemos o limite $T = 0$, lembrando que $(\omega_n = (2n + 1)\pi T)$ [59, 60, 127], trocando a soma sobre n por uma integral

$$T \sum_n \dots \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int d\omega \dots, \quad (\text{A.13})$$

o que nos dá ($\tau \rightarrow 0^-$)

$$2T \sum_{n \geq 0} \operatorname{Im} \left[\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) \right] \sin(\omega_n \tau) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\sin(\omega \tau)}{\omega} = -\frac{1}{2} \operatorname{sgn} \tau = \frac{1}{2}. \quad (\text{A.14})$$

Utilizando Eqs. (A.11)-(A.14), podemos finalmente escrever, em $T = 0$,

$$S = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \operatorname{Re} \left[\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) \right] + \frac{1}{2}. \quad (\text{A.15})$$

De posse da Eq. (A.15), podemos reescrever a primeira equação de campo médio, Eq. (A.1) a $T = 0$. Para reescrevermos a segunda equação de campo médio, Eq. (A.2), utilizamos o mesmo procedimento descrito acima com a diferença de que, neste caso, o limite $\tau \rightarrow 0^-$ na Eq. (A.12) é direto, porque tanto $\operatorname{Re} \left[\Delta_i(i\omega_n) \tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) \right]$ quanto $\operatorname{Im} \left[\Delta_i(i\omega_n) \tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega_n) \right]$ vão a zero mais rápido que $1/\omega_n$, para $\omega_n \gg 1$. Logo, temos que

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \operatorname{Re} \left[\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega) \right] d\omega = \frac{1}{2} (-e_i^2 + d_i^2), \quad (\text{A.16})$$

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \operatorname{Re} \left[\Delta_i(i\omega) \tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega) \right] d\omega = -\frac{U d_i + (\tilde{\varepsilon}_i - \varepsilon_i + \mu)(e_i - d_i)}{\partial Z_i / \partial e_i + \partial Z_i / \partial d_i}. \quad (\text{A.17})$$

As Eqs. (A.16) e (A.17) são equações não lineares acopladas nas amplitudes de bósons escravos e_i e d_i . Para realçar este fato, reescrevemo-las da seguinte forma

$$\begin{cases} f_1^i(e_i, d_i) = 0 \\ f_2^i(e_i, d_i) = 0 \end{cases}, \quad (\text{A.18})$$

onde

$$f_1^i(e_i, d_i) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \operatorname{Re} \left[\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega) \right] d\omega - \frac{1}{2} (-e_i^2 + d_i^2), \quad (\text{A.19})$$

$$f_2^i(e_i, d_i) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \operatorname{Re} \left[\Delta_i(i\omega) \tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega) \right] d\omega + \frac{U d_i + (\tilde{\varepsilon}_i - \varepsilon_i + \mu)(e_i - d_i)}{\partial Z_i / \partial e_i + \partial Z_i / \partial d_i}. \quad (\text{A.20})$$

Para resolvermos este sistema de equações, utilizamos a subrotina de FORTRAN 77 *dnsqe* [168], que é de domínio público, e implementa o método de Powell híbrido [169]. Como é comum a esses métodos de solução de equações não lineares, além da função, devemos também fornecer suas derivadas. O Jacobiano \mathbf{J} destas funções é dado por

$$\mathbf{J}^i = \begin{pmatrix} J_{11}^i & J_{12}^i \\ J_{21}^i & J_{22}^i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial f_1^i / \partial e_i & \partial f_1^i / \partial d_i \\ \partial f_2^i / \partial e_i & \partial f_2^i / \partial d_i \end{pmatrix}. \quad (\text{A.21})$$

De maneira geral, o Jacobiano pode ser calculado numericamente através do método de diferenças finitas. Contudo, no nosso caso, podemos obter uma expressão analítica para ele, bastando tomar as (trabalhosas) derivadas das Eqs. (A.19) e (A.20). Para tal, devemos relembrar um fato crucial de nossa abordagem: os problemas de uma impureza associados são resolvidos para um banho $\Delta_i(i\omega_n)$ *fixo*. Em nosso código, implementamos esse cálculo analítico do Jacobiano.

Por fim, no cálculo de $f_1(e_i, d_i)$ e $f_2(e_i, d_i)$, precisamos avaliar duas integrais

$$I_1^i(e_i, d_i) \equiv \int_0^\infty \text{Re} \left[\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega) \right] d\omega, \quad (\text{A.22})$$

$$I_2^i(e_i, d_i) \equiv \int_0^\infty \text{Re} \left[\Delta_i(i\omega) \tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega) \right] d\omega. \quad (\text{A.23})$$

Por simplicidade, focaremos apenas no cálculo de $I_1^i(e_i, d_i)$, sendo análogo o cálculo de $I_2^i(e_i, d_i)$. Primeiramente, particionamos o intervalo de integração da seguinte forma

$$I_1^i(e_i, d_i) = \int_0^\Omega \text{Re} \left[\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega) \right] d\omega + \int_\Omega^\infty \text{Re} \left[\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega) \right] d\omega, \quad (\text{A.24})$$

onde Ω é uma frequência limite² acima da qual usamos a forma assintótica do integrando, como dada pela Eq. (A.10). Deste modo, podemos escrever

$$I_1(e_i, d_i) = \int_0^\Omega \text{Re} \left[\tilde{G}_i^{(loc)}(i\omega) \right] d\omega + \frac{C}{\Omega}, \quad (\text{A.25})$$

onde a constante $C = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \epsilon A(\epsilon) / 2\pi$ é obtida diretamente do valor do integrando, uma vez que o regime assintótico seja alcançado. Para realizarmos a primeira parte da integral, utilizamos o método de Romberg [169].

A.3 Passo 3

Uma vez resolvidos os problemas de uma impureza associados, o que no nosso caso corresponde a conhecermos as amplitudes de bósons escravos e_i e d_i para cada um dos N sítios da rede, podemos calcular a autoenergia eletrônica local

$$\Sigma_i(\omega) = \omega \left(1 - \frac{1}{Z_i} \right) - \varepsilon_i + v_i + \mu, \quad (\text{A.26})$$

e passamos agora ao terceiro passo do nosso algoritmo de solução da TEDCM, no qual temos que determinar as funções de Green locais da rede $G_{ii}(\omega)$, dada esta forma da autoenergia. Como estamos lidando com um problema de rede, é conveniente reescrevermos a autoenergia em uma forma matricial

$$\Sigma(\omega) = \omega(\mathbf{1} - \mathbf{Z}^{-1}) - \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{v} + \mu\mathbf{1}, \quad (\text{A.27})$$

onde os operadores $\boldsymbol{\varepsilon}$, \mathbf{Z} e \mathbf{v} são matrizes diagonais na base dos sítios $[\boldsymbol{\varepsilon}]_{ij} = \varepsilon_j \delta_{ij}$; $[\mathbf{Z}]_{ij} = Z_j \delta_{ij}$; $[\mathbf{v}]_{ij} = v_j \delta_{ij}$. Utilizando a Eq. (A.27) e a equação de Dyson, podemos escrever

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\omega) &= [(\omega + \mu)\mathbf{1} - \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{H}_0 - \Sigma(\omega)]^{-1} \\ &= [\omega\mathbf{Z}^{-1} - \mathbf{v} - \mathbf{H}_0]^{-1} \\ &= \mathbf{Z}^{1/2} \left[\omega - \mathbf{Z}^{1/2}(\mathbf{v} + \mathbf{H}_0)\mathbf{Z}^{1/2} \right]^{-1} \mathbf{Z}^{1/2}, \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

onde \mathbf{H}_0 é o Hamiltoniano da rede limpa (sem desordem) e não interagente $([\mathbf{H}_0]_{ij} = t_{ij})$. Uma vez que $0 < Z_i \leq 1$, $\sqrt{Z_i}$ é sempre bem definida. Introduzimos agora um Hamiltoniano efetivo \mathbf{H}_{eff}

$$\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{Z}^{1/2}(\mathbf{v} + \mathbf{H}_0)\mathbf{Z}^{1/2}, \quad (\text{A.29})$$

²Para fixarmos Ω , realizamos testes para vários valores de U e W , comparando, por exemplo, as Eqs. (A.22) e (A.24), e exigindo que diferença seja menor que uma dada tolerância. Tipicamente, $\Omega \gtrsim 50$.

de tal modo que

$$\mathbf{G}(\omega) = \mathbf{Z}^{1/2} [\omega - \mathbf{H}_{eff}]^{-1} \mathbf{Z}^{1/2}, \quad (\text{A.30})$$

e portanto

$$G_{ii}(\omega) = \langle i | \mathbf{G}(\omega) | i \rangle = Z_i \sum_{\nu} \frac{|\langle i | \nu \rangle|^2}{\omega - E_{\nu}}, \quad (\text{A.31})$$

onde $\mathbf{H}_{eff} |\nu\rangle = E_{\nu} |\nu\rangle$. Assim, podemos obter a função de Green local da rede diagonalizando o Hamiltoniano efetivo \mathbf{H}_{eff} , Eq. (A.29).

De maneira geral, a prescrição da TEDCM, que supõe uma autoenergia eletrônica local, sempre permite que calculemos $G_{ii}(\omega)$ através de uma inversão matricial, pois podemos fazer a associação $\varepsilon_i \rightarrow \varepsilon_i + \Sigma_i(\omega)$; ou seja, a autoenergia produz um deslocamento, dependente da frequência, nas energias originais dos sítios. No nosso caso, a aproximação de bósons escravos gera uma autoenergia que é linear na frequência (Eq. (A.26)), e que, como vimos acima, permite que encontremos $G_{ii}(\omega)$ não através de uma inversão matricial para cada frequência ω , mas através de apenas uma única diagonalização de um Hamiltoniano efetivo, Eq. (A.29), e de sucessivas aplicações da Eq. (A.31) para cada valor de ω , o que torna nossa abordagem extremamente atrativa e eficiente.

Como comentado acima, neste passo do algoritmo precisamos realizar uma diagonalização numérica. Para cumprirmos esta tarefa, utilizamos o pacote de subrotinas de álgebra linear LAPACK [170]. Em sua última versão, o LAPACK já vem escrito em FORTRAN 90. Mas, mais importante do que isso, é que o Compilador Fortran Intel[®] possui uma biblioteca interna, chamada de MKL [171], na qual temos uma versão paralela (obtidas utilizando-se OpenMP) de todas as subrotinas do LAPACK. O uso desta biblioteca MKL produz um ganho de tempo linear no número de processadores, o que acelera consideravelmente a velocidade de nossos cálculos numéricos.

A.4 Passo 4

O passo final do algoritmo da TEDCM envolve a aplicação da condição de autoconsistência $G_{ii}(\omega) \equiv G_i^{(loc)}(\omega)$, através da qual extraímos o novo valor da função de hibridização, $\Delta_i^{(novo)}(\omega)$, e voltamos ao passo 1 caso a convergência não tenha sido alcançada.

De maneira mais geral, este novo valor da função de hibridização pode ser pensado como um funcional da função de hibridização antiga, isto é,

$$\Delta_i^{(novo)}(\omega) = \Delta_i^{(novo)} \left\{ \Delta^{(antigo)}(\omega) \right\}, \quad (\text{A.32})$$

onde $\Delta^{(antigo)}(\omega)$ é um vetor tal que $\left[\Delta^{(antigo)}(\omega) \right]_i = \Delta_i^{(antigo)}(\omega)$, pois $\Delta_i^{(novo)}(\omega)$ depende do valor das funções de hibridização antigas em todos os sítios. Uma vez que a condição de autoconsistência seja estabelecida, a função de hibridização torna-se invariante

$$\Delta_i^{(novo)} \left\{ \Delta^{(antigo)}(\omega) \right\} = \Delta_i^{(antigo)}(\omega). \quad (\text{A.33})$$

Definindo-se um mapa $F_i = [\mathbf{F}]_i$ como a seguinte diferença

$$F_i \left(\Delta^{(antigo)}(\omega) \right) = \Delta_i^{(novo)} \left\{ \Delta^{(antigo)}(\omega) \right\} - \Delta_i^{(antigo)}(\omega), \quad (\text{A.34})$$

temos que a autoconsistência corresponde a resolvermos o seguinte sistema de equações não lineares

$$\mathbf{F} \left(\Delta^{(antigo)}(\omega) \right) = 0. \quad (\text{A.35})$$

Naturalmente, um único loop de TEDCM corresponde a aplicarmos \mathbf{F} apenas uma vez à função de hibridização.

A solução da Eq. (A.35) pode ser obtida através de métodos iterativos do tipo Newton-Raphson [169], que nos dão

$$\Delta^{(input)}(\omega) = \Delta^{(antigo)}(\omega) - \left[\mathbf{J}^{(antigo)} \right]^{-1} \mathbf{F} \left(\Delta^{(antigo)}(\omega) \right), \quad (\text{A.36})$$

onde $\mathbf{J}^{(antigo)}$ é o Jacobiano³ do sistema no ponto $\Delta^{(antigo)}(\omega)$, e $\Delta^{(input)}(\omega)$ é o novo palpite inicial para o laço de convergência do loop da TEDCM.

O verdadeiro Jacobiano não é conhecido e precisamos de alguma aproximação para calculá-lo. Uma aproximação simples é supormos

$$\mathbf{J}^{(antigo)} = -\frac{1}{\alpha} \mathbf{1}, \quad (\text{A.37})$$

onde $\alpha \in [0, 1]$. Se utilizarmos essa aproximação na Eq. (A.36), juntamente com a Eq. (A.34), podemos escrever

$$\Delta^{(input)}(\omega) = \alpha \Delta^{(novo)}(\omega) + (1 - \alpha) \Delta^{(antigo)}(\omega), \quad (\text{A.38})$$

que nada mais é do que uma mistura linear, com o parâmetro de mistura dado pela constante α , do valor de entrada e de saída do loop da TEDCM. Na maioria dos casos, a convergência do algoritmo da TEDCM é obtida com a utilização deste procedimento simples. Uma aproximação consideravelmente melhor para o Jacobiano, contudo ainda de fácil implementação, pode ser obtida utilizando-se o chamado método de Broyden [169]. Uma ótima discussão sobre a aplicação do método de Broyden ao loop de autoconsistência da TDCM é encontrada na Ref. [172].

Podemos tirar vantagem do fato de que toda a nossa solução é parametrizada em termos das amplitudes de bósons escravos e_i e d_i , de modo que não precisamos utilizar a função de hibridização como nosso critério de convergência, que, além de depender do sítio, depende das frequências, mas apenas o valor desta dupla em cada sítio. Consideramos que o algoritmo da TEDCM converge quando o valor máximo de $|e_i^{(novo)} - e_i^{(antigo)}|/e_i^{(antigo)}$ e de $|d_i^{(novo)} - d_i^{(antigo)}|/d_i^{(antigo)}$, calculados sítio a sítio, é menor do que um critério de tolerância, que tipicamente tomamos como 10^{-5} .

Em um primeiro momento do projeto, utilizamos a mistura linear dada pela Eq. (A.38) como maneira de gerar o palpite inicial para o próximo passo do loop de TEDCM. Tipicamente, utilizamos $\alpha = 0.4$ para correlações fracas e moderadas e $\alpha = 0.3$ para correlações fortes. Depois, já implementamos o método de Broyden, que não só é mais rápido que o método da mistura linear, pois converge em menos iterações, como também converge em certas regiões de parâmetros (especialmente para $W \gg U$ e $U \simeq U_c(W)$), nas quais o método de mistura linear não converge, ou converge demasiadamente devagar, apenas para valores de α muito pequenos.

³Formalmente, o Jacobiano é dado pela derivada funcional $J_{ij} = \delta F_i / \delta \Delta_j$.

Alguns resultados para integrais funcionais

Apresentaremos brevemente nesta seção a notação de integrais funcionais. Referências completas sobre o assunto podem ser encontradas em [126, 173, 174].

As integrais funcionais de nosso interesse são definidas em termos de estados coerentes [78]. Ao definirmos estes estados para férmions, precisamos introduzir variáveis de Grassmann¹, das quais listamos algumas propriedades abaixo

$$\xi_a \xi_b + \xi_b \xi_a = 0.$$

Em particular,

$$\xi_a^2 = 0. \quad (\text{B.1})$$

Podemos também definir o conjugado de ξ_a , denotado por ξ_a^* . A integração sobre variáveis de Grassmann é definida da seguinte forma

$$\int d\xi 1 = 0,$$

$$\int d\xi \xi = 1. \quad (\text{B.2})$$

Com a ajuda das Eqs. (B.1) e (B.2), podemos estabelecer, por exemplo, a seguinte igualdade

$$\int d\xi^* d\xi \exp(-a\xi^*\xi) = \int d\xi^* d\xi (1 - a\xi^*\xi) = a, \quad (\text{B.3})$$

onde a é um número complexo qualquer.

O resultado que nos interessa de fato é como realizar integrais Gaussianas multidimensionais sobre estas variáveis. Sendo ξ uma variável complexa para bósons e uma variável de Grassmann para férmions, temos o seguinte resultado geral, Ref. [126]

$$[\det A]^{-\zeta} e^{\sum_{\alpha\beta} \eta_\alpha^* A_{\alpha\beta} \eta_\beta} = \int d\mu(\xi) e^{-\sum_{\alpha\beta} \xi_\alpha^* A_{\alpha\beta} \xi_\beta + \sum_\alpha (\eta_\alpha^* \xi_\alpha + \eta_\alpha \xi_\alpha^*)}, \quad (\text{B.4})$$

onde

$$d\mu(\xi) = \frac{1}{\mathcal{N}} \prod_\alpha d\xi_\alpha^* d\xi_\alpha, \quad (\text{B.5})$$

$$\mathcal{N} = \begin{cases} 2\pi i, & \text{bósons} \\ 1, & \text{férmions} \end{cases}, \quad (\text{B.6})$$

¹Para bósons, utilizamos variáveis complexas, uma vez que os operadores bosônicos comutam (assim como qualquer número complexo), ao passo que os operadores fermiônicos anticomutam.

$$\zeta = \begin{cases} 1, & \text{bósons} \\ -1, & \text{férmions} \end{cases} . \quad (\text{B.7})$$

A função partição é definida da seguinte forma

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}, \quad (\text{B.8})$$

$$\mathcal{Z} = \int_{\xi_\alpha(\beta) = \zeta \xi(0)} \mathcal{D}(\xi_\alpha^*(\tau) \xi_\alpha(\tau)) e^{-S}, \quad (\text{B.9})$$

onde

$$\mathcal{D}(\xi_\alpha^*(\tau) \xi_\alpha(\tau)) = \frac{1}{\mathcal{N}} \prod_\alpha d\xi_\alpha^*(\tau) d\xi_\alpha(\tau), \quad (\text{B.10})$$

com α denotando os estados de uma partícula do sistema. Lembramos ainda que as variáveis $\xi_\alpha(\tau)$ e $\xi_\alpha^*(\tau)$ são periódicas (bósons) ou anti-periódicas (férmions) no tempo imaginário τ , com período igual a β . Temos também que

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_\alpha \xi_\alpha^*(\tau) (\partial_\tau - \mu) \xi_\alpha(\tau) + H(\xi_\alpha^*(\tau), \xi_\alpha(\tau)) \right] \quad (\text{B.11})$$

é a ação do sistema. Note que $\xi_\alpha(\tau)$ não é mais um operador, e sim uma variável complexa ou de Grassmann. Esta é uma das vantagens deste formalismo. A desvantagem é que agora temos que fazer uma integral multidimensional, que, de maneira geral, só sabemos realizar exatamente quando a ação é quadrática em $\xi_\alpha(\tau)$.

A função de Green, por sua vez, é definida da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\lambda\gamma}(\tau - \tau') &= -\langle T_\tau [a_\lambda(\tau) a_\gamma^\dagger(\tau')] \rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left[T_\tau e^{-\int_0^\beta (H - \mu N)} a_\lambda(\tau) a_\gamma^\dagger(\tau') \right], \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

com $a_\lambda(\tau)$ e $a_\gamma^\dagger(\tau')$ sendo operadores de destruição e criação no enfoque de interação, e T_τ sendo o operador de ordenamento temporal (imaginário), que deixa os maiores tempos sempre à esquerda dos menores. Vemos que a média que entra na definição de $\mathcal{G}_{\lambda\gamma}(\tau - \tau')$ é uma média térmica. Na notação de integrais funcionais, temos

$$\mathcal{G}_{\lambda\gamma}(\tau - \tau') = -\frac{1}{\mathcal{Z}} \int_{\xi_\alpha(\beta) = \zeta \xi(0)} \mathcal{D}(\xi_\alpha^*(\tau) \xi_\alpha(\tau)) \xi_\alpha(\tau) \xi_\alpha^*(\tau) e^{-S}. \quad (\text{B.13})$$

Métodos para o cálculo e propriedades do expoente α

O estimador $\hat{\alpha}$, definido na Ref. [118], e utilizado por nós como uma medida do expoente α , pode ser entendido da seguinte maneira. Considere que nosso modelo obedeça uma distribuição do tipo lei de potência

$$P(Z) = \frac{\alpha}{Z_{max}^\alpha} Z^{\alpha-1}, \quad (C.1)$$

onde α é o expoente da lei de potência e Z_{max} é o valor máximo da variável aleatória Z , para o qual a lei de potência para $P(Z)$ vale.

Considere agora um conjunto de dados contendo n observações, para as quais $Z_i \leq Z_{max}$. Queremos saber o valor mais provável de α , na Eq. (C.1), que gerou os nossos dados. A probabilidade de que todas essas n observações satisfaçam nosso modelo é proporcional a

$$p(Z|\alpha) = \prod_{i=1}^n \frac{\alpha}{Z_{max}^\alpha} Z_i^{\alpha-1}. \quad (C.2)$$

O mais provável é que os dados tenham sido gerados pelo modelo com um expoente α que maximize a probabilidade acima. Em vez de maximizarmos diretamente $p(Z|\alpha)$, trabalharemos com seu logaritmo

$$\mathcal{L} = \ln [p(Z|\alpha)] = n \ln [\alpha] - n\alpha \ln [Z_{max}] + (\alpha - 1) \sum_{i=1}^n \ln [Z_i], \quad (C.3)$$

donde

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \alpha} = \frac{n}{\alpha} - \sum_{i=1}^n \ln \left[\frac{Z_{max}}{Z_i} \right]. \quad (C.4)$$

Fazendo $\partial \mathcal{L} / \partial \alpha = 0$, temos a forma procurada do estimador

$$\alpha = \frac{n}{\sum_{i=1}^n \ln [Z_{max}/Z_i]} = \left\langle \ln \left[\frac{Z_{max}}{Z_i} \right] \right\rangle_{Z_i \leq Z_{max}}^{-1}. \quad (C.5)$$

Naturalmente, este é de fato um ponto de máximo, uma vez que $\partial^2 \mathcal{L} / \partial^2 \alpha = -n\alpha^{-2} < 0$.

Neste método, sabemos exatamente o valor de U , sendo que o valor de α referente a este U é dado pelo estimador acima. O erro associado a este estimador é dado por [118] $\sigma_{\hat{\alpha}} = \hat{\alpha} / \sqrt{n}$. Porém, nossa maior incerteza vem, na verdade, na determinação de Z_{max} .

O segundo método utilizado para o cálculo do expoente α é baseado na função

$$g(\mu) = \langle Z^{-\mu} \rangle_{Z_i \leq Z_{max}}^{-1}, \quad (C.6)$$

onde μ é um parâmetro real, e assumimos que Z é distribuído segundo a Eq. (C.1). Calculando o valor médio, acima temos

$$\begin{aligned}
 g(\mu) &= \left[\frac{\alpha}{Z_{max}^\alpha} \int_0^{Z_{max}} Z^{\alpha-\mu-1} dZ \right]^{-1} \\
 &= \left[\frac{\alpha}{Z_{max}^\mu} \frac{1}{\alpha - \mu} \right]^{-1} \\
 &= \frac{Z_{max}^\mu}{\alpha} (\alpha - \mu). \tag{C.7}
 \end{aligned}$$

Calculamos então a função $g(\mu)$, com μ fixo, para vários valores de U , e encontramos o valor de interação U_μ para o qual ela se anula, onde temos que $\alpha = \mu$. Este método é complementar ao primeiro, uma vez que nele o que é conhecido é o valor de α , e encontramos o valor de U_μ pela extrapolação linear da Eq. (C.7). Novamente, a maior fonte de erro neste método está associada à escolha do valor de Z_{max} .

Por fim, gostaríamos de mostrar que o expoente α mede o desvio padrão σ_{\log} da distribuição de $\ln[Z]$, com $P(Z)$ novamente dada pela Eq. (C.1). Primeiramente, calculamos o valor médio de $\ln[Z]$

$$\begin{aligned}
 \langle \ln[Z] \rangle &= \frac{\alpha}{Z_{max}^\alpha} \int_0^{Z_{max}} Z^{\alpha-1} \ln[Z] dZ \\
 &= \frac{\alpha}{Z_{max}^\alpha} \left\{ \frac{1}{\alpha} Z^\alpha \ln[Z] \Big|_0^{Z_{max}} - \frac{1}{\alpha} \int_0^{Z_{max}} Z^{\alpha-1} dZ \right\} \\
 &= \ln[Z_{max}] - \frac{1}{\alpha}. \tag{C.8}
 \end{aligned}$$

Agora, o valor médio de $(\ln[Z])^2$

$$\begin{aligned}
 \langle (\ln[Z])^2 \rangle &= \frac{\alpha}{Z_{max}^\alpha} \int_0^{Z_{max}} Z^{\alpha-1} (\ln[Z])^2 dZ \\
 &= \frac{\alpha}{Z_{max}^\alpha} \left\{ \frac{1}{\alpha} Z^\alpha (\ln[Z])^2 \Big|_0^{Z_{max}} - \frac{2}{\alpha} \int_0^{Z_{max}} Z^{\alpha-1} \ln[Z] dZ \right\} \\
 &= (\ln[Z_{max}])^2 - \frac{2}{\alpha} \left(\ln[Z_{max}] - \frac{1}{\alpha} \right). \tag{C.9}
 \end{aligned}$$

Deste modo,

$$\begin{aligned}
 \sigma_{\log} &= \sqrt{\langle (\ln[Z])^2 \rangle - \langle \ln[Z] \rangle^2} \\
 &= \frac{1}{\alpha}, \tag{C.10}
 \end{aligned}$$

como queríamos demonstrar.

Expansão das equações de campo médio

O primeiro passo neste cálculo é expandirmos uma função $f_i(x_i, y_i)$ qualquer, por exemplo, Z_i em (4.37), em termo das energias ε_i . Algumas quantidades físicas não possuem correções de primeira ordem no caso de simetria partícula-buraco, de tal forma que precisamos ir até segunda ordem na energia das impurezas, e nossa série de Taylor fica (utilizando a convenção de Einstein para a soma)

$$f_i(x_i, y_i) \simeq f_0 + \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_i} \Big|_0 X_{ij} + \frac{\partial f_i}{\partial y_i} \Big|_0 Y_{ij} \right) \varepsilon_j + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_i} \Big|_0 X'_{ijk} + \frac{\partial f_i}{\partial y_i} \Big|_0 Y'_{ijk} \right. \\ \left. + \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_i^2} \Big|_0 X_{ij} X_{ik} + \frac{\partial^2 f_i}{\partial y_i^2} \Big|_0 Y_{ij} Y_{ik} + \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_i \partial y_i} \Big|_0 (X_{ik} Y_{ij} + X_{ij} Y_{ik}) \right) \varepsilon_j \varepsilon_k, \quad (\text{D.1})$$

onde

$$X_{ij} \equiv \frac{\partial x_i}{\partial \varepsilon_j} \quad \text{e} \quad X'_{ijk} \equiv \frac{\partial^2 x_i}{\partial \varepsilon_j \partial \varepsilon_k}, \quad (\text{D.2})$$

com uma notação análoga para Y . Vemos que aparecem derivadas do tipo $\partial x_i / \partial \varepsilon_j$, indicando que quantidades associadas ao sítio i dependem da energia dos outros sítios da rede, e não somente da energia local ε_i . Isso decorre do fato de que resolvemos o problema de maneira autoconsistente, encontrando a configuração espacial dos parâmetros de bósons escravos que minimiza a energia livre em (4.36).

O procedimento padrão para a realização da expansão é o seguinte:

1. Expande-se o lado esquerdo das equações de campo médio (4.48) e (4.49), utilizando-se a Eq. (D.1);
2. Realizam-se as somas de Matsubara, utilizando-se os resultados do Apêndice (E);
3. Expande-se então o lado direito das equações de campo médio, dados pelas funções w_1 (Eq. (4.50)) e w_2 (Eq. (4.51));
4. Compara-se o resultado destas expansões até a ordem desejada para calcularmos os coeficientes X_{ij} , Y_{ij} , X'_{ijk} e Y'_{ijk} .

D.1 Termos de primeira ordem

Encontramos os termos de primeira ordem nesta expansão (os coeficientes X_{ij} e Y_{ij}) através da linearização das equações de campo médio. Para iniciarmos, expandiremos Z_i e $\tilde{\varepsilon}_i$, Eq. (4.46) e (4.47) respectivamente, o que nos dá

$$Z_i = Z_0 + \delta Z_i^{(1)} + \mathcal{O}(\varepsilon_i^2) \quad (\text{D.3})$$

e

$$\tilde{\varepsilon}_i - \varepsilon_i = \delta \tilde{\varepsilon}_i^{(1)} + \mathcal{O}(\varepsilon_i^2), \quad (\text{D.4})$$

com

$$\delta Z_i^{(1)} = g_1(u) X_{ij} \varepsilon_j, \quad (\text{D.5})$$

$$\delta \tilde{\varepsilon}_i^{(1)} = \frac{U}{2} f_1(u) Y_{ij} \varepsilon_j, \quad (\text{D.6})$$

onde $Z_0 = 1 - u^2$, e

$$g_1(u) = 4u\sqrt{1-u}, \quad (\text{D.7})$$

$$f_1(u) = \frac{1}{\sqrt{1-u}} (2 + u(1-u)). \quad (\text{D.8})$$

Para linearizarmos a Eq. (4.48), começamos expandindo a função de Green das quasipartículas \tilde{G}_{ii} , Eq. (4.41). Usando as Eqs. (D.3) e (D.4), obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{ii}^{(1)} &= \langle i | \left[i\omega_n \mathbf{1} - \varepsilon - \delta \tilde{\varepsilon}^{(1)} - Z_0 \left(\mathbf{1} + \frac{1}{Z_0} \delta \mathbf{Z}^{(1)} \right)^{1/2} \mathbf{H}_0 \left(\mathbf{1} + \frac{1}{Z_0} \delta \mathbf{Z}^{(1)} \right)^{1/2} \right]^{-1} | i \rangle \\ &= \langle i | \left[i\omega_n \mathbf{1} - Z_0 \mathbf{H}_0 - \varepsilon - \delta \tilde{\varepsilon}^{(1)} - \frac{1}{2} (\delta \mathbf{Z}^{(1)} \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_0 \delta \mathbf{Z}^{(1)}) \right]^{-1} | i \rangle \\ &= \langle i | \left[\left(\tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \right)^{-1} \left(\mathbf{1} - \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \left\{ \varepsilon + \delta \tilde{\varepsilon}^{(1)} + \frac{1}{2} (\delta \mathbf{Z}^{(1)} \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_0 \delta \mathbf{Z}^{(1)}) \right\} \right) \right]^{-1} | i \rangle \\ &= \langle i | \left[\tilde{\mathbf{G}}^{(0)} + \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \left\{ \varepsilon + \delta \tilde{\varepsilon}^{(1)} + \frac{1}{2} (\delta \mathbf{Z}^{(1)} \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_0 \delta \mathbf{Z}^{(1)}) \right\} \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \right] | i \rangle, \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

onde $\left[\tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \right]^{-1} = i\omega_n \mathbf{1} - Z_0 \mathbf{H}_0$, e utilizamos agora uma notação matricial mais compacta, em que $[\delta \tilde{\varepsilon}^{(1)}]_{ij} = \delta_{ij} \delta \tilde{\varepsilon}_i^{(1)}$ e $[\delta \mathbf{Z}^{(1)}]_{ij} = \delta_{ij} \delta Z_i^{(1)}$. A soma de Matsubara fica

$$T \sum_n \tilde{G}_{ii}^{(1)} = T \sum_n \tilde{G}_{ii}^{(0)} + T \sum_n \tilde{G}_{ik}^{(0)} \tilde{G}_{ki}^{(0)} \left(\varepsilon_k + \delta \tilde{\varepsilon}_k^{(1)} \right) + \frac{1}{2} T \sum_n \left\{ \tilde{G}_{ik}^{(0)} h_{kl} \tilde{G}_{li}^{(0)} \delta Z_k^{(1)} + \tilde{G}_{ik}^{(0)} h_{kl} \tilde{G}_{li}^{(0)} \delta Z_l^{(1)} \right\}$$

Com a ajuda das Eqs. (E.7), (E.9) e (E.10), temos

$$T \sum_n \tilde{G}_{ii}^{(1)} = T \sum_n \tilde{G}_{ii}^{(0)} + \frac{1}{Z_0} \Pi_{ik}^{(0)} \left(\varepsilon_k + \delta \tilde{\varepsilon}_k^{(1)} \right) + \frac{1}{Z_0} \Pi_{ik}^{(1)} \delta Z_k^{(1)}. \quad (\text{D.10})$$

Assumindo simetria partícula-buraco, $\Pi_{ik}^{(1)} = 0$, Eq. (E.17), e a Eq. (D.11) reduz-se a

$$T \sum_n \tilde{G}_{ii}^{(1)} = T \sum_n \tilde{G}_{ii}^{(0)} + \frac{1}{Z_0} \Pi_{ik}^{(0)} \left(\varepsilon_k + \delta \tilde{\varepsilon}_k^{(1)} \right). \quad (\text{D.11})$$

Vemos que, para simetria partícula-buraco, a expressão final depende apenas das correções para a energia.

Expandimos agora a função $w_1(x_i, y_i)$, dada na Eq. (4.50)

$$w_1^{(1)}(x_i, y_i) = \frac{1}{2} (1 - \sqrt{1-u} Y_{ij} \varepsilon_j). \quad (\text{D.12})$$

Igualando as Eqs. (D.11) e (D.12), e utilizando a Eq. (D.6), juntamente com a solução do caso uniforme, $T \sum_n \tilde{G}_{ii}^{(0)} = 1/2$, temos a versão linearizada da primeira equação de campo médio (Eq. (4.48))

$$\frac{1}{Z_0} \mathbf{\Pi}^{(0)} \varepsilon + \frac{U}{2Z_0} f_1(u) \mathbf{\Pi}^{(0)} \mathbf{Y} \varepsilon = -\frac{1}{2} \sqrt{1-u} \mathbf{Y} \varepsilon.$$

Resolvendo para \mathbf{Y} , obtemos

$$\mathbf{Y} = -2(1-u)^{1/2} \mathbf{L}^{-1}(u) \mathbf{\Pi}^{(0)}, \quad (\text{D.13})$$

onde

$$\mathbf{L}(u) = (1+u)(1-u)^2 \mathbf{1} + \frac{U_c u}{2} (2+u(1-u)) \mathbf{\Pi}^{(0)}. \quad (\text{D.14})$$

Aplicando o mesmo procedimento para a segunda equação de campo médio, Eq. (4.49), podemos determinar \mathbf{X} . Contudo, no caso em que a simetria partícula buraco está presente,

$$\mathbf{X} = \mathbf{0}. \quad (\text{D.15})$$

Deste modo, vemos que $\delta Z_i^{(1)}$, Eq. (D.5) é zero, e, portanto, precisamos ir até segunda ordem na expansão.

D.2 Termos de segunda ordem

Para encontrarmos os termos de segunda ordem (X'_{ijk} e Y'_{ijk}), consideraremos que a desordem seja introduzida apenas pela presença de uma única impureza localizada no sítio o , simplificando consideravelmente os cálculos. Assim, o potencial de desordem possui a seguinte forma, $\varepsilon_i = \delta_{io}\varepsilon_o$. Também assumiremos simetria partícula-buraco, pois é neste caso em que temos $x_i - x_o = O(\varepsilon_i^2)$. A expansão de Z_i e $\tilde{\varepsilon}_i$ fica

$$Z_i = Z_0 + \frac{1}{2} \delta Z_i^{(2)}, \quad (\text{D.16})$$

onde

$$\delta Z_i = \left(g_1(u) X'_{ioo} - \frac{1}{8} g_1(u)^2 Y'_{io}{}^2 \right) \varepsilon_o^2 \quad (\text{D.17})$$

e

$$\tilde{\varepsilon}_i = \delta_{io}\varepsilon_o + \delta\tilde{\varepsilon}_i^{(1)} + \frac{1}{2} \delta\tilde{\varepsilon}_i^{(2)}, \quad (\text{D.18})$$

$$\delta\tilde{\varepsilon}_i^{(2)} = \frac{U}{2} f_1(u) Y'_{ioo} \varepsilon_o^2, \quad (\text{D.19})$$

com $\delta\tilde{\varepsilon}_i^{(1)}$ dado pela Eq. (D.6).

Expandindo a primeira equação de campo médio, Eq. (4.48), até segunda ordem, obtemos

$$\mathbf{Y}' = \mathbf{0}, \quad (\text{D.20})$$

onde $[\mathbf{Y}']_{ij} = \delta_{ij} Y'_{ioo}$. Assim, o termo de segunda ordem em $\tilde{\varepsilon}_i$ é zero, e só nos resta avaliar a segunda equação de campo médio, Eq. (4.48), para obtermos X'_{ioo} . Começaremos expandindo a função de Green de quasipartícula até segunda ordem na energia, num procedimento análogo àquele da Eq. (D.9)

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{G}}^{(2)} &= \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} + \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \left(\varepsilon + \delta\tilde{\varepsilon}^{(1)} + \frac{1}{4} (\delta\mathbf{Z}^{(2)} \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_0 \delta\mathbf{Z}^{(2)}) \right) \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \\ &+ \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} (\varepsilon + \delta\tilde{\varepsilon}^{(1)}) \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} (\varepsilon + \delta\tilde{\varepsilon}^{(1)}) \tilde{\mathbf{G}}^{(0)}. \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

A quantidade que de fato aparece em (4.49) não é $\tilde{\mathbf{G}}^{(2)}$, mas sim

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}^{1/2} \tilde{\mathbf{G}}^{(2)} \mathbf{Z}^{1/2} \mathbf{H}_0 &= Z_0 \left(\mathbf{1} + \frac{1}{4Z_0} \delta\mathbf{Z}^{(2)} \right) \tilde{\mathbf{G}}^{(2)} \left(\mathbf{1} + \frac{1}{4Z_0} \delta\mathbf{Z}^{(2)} \right) \mathbf{H}_0 \\ &= Z_0 \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \mathbf{H}_0 + Z_0 \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} (\varepsilon + \delta\tilde{\varepsilon}^{(1)}) \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \mathbf{H}_0 + \frac{Z_0}{4} \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} (\delta\mathbf{Z}^{(2)} \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_0 \delta\mathbf{Z}^{(2)}) \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \mathbf{H}_0 \\ &+ Z_0 \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} (\varepsilon + \delta\tilde{\varepsilon}^{(1)}) \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} (\varepsilon + \delta\tilde{\varepsilon}^{(1)}) \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \mathbf{H}_0 + \frac{1}{4} (\delta\mathbf{Z}^{(2)} \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \mathbf{H}_0 + \tilde{\mathbf{G}}^{(0)} \delta\mathbf{Z}^{(2)} \mathbf{H}_0). \end{aligned}$$

Utilizando as Eqs. (E.10) e (E.13)-(E.15), podemos realizar as somas de Matsubara. Lembrando que temos $\Pi_{ik}^{(3)} = 0$ e mantendo apenas os termos de segunda ordem, obtemos

$$T \sum_n \sqrt{Z_i} \tilde{G}_{ik}^{(2)}(i\omega_n) \sqrt{Z_k} h_{ki} = \frac{1}{4} \Pi_{ik}^{(2)} \delta Z_k^{(2)} - \frac{U_c}{64} \left(\delta Z_i^{(2)} - \frac{1}{zt} h_{ik} \delta Z_k^{(2)} \right) + \frac{1}{Z_0} \Pi_{ikl}^{(4)} \left(\varepsilon_k + \delta \tilde{\varepsilon}_k^{(1)} \right) \left(\varepsilon_l + \delta \tilde{\varepsilon}_l^{(1)} \right). \quad (\text{D.22})$$

Expandindo agora a Eq. (4.51) até segunda ordem, vem que

$$w^{(2)}(x_i, y_i) = -\frac{U}{16} \left(\frac{(1-u)^{1/2}(1+u^2)}{u^2} X'_{ioo} - \frac{4}{u} Y_{io}^2 \right) \varepsilon_o^2. \quad (\text{D.23})$$

Agora, devemos igualar as Eqs. (D.22) e (D.23) para obtermos a expansão até segunda ordem da segunda equação de campo médio. Para fazermos isso, é mais conveniente reescrevermos as equações acima em uma forma matricial. Para lidarmos com o tensor $\Pi_{ikl}^{(4)}$, utilizaremos a seguinte convenção

$$\Pi_{ikl}^{(4)} \left(\varepsilon_k + \delta \tilde{\varepsilon}_k^{(1)} \right) \left(\varepsilon_l + \delta \tilde{\varepsilon}_l^{(1)} \right) \equiv \left[\left(\varepsilon + \delta \tilde{\varepsilon}^{(1)} \right) \overleftarrow{\Pi}^{(4)} \left(\varepsilon + \delta \tilde{\varepsilon}^{(1)} \right) \right]_i, \quad (\text{D.24})$$

de tal modo que encontramos, utilizando a Eq. (D.17),

$$\begin{aligned} -\frac{U}{16} \left(\frac{(1-u)^{1/2}(1+u^2)}{u^2} \mathbf{X}' - \frac{4}{u} \mathbf{Y}^2 \right) &= \frac{1}{4} \mathbf{\Pi}^{(2)} \left(g_1(u) \mathbf{X}' - \frac{1}{8} g_1(u)^2 \mathbf{Y}^2 \right) \\ &- \frac{U_c}{64} \left(g_1(u) \mathbf{X}' - \frac{1}{8} g_1(u)^2 \mathbf{Y}^2 - \frac{1}{zt} \mathbf{H}_0 \left(g_1(u) \mathbf{X}' - \frac{1}{8} g_1(u)^2 \mathbf{Y}^2 \right) \right) \\ &+ \frac{1}{Z_0 \varepsilon_o^2} \left(\varepsilon + \delta \tilde{\varepsilon}^{(1)} \right) \overleftarrow{\Pi}^{(4)} \left(\varepsilon + \delta \tilde{\varepsilon}^{(1)} \right). \end{aligned}$$

Resolvendo a equação acima para \mathbf{X}' , utilizando agora as Eqs. (D.6), (D.13) e (D.14), temos

$$\begin{aligned} \mathbf{X}' &= u(1-u)^{1/2} \mathbf{M}_1^{-1}(u) \left(4\mathbf{M}_2(u) \mathbf{L}^{-2}(u) \mathbf{\Pi}^{(0)2} \right. \\ &- \left. (1+u)(1-u)^2 \mathbf{L}^{-1}(u) \overleftarrow{\Pi}^{(4)} \mathbf{L}^{-1}(u) \right), \end{aligned} \quad (\text{D.25})$$

onde

$$\mathbf{M}_1(u) = u^2 \left\{ \mathbf{\Pi}^{(2)} + \frac{U_c}{16zt} \mathbf{H}_0 \right\} + \frac{U_c}{16}, \quad (\text{D.26})$$

$$\mathbf{M}_2(u) = \frac{u^2}{2} (1-u) \left\{ \mathbf{\Pi}^{(2)} + \frac{U_c}{16zt} \mathbf{H}_0 - \frac{U_c}{16} \right\} + \frac{U_c}{8}. \quad (\text{D.27})$$

Matrizes de polarização

Durante a expansão desenvolvida na seção (4.3), precisamos avaliar uma série de somas sobre frequências de Matsubara [59, 60]. No presente caso, essas somas são simples, pois a função de Green de quasipartícula do sistema uniforme $\tilde{G}_{ik}^0(i\omega_n)$ (Eq. (4.41)) possui uma forma não interagente, e podemos expandi-la trivialmente em termos de seus autovalores e autovetores

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{ik}^0 &= \langle i | \frac{1}{i\omega_n - \tilde{\epsilon}_o - Z_o \mathbf{H}_0} | k \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{q}} \frac{\langle i | \mathbf{q} \rangle \langle \mathbf{q} | k \rangle}{i\omega_n - \tilde{\epsilon}_o - Z_o \varepsilon(\mathbf{q})},\end{aligned}\tag{E.1}$$

onde $\varepsilon(\mathbf{q})$ e $|\mathbf{q}\rangle$ são, respectivamente, os autovalores e autovetores do problema uniforme e não interagente definido por \mathbf{H}_0 . Os autovetores, quando expressos na base dos sítios, são dados simplesmente por ondas planas

$$\langle i | \mathbf{q} \rangle = \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}}{\sqrt{V}},\tag{E.2}$$

onde $V = L^d$ é o volume do sistema, que possui dimensão linear L . Já os autovalores dependem dos elementos de “hopping” t_{ij} . Como consideramos “hopping” apenas entre primeiros vizinhos ($t_{ij} = -t$) em uma rede cúbica d dimensional, eles são dados por

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = -2t \sum_{i=1}^d \cos q_i,$$

onde os momentos são definidos por $q_i = 2\pi n_i/L$, com $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(L/2 - 1), L/2$.

E.1 Somas de Matsubara e definição das matrizes $\Pi_{\mathbf{q}}^{(i)}$

Devido à forma de $\tilde{G}_{ik}^0(i\omega_n)$ nas Eq. (E.1), as somas de Matsubara que temos que avaliar reduzem-se a uma das seguintes classes [59, 60]

•

$$T \sum_n \frac{1}{i\omega_n - x} = f(x),\tag{E.3}$$

•

$$T \sum_n \frac{i\omega_n}{i\omega_n - x} = xf(x),\tag{E.4}$$

$$T \sum_n \frac{1}{i\omega_n - x} \frac{1}{i\omega_n - y} = \frac{f(x) - f(y)}{x - y}, \quad (\text{E.5})$$

$$T \sum_n \frac{1}{i\omega_n - x} \frac{1}{i\omega_n - y} \frac{1}{i\omega_n - u} = \frac{(y - u)f(x) + (u - x)f(y) + (x - y)f(u)}{(y - x)(u - y)(x - u)}, \quad (\text{E.6})$$

onde $f(x)$ é a função distribuição de Fermi-Dirac, $f(x) = [1 + \exp[x]/T]$.

Utilizando agora as Eqs. (E.3)-(E.6), podemos definir as matrizes de polarização que aparecem na nossa expansão. A primeira delas é

$$\begin{aligned} \Pi_{ik}^{(0)} &= Z_0 T \sum_n \tilde{G}_{ik}^0 \tilde{G}_{ki}^0 \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)} \Pi_{\mathbf{q}}^{(0)}, \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

onde

$$\Pi_{\mathbf{q}}^{(0)} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{f(\varepsilon(\mathbf{p})) - f(\varepsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q}))}{(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q}))} \quad (\text{E.8})$$

é a função de Lindhard estática [59, 60, 175]. Esta função de polarização sempre aparece quando estudamos teoria de resposta linear em um gás de elétrons.

As outras funções de polarização, que podem ser pensadas como generalizações da função de Lindhard, são dadas por

$$\begin{aligned} \Pi_{ik}^{(1)} &= Z_0 \sum_l T \sum_n h_{kl} \tilde{G}_{ik}^0 \tilde{G}_{li}^0 \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)} \Pi_{\mathbf{q}}^{(1)}, \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

$$\begin{aligned} \Pi_{ik}^{(2)} &= Z_0 \sum_{l,m} T \sum_n h_{kl} h_{mi} [\tilde{G}_{ik}^0 \tilde{G}_{lm}^0 + \tilde{G}_{il}^0 \tilde{G}_{mk}^0] \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)} \Pi_{\mathbf{q}}^{(2)}, \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

onde $h_{kl} = \langle k | \mathbf{H}_0 | l \rangle$ e

$$\Pi_{\mathbf{q}}^{(1)} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}} [\varepsilon(\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q})] \frac{f(\varepsilon(\mathbf{p})) - f(\varepsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q}))}{(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q}))}, \quad (\text{E.11})$$

$$\Pi_{\mathbf{q}}^{(2)} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}} [\varepsilon(\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q})]^2 \frac{f(\varepsilon(\mathbf{p})) - f(\varepsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q}))}{(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q}))}. \quad (\text{E.12})$$

Essas funções de polarização aparecem na expansão em primeira ordem na energia. Como vamos até segunda ordem, precisamos introduzir alguns tensores de polarização. Estes tensores de polarização são tensores de ordem 3 e não podem ser expressos em termos de transformadas de Fourier como as Eqs. (E.7), (E.9) e (E.10), sendo dados por

$$\begin{aligned} \Pi_{ikl}^{(3)} &= Z_0^2 T \sum_n \tilde{G}_{ik}^0 \tilde{G}_{kl}^0 \tilde{G}_{li}^0 \\ &= -Z_0^2 \frac{1}{V^3} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}''} e^{i\mathbf{r}_i \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{q}'')} e^{i\mathbf{r}_k \cdot (\mathbf{q}' - \mathbf{q})} e^{i\mathbf{r}_l \cdot (\mathbf{q}'' - \mathbf{q}')} \\ &\times \frac{(\varepsilon(\mathbf{q}'') - \varepsilon(\mathbf{q}')) f(\varepsilon(\mathbf{q})) + (\varepsilon(\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{q}'')) f(\varepsilon(\mathbf{q}')) + (\varepsilon(\mathbf{q}') - \varepsilon(\mathbf{q})) f(\varepsilon(\mathbf{q}''))}{(\varepsilon(\mathbf{q}') - \varepsilon(\mathbf{q})) (\varepsilon(\mathbf{q}'') - \varepsilon(\mathbf{q}')) (\varepsilon(\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{q}''))}, \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

$$\begin{aligned}
 \Pi_{ikl}^{(4)} &= Z_0^2 T \sum_m \sum_n \tilde{G}_{ik}^0 \tilde{G}_{kl}^0 \tilde{G}_{lm}^0 h_{mi} \\
 &= -Z_0^2 \frac{1}{3V^3} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}''} e^{i\mathbf{r}_i \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{q}'')} e^{i\mathbf{r}_k \cdot (\mathbf{q}' - \mathbf{q})} e^{i\mathbf{r}_l \cdot (\mathbf{q}'' - \mathbf{q}')} \times (\varepsilon(\mathbf{q}) + \varepsilon(\mathbf{q}') + \varepsilon(\mathbf{q}'')) \\
 &\times \frac{(\varepsilon(\mathbf{q}'') - \varepsilon(\mathbf{q}')) f(\varepsilon(\mathbf{q})) + (\varepsilon(\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{q}'')) f(\varepsilon(\mathbf{q}')) + (\varepsilon(\mathbf{q}') - \varepsilon(\mathbf{q})) f(\varepsilon(\mathbf{q}''))}{(\varepsilon(\mathbf{q}') - \varepsilon(\mathbf{q})) (\varepsilon(\mathbf{q}'') - \varepsilon(\mathbf{q}')) (\varepsilon(\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{q}''))}. \quad (\text{E.14})
 \end{aligned}$$

Lembramos também que o valor crítico de interação U_c para o qual a transição metal-isolante de Mott ocorre também pode ser expresso em termos de uma soma de Matsubara

$$U_c = -16 \sum_k T \sum_n \tilde{G}_{ik}^0 h_{ki}. \quad (\text{E.15})$$

Agora, gostaríamos de demonstrar que, para o caso em que há simetria partícula-buraco ($\mu = 0$), temos $\Pi_{ik}^{(1)} = 0$ e $\Pi_{ikl}^{(3)} = 0$. Por simplicidade, consideremos $d = 1$, onde podemos escrever

$$\varepsilon(q) = -2t \cos[q]. \quad (\text{E.16})$$

Vemos que esta dispersão possui a propriedade $\varepsilon(q + \pi) = -\varepsilon(q)$ e também notamos que, de forma geral, $f(-\varepsilon(\mathbf{q})) = 1 - f(\varepsilon(\mathbf{q}))$. Das Eqs. (E.9) e (E.11), podemos escrever

$$\begin{aligned}
 \Pi_{ik}^{(1)} &= \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\pi}^{+\pi} dq e^{iq(r_i - r_k)} \left\{ \int_{-\pi}^{+\pi} dp [\varepsilon(p) + \varepsilon(p - q)] \frac{f(\varepsilon(p)) - f(\varepsilon(p - q))}{(\varepsilon(p) - \varepsilon(p - q))} \right\} \\
 \Pi_{ik}^{(1)} &= \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\pi}^{+\pi} dq e^{iq(r_i - r_k)} \left\{ \int_{-\pi}^0 dp [\varepsilon(p) + \varepsilon(p - q)] \frac{f(\varepsilon(p)) - f(\varepsilon(p - q))}{(\varepsilon(p) - \varepsilon(p - q))} \right. \\
 &\quad \left. + \int_0^{+\pi} dp [\varepsilon(p) + \varepsilon(p - q)] \frac{f(\varepsilon(p)) - f(\varepsilon(p - q))}{(\varepsilon(p) - \varepsilon(p - q))} \right\}.
 \end{aligned}$$

Fazendo $p \rightarrow p + \pi$ na primeira integral

$$\begin{aligned}
 \Pi_{ik}^{(1)} &= \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\pi}^{+\pi} dq e^{iq(r_i - r_k)} \left\{ - \int_0^{\pi} dp [\varepsilon(p) + \varepsilon(p - q)] \frac{f(\varepsilon(p)) - f(\varepsilon(p - q))}{(\varepsilon(p) - \varepsilon(p - q))} \right. \\
 &\quad \left. + \int_0^{+\pi} dp [\varepsilon(p) + \varepsilon(p - q)] \frac{f(\varepsilon(p)) - f(\varepsilon(p - q))}{(\varepsilon(p) - \varepsilon(p - q))} \right\} \\
 &= 0. \quad (\text{E.17})
 \end{aligned}$$

A prova para $\Pi_{ikl}^{(3)}$ é análoga. Basta notarmos que a soma sobre momentos é restrita à primeira zona de Brillouin, que, por sua vez, pode estar contida tanto em $[-\pi, \pi]$ quanto em $[0, 2\pi]$. Assim, a Eq. (E.13) troca de sinal sob a operação $(q, q', q'') \rightarrow (q + \pi, q' + \pi, q'' + \pi)$, e temos $\Pi_{ikl}^{(3)} = 0$.

Um último comentário acerca do fato de que as matrizes de polarização são expressas apenas em termos do sistema uniforme e não interagente. Pela forma da Eq. (E.1), esperaríamos que houvesse uma dependência com $\tilde{\varepsilon}_0$ e Z_0 , pois, por exemplo, uma soma do tipo daquela na Eq. (E.3) é dada por

$$T \sum_n \frac{1}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_0 - Z_0 \varepsilon(\mathbf{q})} = f(\tilde{\varepsilon}_0 + Z_0 \varepsilon(\mathbf{q})).$$

O ponto é que, para $T \rightarrow 0$, $f(x) \rightarrow \theta(-x)$, e podemos utilizar a seguinte propriedade da função degrau

$$\theta(ax + b) = \begin{cases} \theta(x + b/a), & a > 0 \\ \theta(-x - b/a), & a < 0 \end{cases}, \quad (\text{E.18})$$

que nos dá

$$\theta(-Z_0 \varepsilon(\mathbf{q}) - \tilde{\varepsilon}_0) = \theta(-\varepsilon(\mathbf{q}) + \tilde{\varepsilon}_0/Z_0) = \theta(-\varepsilon(\mathbf{q}) + \varepsilon_F), \quad (\text{E.19})$$

onde ε_F é a energia de Fermi do sistema, e utilizamos a relação $\tilde{\varepsilon}_0/Z_0 = \varepsilon_F$, que vale dentro da teoria de bósons escravos, Eqs. (2.105) e (3.29). Deste modo, vemos que, de fato, toda a dependência com as interações desaparece.

E.2 Limite assintótico

Tomamos agora o limite assintótico das Eqs. (E.7), (E.9) e (E.10) fazendo $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$, o que corresponde a olhar apenas para longos comprimentos de onda. Neste limite, utilizaremos a seguinte relação

$$V^{-1} \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow (2\pi)^{-d} \int d\Omega_d \int_0^\Lambda dq q^{d-1},$$

onde $d\Omega_d$ é o elemento de ângulo sólido em d dimensões e Λ é um “cutoff” que garante nosso limite de longos comprimentos de onda. As Eqs. (E.7), (E.9) e (E.10) são agora dadas por

$$\begin{aligned} \Pi_{ik}^{(0)} &\sim \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\Omega_d \int_0^\Lambda dq q^{d-1} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)} \left\{ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial f(\varepsilon(\mathbf{p}))}{\partial \varepsilon(\mathbf{p})} \right\} \\ &\sim \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\Omega_d \int_0^\Lambda dq q^{d-1} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)} \left\{ \int d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right\} \\ &\sim -\rho(\varepsilon_F) \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\Omega_d \int_0^\Lambda dq q^{d-1} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)}. \end{aligned} \quad (\text{E.20})$$

$$\begin{aligned} \Pi_{ik}^{(1)} &\sim \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\Omega_d \int_0^\Lambda dq q^{d-1} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)} \left\{ \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}} 2\varepsilon(\mathbf{p}) \frac{\partial f(\varepsilon(\mathbf{p}))}{\partial \varepsilon(\mathbf{p})} \right\} \\ &\sim \varepsilon_F \Pi_{ik}^{(0)}. \end{aligned} \quad (\text{E.21})$$

$$\begin{aligned} \Pi_{ik}^{(2)} &\sim \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\Omega_d \int_0^\Lambda dq q^{d-1} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)} \left\{ \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}} 4\varepsilon(\mathbf{p})^2 \frac{\partial f(\varepsilon(\mathbf{p}))}{\partial \varepsilon(\mathbf{p})} \right\} \\ &\sim 2\varepsilon_F^2 \Pi_{ik}^{(0)}. \end{aligned} \quad (\text{E.22})$$

Podemos fazer uma análise semelhante para a matriz $\mathbf{M}_1(u)$ Eq. (D.26). Considerando simetria partícula-buraco ($\varepsilon_F = 0$), e utilizando as Eqs. (E.20)-(E.22), podemos reescrever $\mathbf{M}_1(u)$ como

$$\mathbf{M}_1(u) = u^2 \frac{U_c}{16zt} \mathbf{H}_0 + \frac{U_c}{16}. \quad (\text{E.23})$$

Assumindo também que estejamos próximos da transição de Mott ($u \rightarrow 1$), podemos escrever a inversa desta matriz na base dos momentos (onde \mathbf{H}_0 é diagonal) como

$$\begin{aligned} [\mathbf{M}_1^{-1}(u)]_{\mathbf{q}} &= \frac{16z}{U_c} [1 + 2(1-u)] \left(z [1 + 2(1-u)] - 2 \sum_{i=1}^d \cos(q_i) \right)^{-1} \\ &\simeq \frac{16z}{U_c} \frac{1}{\xi^{-2} + \mathbf{q}^2}, \end{aligned} \quad (\text{E.24})$$

onde

$$\xi^{-2} = 2z(1-u), \quad (\text{E.25})$$

faz as vezes de um comprimento de correlação e assumimos que estamos no limite do contínuo $k \rightarrow 0$.

A forma assintótica de $\mathbf{M}_1(u)$ no espaço real pode ser obtida analiticamente para $r_{ij}/\xi \gg 1$ (a integral é avaliada na Ref. [11]), e é dada por

$$[\mathbf{M}_1^{-1}(u)]_{ij} \sim \frac{16z}{U_c} C_d \xi^{(3-d)/2} e^{-r_{ij}/\xi}, \quad (\text{E.26})$$

onde

$$C_d = \begin{cases} 1, & d = 1 \\ \pi^{(1-d)/2} / 2^{(1+d)/2}, & d \geq 2 \end{cases}, \quad (\text{E.27})$$

e $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$.

Utilizando a Eq. (4.60), vemos que o termo dominante para δZ_i no regime assintótico é exponencial, pois, próximos da transição de Mott, obtemos

$$\delta Z_i = \frac{1-u}{U_c} [\mathbf{M}_1^{-1}(u)]_{io} \varepsilon_o^2 + \mathcal{O}\left((1-u)^2\right). \quad (\text{E.28})$$

Gostaríamos agora de encontrar o primeiro termo de longo alcance em δZ_i . Como $[\mathbf{M}_1^{-1}(u)]_{ij}$ decai exponencialmente, qualquer termo que decaia como uma lei de potência e que esteja multiplicado por este termo dominante não contribuirá, o que nos deixa apenas com o último termo da Eq. (4.60): $2(1-u) [\mathbf{L}^{-2}(u)]_{ij} [\mathbf{\Pi}^{(0)^2}]_{jo} \varepsilon_o$. Para avaliá-lo, precisamos expandir $\mathbf{L}^{-2}(u)$. Não é suficiente utilizarmos a Eq. (4.68), pois o termo gerado nesta ordem é local. Logo, precisamos ir até ordens superiores em $(1-u)$, onde obtemos

$$\mathbf{L}^{-2}(u) = \frac{1}{U_c^2} [\mathbf{\Pi}^{(0)}]^{-2} \left\{ 1 - (1-u) + \frac{7}{4}(1-u)^2 + \frac{4}{U_c}(1-u)^2 [\mathbf{\Pi}^{(0)}]^{-1} \right\} + \mathcal{O}\left((1-u)^3\right).$$

Como queremos apenas os termos não locais, podemos escrever a contribuição dominante como

$$\mathbf{L}^{-2}(u) \sim \frac{4}{U_c^3} (1-u)^2 [\mathbf{\Pi}^{(0)}]^{-3}, \quad (\text{E.29})$$

de tal forma que os termos que decaem como uma lei de potência são um fator $(1-u)^3$ menores que o termo dominante exponencial, sendo assim fortemente suprimidos na região crítica.

Função de Lindhard em $1d$ e $2d$

Calcularemos aqui a função de Lindhard em $1d$ considerando a dispersão do modelo tight-binding. Antes de iniciarmos o cálculo, lembraremos o resultado para uma dispersão parabólica ($\varepsilon = k^2/2m$) [175]

$$\Pi_1(q) = -\rho(\varepsilon_F) \frac{2k_F}{q} \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right|, \quad (\text{F.1})$$

onde o momento de Fermi é dado por $k_F = n\pi/2$, com n sendo a densidade eletrônica, e a densidade de estados no nível de Fermi é dada $\rho(\varepsilon_F) = 2m/\pi k_F$.

F.1 Função de Lindhard em $1d$ para uma dispersão tight-binding

Para proceder, partimos da definição da função de Lindhard dada pela Eq. (E.8), já tomando o limite $L \rightarrow \infty$

$$\Pi(q) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk \frac{f(\varepsilon(k+q/2)) - f(\varepsilon(k-q/2))}{\varepsilon(k+q/2) - \varepsilon(k-q/2)}, \quad (\text{F.2})$$

onde a integral sobre k restringe-se à primeira zona de Brillouin,

$$\varepsilon(k) = -2t \cos(k), \quad (\text{F.3})$$

e $f(\varepsilon) = [1 + e^{(\varepsilon - \mu)/T}]^{-1}$ é a distribuição de Fermi-Dirac, com μ sendo o potencial químico e T a temperatura. No limite de $T = 0$ e considerando semi-preenchimento ($n = 1$), temos $k_F = \pi/2$ e a Eq. (F.2) fica

$$\begin{aligned} \Pi(q) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk \frac{\theta(\pi/2 - |k+q/2|) - \theta(\pi/2 - |k-q/2|)}{-2t(\cos(k+q/2) - \cos(k-q/2))} \\ &= \frac{1}{8\pi t \sin(q/2)} \int_0^{2\pi} dk \frac{\theta(\pi/2 - |k+q/2|) - \theta(\pi/2 - |k-q/2|)}{\sin(k)}, \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

onde, como de hábito, $\theta(x) = 1$ para $x > 0$ e 0 para $x < 0$. A região de integração é mostrada na Fig. (F.1), sendo determinada pela diferença das funções teta, donde obtemos que

$$\begin{aligned} \Pi(q) &= \frac{1}{8\pi t \sin(q/2)} \left[\int_{(\pi-q)/2}^{(\pi+q)/2} dk \frac{-1}{\sin(k)} + \int_{(3\pi-q)/2}^{(3\pi+q)/2} dk \frac{1}{\sin(k)} \right] \\ &= \frac{1}{8\pi t \sin(q/2)} \left[-\ln \left| \frac{\tan((\pi+q)/4)}{\tan((\pi-q)/4)} \right| + \ln \left| \frac{\tan((3\pi+q)/4)}{\tan((3\pi-q)/4)} \right| \right] \\ &= -\rho(\varepsilon_F) \frac{1}{\sin(q/2)} \ln \left| \frac{\cos(q/2)}{1 - \sin(q/2)} \right|, \end{aligned} \quad (\text{F.5})$$

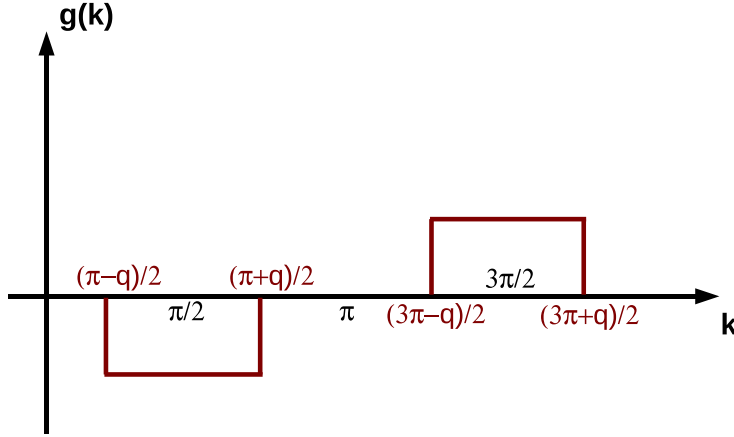


Figura F.1: Região de integração da Eq. (F.4), onde $g(k) = \theta(\pi/2 - |k + q/2|) - \theta(\pi/2 - |k - q/2|)$ considerando que $q \geq 0$.

onde $\rho(\varepsilon_F) = [2\pi t]^{-1}$ é a densidade de estados no nível de Fermi. Esta função possui os limites esperados, pois, para $q \rightarrow 0$, temos $\Pi(q) \approx \rho(\varepsilon_F) (2/q) \ln|1 - q/2| = -\rho(\varepsilon_F)$ e para $q \rightarrow 2k_F$ ($2k_F = \pi$), temos $\Pi(q) \sim \ln|q - 2k_F|$, ou seja, uma divergência logarítmica, exatamente como no caso de uma dispersão parabólica, Fig. (F.2). Esta divergência em $q = 2k_F$ para $\Pi(q)$ é característica de sistemas 1d. Para dimensões superiores, temos descontinuidades apenas nas suas derivadas [135, 143, 175, 176] e são estas não analiticidades em $\Pi(q)$ que dão origem, por exemplo, às oscilações de Friedel.

F.2 Transformadas de Fourier da função de Lindhard em 1d

Passamos agora ao cálculo das transformadas de Fourier da função de Lindhard. Estamos interessados no valor assintótico destas transformadas e, portanto, é suficiente que consideremos uma dispersão de elétrons livres, Eq. (F.1). Para este cálculo, utilizamos o teorema de Lighthill (teorema 19 da Ref. [177]), que, grosso modo, diz que o valor assintótico da transformada de Fourier de uma função é dado pela transformada de Fourier da expansão desta função ao redor de suas não analiticidades. As oscilações de Friedel são em sua essência um exemplo deste teorema, pois surgem devido às singularidades da função de Lindhard (ou de suas derivadas) em $q = 2k_F$. Se não nos preocupamos com estas singularidades, obtemos o cenário de Thomas-Fermi, no qual obtemos um decaimento exponencial da densidade eletrônica ao invés de uma lei de potência [59, 60].

A primeira integral que avaliaremos é

$$g_1(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{iqx} \Pi_1(q). \quad (\text{F.6})$$

Se utilizarmos os contornos C_- e C_+ mostrados na Fig. (F.3), temos

$$g_1(x) = -\frac{k_F \rho(\varepsilon_F)}{\pi} \left\{ \int_{C_-} dq \frac{e^{iqx}}{q} \ln|q + 2k_F| - \int_{C_+} dq \frac{e^{iqx}}{q} \ln|q - 2k_F| \right\}. \quad (\text{F.7})$$

As integrais ao longo destes dois cortes de linha só dependem da diferença da função ao cruzarmos este corte, e esta diferença vem toda da fase do logaritmo. Para calculá-la, escrevemos $\ln z = (\ln r_{\pm} + i\theta)/2$, onde $r_{\pm} = (q \pm 2k_F)^2$ e a fase θ vale π acima do corte ($\text{Im}[z] > 0$) e $-\pi$ abaixo ($\text{Im}[z] < 0$), e, assim, obtemos que diferença na fase vale π .

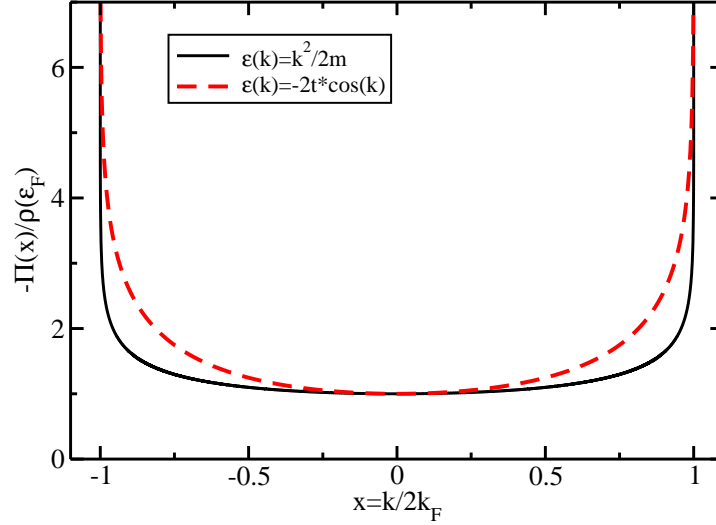


Figura F.2: Função de Lindhard normalizada pela densidade de estados no nível de Fermi $\rho(\varepsilon_F)$ como função do momento q dividido por duas vezes o momento do Fermi k_F , calculada tanto para uma dispersão de elétrons livres (linha contínua), Eq. (F.1), quanto para uma do tipo tight-binding (linha tracejada), Eq. (F.5). Vemos que ambas coincidem para $q \rightarrow 0$, e que divergem logaritmicamente para $q \rightarrow 2k_F$.

Colocando este resultado de volta na Eq. (F.7), obtemos

$$g_1(x) = \frac{k_F \rho(\varepsilon_F)}{\pi} (i\pi) \left\{ - \int_{-2k_F}^{-\infty} dq \frac{e^{iqx}}{q} + \int_{2k_F}^{+\infty} dq \frac{e^{iqx}}{q} \right\},$$

fazendo a troca de variáveis $u = qx$ e trocando $u \rightarrow -u$ na primeira integral, vemos que

$$g_1(x) = 2k_F \rho(\varepsilon_F) \text{si}(2k_F x), \quad (\text{F.8})$$

onde a integral seno $\text{si}(y)$ é definida como [128]

$$\text{si}(y) = - \int_y^{\infty} du \frac{\sin u}{u}, \quad (\text{F.9})$$

e possui a seguinte expansão

$$\text{si}(y) = -\frac{\cos y}{y} - \frac{\sin y}{y^2} + \mathcal{O}[y^{-3}], \quad y \rightarrow \infty, \quad (\text{F.10})$$

que aplicada à Eq. (F.8) nos leva a

$$g_1(x) \approx -\rho(\varepsilon_F) \frac{\cos(2k_F x)}{x}, \quad x \rightarrow \infty, \quad (\text{F.11})$$

que nada mais é do que a expressão para as oscilações de Friedel, que possuem um vetor de onda de $2k_F$ e decaem com r^d , onde r é a distância entre o ponto de observação e o ponto no qual se situa a perturbação, e d é a dimensão.

Embora possamos fazer o cálculo da Eq. (F.23) de maneira exata, Eq. (F.8), estamos interessados, na verdade, apenas no resultado assintótico dado pela Eq. (F.11). Este resultado pode ser obtido utilizando-se os contornos C_1 e C_2 mostrados na Fig. (F.3). Este cálculo segue os mesmos passos daquele discutido acima, com a vantagem de aplicar-se a outros casos, como veremos a seguir. Notamos que as integrais ao longo dos cortes dependem apenas da diferença de fase Δ dos logaritmos, que novamente é dada por π (veja, por exemplo, Ref. [59], seção 14), e ficamos com

$$g_1(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} -ik_F \rho(\varepsilon_F) \left\{ e^{-i2k_F x} \int_{\eta}^{\infty} du \frac{e^{-ux}}{-2k_F} - e^{i2k_F x} \int_{\eta}^{\infty} dv \frac{e^{-vx}}{2k_F} \right\}, \quad (\text{F.12})$$

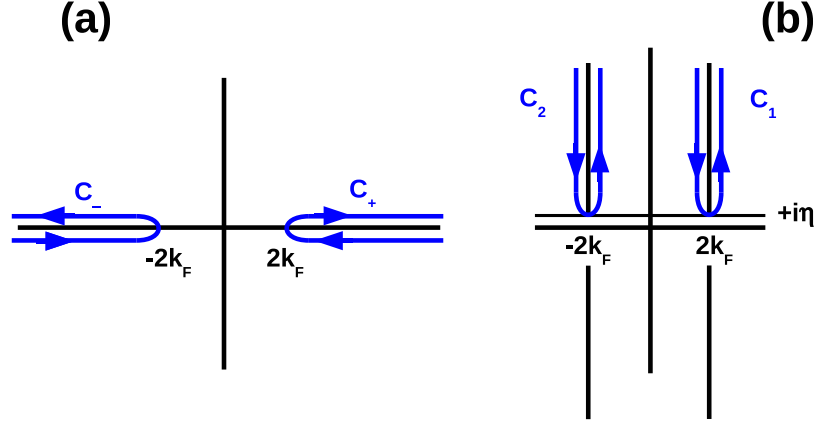


Figura F.3: Contornos utilizados para avaliarmos a transformada de Fourier da função de Lindhard. Os contornos C_+ e C_- em (a) representam os cortes de linha usuais para o cálculo de integrais que envolvam a função logaritmo [70]. Já os contornos C_1 e C_2 em (b) são os mais apropriados para o cálculo do valor assintótico da transformada de Fourier [59].

onde introduzimos $q = 2k_F + iv$ ao longo de C_1 , e $q = -2k_F + iv$ ao longo de C_2 . Devido à exponencial decrescente presente no integrando, avaliamos o núcleo desta integral no início do corte de linha, ou seja, em $q = \pm 2k_F$. Introduzimos também o fator $\eta \rightarrow 0^+$ para que sempre tenhamos $\text{Im}[q] > 0$, de tal forma que nossa função seja perfeitamente analítica no plano superior. Finalmente, obtemos

$$g_1(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} -\rho(\varepsilon_F) \frac{\cos(2k_F x)}{x}, \quad (\text{F.13})$$

que, naturalmente, pelo teorema citado no início desta seção, é idêntica à Eq. (F.11).

Avaliaremos agora a seguinte integral

$$g_2(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{iqx} \frac{1}{\Pi_1(q)}, \quad (\text{F.14})$$

que aparece na Eq. (4.70), e explica como as oscilações de Friedel decaem nas proximidades da transição de Mott. Aqui, utilizaremos novamente os contornos C_1 e C_2 mostrados na Fig. (F.3), com a diferença de que agora temos o logaritmo no denominador, de tal forma que

$$\text{Im} \left[\frac{1}{\ln z} \right] = \text{Im} \left[\frac{2}{\ln r_{\pm} + i\theta} \right] = \frac{-2\theta}{(\ln r_{\pm})^2 + \theta^2} \simeq -\frac{2\theta}{(\ln r_{\pm})^2}, \quad (\text{F.15})$$

onde $r_{\pm} = (q \pm 2k_F)^2$ e a diferença de fase Δ é de $-\pi$, que, a menos de um sinal, é igual à dos casos anteriores. Acima, utilizamos o fato de que $(\ln r_{\pm})^2 \gg \theta^2$ para $q \rightarrow \pm 2k_F$. Utilizando a Eq. (F.15), temos que

$$g_2(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{\pi k_F \rho(\varepsilon_F)} (-i\pi) \left\{ e^{-i2k_F x} i \int_{\eta}^{\infty} du \frac{(-2k_F) e^{-ux}}{(2\ln |iu/4k_F|)^2} - e^{i2k_F x} i \int_{\eta}^{\infty} dv \frac{(2k_F) e^{-vx}}{(2\ln |4k_F/iv|)^2} \right\} \\ \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{2\rho(\varepsilon_F) x} \left\{ e^{-i2k_F x} \int_{\eta x}^{\infty} du' \frac{e^{-u'}}{(\ln u' - \ln(4k_F x))^2} + e^{i2k_F x} \int_{\eta x}^{\infty} dv' \frac{e^{-v'}}{(\ln(4k_F x) - \ln v')^2} \right\}, \quad (\text{F.16})$$

onde mais uma vez fizemos $q = 2k_F + iv$ ao longo de C_1 , e $q = -2k_F + iv$ ao longo de C_2 , considerando também que $u' = ux$ e $v' = vx$. A contribuição dominante desta integral consiste em tomarmos $u' = 0$ e ou $v' = 0$ nos

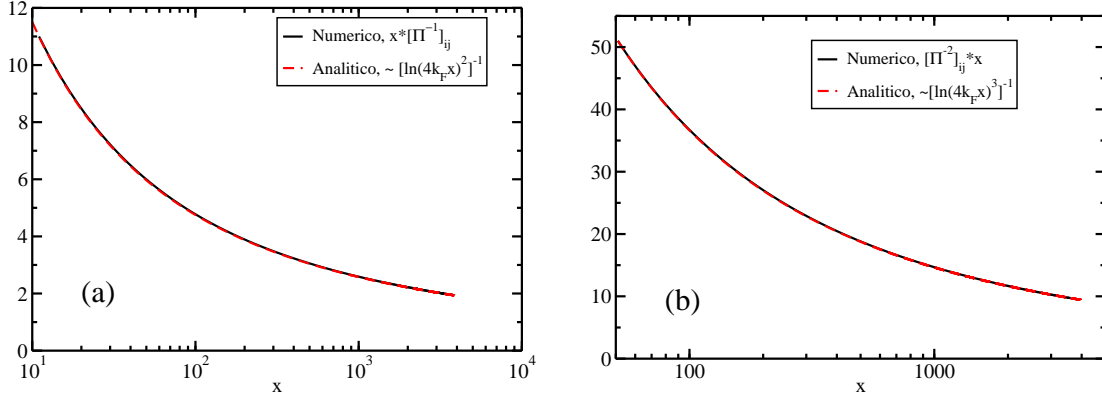


Figura F.4: **(a)** Decaimento assintótico da transformada de Fourier da função de Lindhard inversa calculada através da integração numérica da Eq. (F.5). Os resultados estão normalizados de maneira a ilustrarmos a presença de uma correção logarítmica, como previsto pela Eq. (F.17). **(b)** Decaimento assintótico da transformada de Fourier do quadrado da função de Lindhard inversa, novamente calculada através de uma integração numérica da Eq. (F.5). Aqui também há a presença de uma correção logarítmica, Eq. (F.20).

logaritmos, o que corresponde a avaliar o núcleo da transformada de Fourier em $\pm 2k_F$. Contudo, esta contribuição dominante é nula, e precisamos avaliar o próximo termo. A maior contribuição para estas integrais vem do regime em que $\ln u' (\ln v') \ll \ln(4k_F x)$. Como $x \rightarrow \infty$, podemos simplesmente tomar $\ln u' = \ln v' = 0^1$, donde

$$g_2(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{2\rho(\varepsilon_F) x (\ln(4k_F x))^2} \left\{ e^{-i2k_F x} \int_{\eta x}^{\infty} du' e^{-u'} + e^{i2k_F x} \int_{\eta x}^{\infty} dv' e^{-v'} \right\}$$

$$\underset{x \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\rho(\varepsilon_F) x (\ln(4k_F x))^2} \cos(2k_F x). \quad (\text{F.17})$$

Vemos que, neste caso, ainda temos as oscilações de Friedel com um período espacial dado por π/k_F . Contudo, elas não só apresentam o sinal oposto àquele da Eq. (F.13), como também adquirem uma correção logarítmica a seu decaimento espacial usual do tipo lei de potência x^{-1} . Verificamos esta correção ao compararmos nossa solução analítica com um cálculo numérico da transformada de Fourier, Fig. (F.4).

Por último, avaliaremos a seguinte integral que aparece no cálculo da função de correlação das energias renormalizadas dos sítios

$$g_3(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{iqx} \frac{1}{\Pi_1^2(q)}. \quad (\text{F.18})$$

Aplicando exatamente o procedimento acima, temos que

$$\text{Im} \left[\frac{4}{(\ln z)^2} \right] = \frac{8 (\ln r_{\pm}) \theta}{\left[(\ln r_{\pm})^2 - \theta^2 \right]^2 + 4 (\ln r_{\pm})^2 \theta^2} \simeq -\frac{8\theta}{(\ln r_{\pm})^3}, \quad (\text{F.19})$$

donde vemos que

$$g_2(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\cos(2k_F x)}{x (\ln(4k_F x))^3}. \quad (\text{F.20})$$

F.3 Transformadas de Fourier da função de Lindhard em $2d$

Para duas dimensões e a $T = 0$, a função de Lindhard é dada por [143, 144]

$$\Pi_2(\mathbf{q}) = -2\rho(\varepsilon_F) f\left(\frac{|\mathbf{q}|}{2k_F}\right) = -\frac{m}{\pi} f\left(\frac{|\mathbf{q}|}{2k_F}\right), \quad (\text{F.21})$$

¹ Avaliamos estas integrais numericamente e observamos que, já para $\ln(4k_F x) = 5$, esta aproximação produz apenas cerca de 5% de erro.

onde

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x \leq 1 \\ 1 - \sqrt{1 - x^{-2}}, & x > 1 \end{cases}, \quad (\text{F.22})$$

e naturalmente assumimos uma dispersão do tipo elétrons livres.

As integrais que avaliaremos serão do seguinte tipo

$$h(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \chi(q), \quad (\text{F.23})$$

onde $\chi(q) = \Pi_2(\mathbf{q})$ ou $\Pi_2^{-1}(\mathbf{q})$. Da definição acima, temos que

$$h(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dq q \chi(q) J_0(qr), \quad (\text{F.24})$$

onde $J_0(y)$ é a função de Bessel do primeiro tipo de ordem zero, definida em termos da seguinte representação [70]

$$J_0(qr) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{iqr \cos \theta}, \quad (\text{F.25})$$

onde θ é o ângulo entre \mathbf{q} e \mathbf{r} . Para estudarmos o comportamento assintótico da transformada de Fourier, definida pela Eq. (F.23), devemos considerar naturalmente a expressão assintótica para esta função de Bessel [70]

$$J_0(y) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi y}} \cos\left(y + \frac{\pi}{4}\right), \quad y \gg 1. \quad (\text{F.26})$$

Substituindo a Eq. (F.26) na Eq. (F.24), vem que

$$h(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi^{3/2}}} \frac{1}{\sqrt{r}} \int_0^\infty dq \sqrt{q} \chi(q) \left(e^{i(qr+\pi/4)} + e^{-i(qr+\pi/4)} \right), \quad r \gg 1. \quad (\text{F.27})$$

Utilizaremos novamente aqui o teorema de Lighthill para o cálculo deste valor assintótico. Para isso, devemos expandir a função $f(x)$, Eq. (F.22), ao redor da singularidade (em sua derivada) presente em $q = 2k_F$, o que nos dá

$$f(q) = 1 - \frac{1}{\sqrt{k_F}} \sqrt{|q - 2k_F|} \theta(q - 2k_F) + \mathcal{O}(q - 2k_F). \quad (\text{F.28})$$

O termo constante em $f(q)$ não contribui para o valor assintótico, uma vez que é não singular [177]. O mesmo argumento vale para o termo \sqrt{q} presente no núcleo da integral (F.27). Já para o segundo termo, utilizaremos o seguinte resultado [177]

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iuv} \sqrt{|u|} \theta(u) du = \frac{1}{2^{5/2}\pi} \frac{1}{v^{3/2}} e^{-3\pi i/4}. \quad (\text{F.29})$$

Com todos estes elementos, prosseguimos para o cálculo de fato.

- $\chi(q) = \Pi_2(\mathbf{q})$

Da Eq. (F.27), vemos que

$$h(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{2} \frac{m}{\sqrt{2\pi^{5/2}}} \frac{1}{\sqrt{r}} \int_0^\infty dq \sqrt{2k_F} \frac{\theta(q - 2k_F)}{\sqrt{k_F}} \sqrt{|q - 2k_F|} \left(e^{i(qr+\pi/4)} + e^{-i(qr+\pi/4)} \right), \quad (\text{F.30})$$

onde já avaliamos \sqrt{q} em $2k_F$. Devido à função degrau, podemos escrever que

$$\begin{aligned} h(\mathbf{r}) &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{2} \frac{m}{\pi^{5/2}} \frac{1}{\sqrt{r}} \int_{2k_F}^\infty dq \theta(q - 2k_F) \sqrt{|q - 2k_F|} \left(e^{i(qr+\pi/4)} + e^{-i(qr+\pi/4)} \right) \\ &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{2} \frac{m}{\pi^{5/2}} \frac{1}{\sqrt{r}} \int_0^\infty du \theta(u) \sqrt{|u|} \left(e^{i(ur+2k_F r+\pi/4)} + e^{-i(ur+2k_F r+\pi/4)} \right) \\ &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{2} \frac{m}{\pi^{5/2}} \frac{1}{\sqrt{r}} \int_{-\infty}^{+\infty} du \theta(u) \sqrt{|u|} \left(e^{i(ur+2k_F r+\pi/4)} + e^{-i(ur+2k_F r+\pi/4)} \right). \end{aligned} \quad (\text{F.31})$$

Acima, fizemos a troca de variáveis $u = q - 2k_F$. Utilizando agora a Eq. (F.29), obtemos

$$\begin{aligned} h(\mathbf{r}) &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{m}{(2\pi)^{5/2}} \frac{1}{r^2} \left(e^{i(2k_F r - \pi/2)} + e^{-i(2k_F r - \pi/2)} \right) \\ &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{\cos(2k_F r - \pi/2)}{r^2}, \end{aligned} \quad (\text{F.32})$$

que possui a forma usual das oscilações de Friedel em duas dimensões.

- $\chi(q) = \Pi_2^{-1}(\mathbf{q})$

Neste caso, aparece no núcleo da transformada $1/f(q)$ ao invés de $f(q)$. Da Eq. (F.22), é imediato escrever que

$$\frac{1}{f(q)} = 1 + \frac{1}{\sqrt{k_F}} \sqrt{|q - 2k_F|} \theta(q - 2k_F) + \mathcal{O}(q - 2k_F). \quad (\text{F.33})$$

Comparando as Eqs. (F.33) e (F.28), vemos que a única diferença entre as duas expressões é o sinal do termo singular. Portanto, é direto escrever que

$$\begin{aligned} h(\mathbf{r}) &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2m\pi^{1/2}}} \frac{1}{\sqrt{r}} \int_0^\infty dq \sqrt{2k_F} \frac{\theta(q - 2k_F)}{\sqrt{k_F}} \sqrt{|q - 2k_F|} \left(e^{i(qr + \pi/4)} + e^{-i(qr + \pi/4)} \right) \\ &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\cos(2k_F r - \pi/2)}{r^2}. \end{aligned} \quad (\text{F.34})$$

Diferentemente do caso unidimensional, no qual as transformadas de $\Pi_1(q)$ (Eq. (F.11)) e $\Pi_1(q)$ (Eq. (F.17)) possuem um decaimento espacial diferente, para duas dimensões elas coincidem, Eqs. (F.32) e (F.34).

Referências Bibliográficas

- [1] E. Dagotto, *Science* **309**, 257 (2005).
- [2] E. Miranda and V. Dobrosavljevic, *Rep. Prog. Phys.* **68**, 2337 (2005).
- [3] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Thomson Learning, 1976), 1st ed.
- [4] B. L. Altshuler and A. G. Aronov, in *Electron-Electron Interaction in Disordered Systems*, edited by A. L. Efros and M. Pollak (North-Holland, 1985).
- [5] M. F. Crommie *et al.*, *Nature* **363**, 524 (1993).
- [6] J. Friedel, *Nuovo Cimento Suppl.* **7**, 287 (1958).
- [7] A. Richardella *et al.*, *Science* **327**, 665 (2010).
- [8] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, 1999), 1st ed.
- [9] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
- [10] C. Castellani, G. Kotliar, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 323 (1987).
- [11] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group* (Westview Press, 1992), 1st ed.
- [12] M. A. Paalanen, J. E. Graebner, R. N. Bhatt, and S. Sachdev, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 597 (1988).
- [13] M. Milovanović, S. Sachdev, and R. N. Bhatt, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 82 (1989).
- [14] R. B. Griffiths, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 17 (1969).
- [15] H. v. Löhneysen, A. Rosch, M. Vojta, and P. Wölfle, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1015 (2007).
- [16] T. Vojta, *J. Phys. A* **39**, R143 (2006).
- [17] E. Miranda and V. Dobrosavljević, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 264 (2001).
- [18] D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **51**, 6411 (1995).
- [19] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [20] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [21] G. Kotliar and D. Vollhardt, *Phys. Today* **57(3)**, 53 (2004).
- [22] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 865 (2006).
- [23] W. Metzner and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).
- [24] R. J. Elliot *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 465 (1974).

- [25] V. Dobrosavljević and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **78**, 3943 (1997).
- [26] V. Dobrosavljević, A. A. Pastor, and B. K. Nikolić, Europhys. Lett. **62**, 76 (2003).
- [27] K. Byczuk, W. Hofstetter, and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **94**, 056404 (2005).
- [28] M. C. O. Aguiar, V. Dobrosavljević, E. Abrahams, and G. Kotliar, Phys. Rev. B **71**, 205115 (2005).
- [29] M. C. O. Aguiar, V. Dobrosavljevic, E. Abrahams, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **102**, 156402 (2009).
- [30] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transition* (Taylor and Francis, 1990), 2nd ed.
- [31] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963).
- [32] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. (London) A **276**, 238 (1963).
- [33] J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. **30**, 273 (1963).
- [34] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [35] W. F. Brinkman and T. M. Rice, Phys. Rev. B **2**, 4302 (1970).
- [36] E. C. Andrade, E. Miranda, and V. Dobrosavljević, Phys. Rev. Lett. **102**, 206403 (2009).
- [37] D. Tanasković, E. Miranda, and V. Dobrosavljević, Phys. Rev. B **70**, 205108 (2004).
- [38] E. C. Andrade, E. Miranda, and V. Dobrosavljević, Physica B **404**, 3167 (2009).
- [39] K. McElroy *et al.*, Science **309**, 1048 (2005).
- [40] Y. Kohsaka *et al.*, Science **315**, 1380 (2007).
- [41] G. Zala, B. N. Narozhny, and I. L. Aleiner, Phys. Rev. B **64**, 214204 (2001).
- [42] A. Weismann, M. Wenderoth, S. Lounis, P. Zahn, N. Quaas, R. G. Ulbrich, P. H. Dederichs, and S. Blugel, Science **323**, 1190 (2009).
- [43] E. C. Andrade, E. Miranda, and V. Dobrosavljević, Phys. Rev. Lett. **104**, 236401 (2010).
- [44] D. Tanasković, V. Dobrosavljević, E. Abrahams, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **91**, 066603 (2003).
- [45] A. Garg, M. Randeria, and N. Trivedi, Nat. Phys. **4**, 762 (2008).
- [46] A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **66**, 073303 (2002).
- [47] S. V. Kravchenko and M. P. Sarachik, Rep. Prog. Phys. **67**, 1 (2004).
- [48] S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, and M. D'Iorio, Phys. Rev. B **50**, 8039 (1994).
- [49] E. Abrahams, S. V. Kravchenko, and M. P. Sarachik, Rev. Mod. Phys. **73**, 251 (2001).
- [50] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [51] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 233 (1957).
- [52] R. Landauer, Philos. Mag. **21**, 863 (1970).
- [53] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).
- [54] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, 1995), 1st ed.
- [55] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics* (Cambridge University Press, 1997), 1st ed.
- [56] G. Fleury and X. Waintal, Phys. Rev. Lett. **100**, 076602 (2008).
- [57] G. Fleury and X. Waintal, Phys. Rev. Lett. **101**, 226803 (2008).

- [58] M. Rahimi, S. Anissimova, M. R. Sakr, S. V. Kravchenko, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 116402 (2003).
- [59] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover, 2003), 1st ed.
- [60] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum, New York, 2000), 3rd ed.
- [61] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [62] R. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 395 (2008).
- [63] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **31**, 4403 (1985).
- [64] P. Werner, A. Comanac, L. de' Medici, M. Troyer, and A. J. Millis, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 076405 (2006).
- [65] G. Kotliar and A. E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1362 (1986).
- [66] P. Nozières, *J. Low Temp. Phys.* **17**, 31 (1974).
- [67] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993), 1st ed.
- [68] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. (London) A* **277**, 237 (1964).
- [69] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. (London) A* **281**, 401 (1964).
- [70] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists* (Academic Press, 1995), 4th ed.
- [71] P. Coleman, *Phys. Rev. B* **29**, 3035 (1984).
- [72] P. Coleman, *Phys. Rev. B* **35**, 5072 (1987).
- [73] N. Read and D. M. Newns, *J. Phys. C* **16**, 3273 (1983).
- [74] N. Read and D. M. Newns, *J. Phys. C* **16**, L1055 (1983).
- [75] T. H. Berlin and M. Kac, *Phys. Rev.* **86**, 821 (1952).
- [76] E. Witten, *Nucl. Phys. B* **145**, 110 (1978).
- [77] E. H. Lieb and F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968).
- [78] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (J. Wiley, New York, 1998), 3rd ed.
- [79] M. C. O. Aguiar, V. Dobrosavljević, E. Abrahams, and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **73**, 115117 (2006).
- [80] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1027 (2005).
- [81] Y. Z. Zhang and M. Imada, *Phys. Rev. B* **76**, 045108 (2007).
- [82] F. Lechermann, A. Georges, G. Kotliar, and O. Parcollet, *Phys. Rev. B* **76**, 155102 (2007).
- [83] H. Park, K. Haule, and G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 186403 (2008).
- [84] A. Georges and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **45**, 6479 (1992).
- [85] D. Pines and P. Nozières, *The Theory of Quantum Liquids* (W. A. Benjamin, 1966), 1st ed.
- [86] J. A. Hoyos, C. Kotabage, and T. Vojta, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 230601 (2007).
- [87] A. Del Maestro, B. Rosenow, M. Mueller, and S. Sachdev, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 035701 (2008).
- [88] E. Miranda, V. Dobrosavljevic, and G. Kotliar, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 9871 (1996).
- [89] E. Miranda, V. Dobrosavljevic, and G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 290 (1997).
- [90] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 797 (2001).

- [91] L. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics Part 1* (Butterworth Heinemann, 1980), 3rd ed.
- [92] E. Miranda, *Transições de fase e o grupo de renormalização* (2005), URL <http://www.ifi.unicamp.br/~emiranda/notes/rg.pdf>.
- [93] A. B. Harris, J. Phys. C: Solid State Phys. **7**, 1671 (1974).
- [94] I. M. Lifshitz, Adv. Phys. **13**, 483 (1964).
- [95] J. A. Hertz, Phys. Rev. B **14**, 1165 (1976).
- [96] D. B. MAcWhan, A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman, and T. M. Rice, Phys. Rev. B. **7**, 1920 (1973).
- [97] P. Limellete, A. Georges, D. Jérôme, P. Wzietek, P. Metcalf, and J. M. Honig, Science **302**, 89 (2003).
- [98] P. Limelette, P. Wzietek, S. Florens, A. Georges, T. A. Costi, C. Pasquier, D. Jérôme, C. Mézière, and P. Batail, Phys. Rev. Lett. **91**, 016401 (2003).
- [99] M. J. Rozenberg, X. Y. Zhang, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **69**, 1236 (1992).
- [100] X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **70**, 1666 (1993).
- [101] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. **137**, A1726 (1965).
- [102] J. Merino, M. Dumm, N. Drichko, M. Dressel, and R. H. McKenzie, Phys. Rev. Lett. **100**, 086404 (2008).
- [103] D. Vollhardt, Rev. Mod. Phys. **56**, 99 (1984).
- [104] A. Casey, H. Patel, J. Nyéki, B. P. Cowan, and J. Saunders, Phys. Rev. Lett. **90**, 115301 (2003).
- [105] V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, H. Kojima, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, Phys. Rev. Lett. **91**, 126403 (2003).
- [106] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).
- [107] A. Punnoose and A. M. Finkel'stein, Science **310**, 289 (2005).
- [108] H. G. Schlager and H. V. Lohneysen, Europhys. Lett. **40**, 661 (1997).
- [109] D. Heidarian and N. Trivedi, Phys. Rev. Lett. **93**, 126401 (2004).
- [110] P. B. Chakraborty, P. J. H. Denteneer, and R. T. Scalettar, Phys. Rev. B **75**, 125117 (2007).
- [111] Y. Song, R. Wortis, and W. A. Atkinson, Phys. Rev. B **77**, 054202 (2008).
- [112] M. E. Pezzoli, F. Becca, M. Fabrizio, and G. Santoro, Phys. Rev. B **79**, 033111 (2009).
- [113] M. E. Pezzoli and F. Becca, Phys. Rev. B **81**, 075106 (2010).
- [114] G. Bergmann, Phys. Rep. **107**, 1 (1984).
- [115] A. Punnoose and A. M. Finkel'stein, Phys. Rev. Lett. **88**, 016802 (2001).
- [116] V. Dobrosavljević and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **71**, 3218 (1993).
- [117] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer Verlag, 1979), 1st ed.
- [118] A. Clauset, C. R. Shalizi, and M. E. J. Newman, SIAM Review **51**, 661 (2009).
- [119] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).
- [120] L. D. Landau, Sov. Phys. JETP **3**, 920 (1956).
- [121] L. D. Landau, Sov. Phys. JETP **5**, 101 (1957).
- [122] L. D. Landau, Sov. Phys. JETP **7**, 182 (1958).

- [123] L. D. Landau, *Sov. Phys. JETP* **8**, 70 (1959).
- [124] P. W. Anderson, *Basic Notions of Condensed Matter Physics* (Benjamin-Cummings, 1984), 1st ed.
- [125] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 331 (1975).
- [126] J. W. Negele and H. Orland, *Quantum Many Particle Systems* (Addison-Wesley, 1988), 1st ed.
- [127] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover, 1975), 1st ed.
- [128] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, 1964).
- [129] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **119**, 1153 (1960).
- [130] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **121**, 942 (1961).
- [131] P. Coleman, *Many body physics monograph* (2009), URL <http://www.physics.rutgers.edu/users/coleman/mbody/pdf/bk.pdf>.
- [132] E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii, *Statistical Physics Part 2* (Butterworth Heinemann, 1980), 1st ed.
- [133] J. Merino and R. H. McKenzie, *Phys. Rev. B* **61**, 7996 (2000).
- [134] B. J. Powell and R. H. McKenzie, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, R827 (2006).
- [135] G. E. Simion and G. F. Giuliani, *Phys. Rev. B* **72**, 045127 (2005).
- [136] M. Gabay, E. Semel, P. J. Hirschfeld, and W. Chen, *Phys. Rev. B* **77**, 165110 (2008).
- [137] H. Alloul, J. Bobroff, M. Gabay, and P. J. Hirschfeld, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 45 (2009).
- [138] R. W. Helmes, T. A. Costi, and A. Rosch, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 066802 (2008).
- [139] G. Borghi, M. Fabrizio, and E. Tosatti, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 066806 (2009).
- [140] S. Pankov and V. Dobrosavljević, *Phys. Rev. B* **77**, 085104 (2008).
- [141] A. C. Jacko, J. O. Fjaerestad, and B. J. Powell, *Nat. Phys.* **5**, 422 (2009).
- [142] S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **33**, 5401 (1986).
- [143] F. Stern, *Phys. Rev. Lett.* **18**, 546 (1967).
- [144] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- [145] E. Abrahams, P. W. Anderson, P. A. Lee, and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. B* **24**, 6783 (1981).
- [146] Y. Meir and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2512 (1992).
- [147] H. Haug and A. P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Springer-Verlag, 1996), 1st ed.
- [148] D. S. Fisher and P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **23**, 6851 (1981).
- [149] B. Nikolić, Ph.D. thesis, State University of New York at Stony Brook (2000).
- [150] D. Jacob, K. Haule, and G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 016803 (2009).
- [151] A. M. García-García and E. Cuevas, *Phys. Rev. B* **75**, 174203 (2007).
- [152] A. M. García-García, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 076404 (2008).
- [153] A. MacKinnon and B. Kramer, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1546 (1981).
- [154] K. Slevin and T. Ohtsuki, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 382 (1999).

- [155] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **22**, 3519 (1980).
- [156] E. Limpert, W. Stahel, and M. Abbt, *BioScience* **51**, 341 (2001).
- [157] J. A. Sobota, D. Tanasković, and V. Dobrosavljević, *Phys. Rev. B* **76**, 245106 (2007).
- [158] I. F. Herbut, *Phys. Rev. B* **63**, 113102 (2001).
- [159] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3735 (1998).
- [160] A. M. García-García and E. Cuevas, *Phys. Rev. B* **79**, 073104 (2009).
- [161] L. Pastur and A. Figotin, *Spectra of Random and Almost-Periodic Operators* (Springer-Verlag, 1992), 1st ed.
- [162] S. Zhou, J. A. Hoyos, V. Dobrosavljević, and E. Miranda, *Europhys. Lett.* **87**, 27003 (2009).
- [163] M. Y. S. Villagran, Tese de Mestrado, Instituto de Física Gleb Wataghin, Unicamp (2009).
- [164] D. Miranda, Tese de Mestrado, Instituto de Física Gleb Wataghin, Unicamp (2009).
- [165] R. A. M. Kuesel, *Introdução ao Fortran90* (2008), URL http://www.cenapad.unicamp.br/servicos/treinamentos/apostilas/fortran_apostila.pdf.
- [166] Intel® , *Fortran Compiler Professional Edition for Linux* (2009), URL http://software.intel.com/sites/products/collateral/hpc/compilers/flin_indepth.pdf.
- [167] R. A. M. Kuesel, *Programação OpenMP* (2008), URL http://www.cenapad.unicamp.br/servicos/treinamentos/apostilas/apostila_openmp.pdf.
- [168] NMS, *Module DNSQE* (1986), URL <http://gams.nist.gov/serve.cgi/Module/NMS/DNSQE/5667>.
- [169] William H. Press *et al.*, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, 2007), 3rd ed.
- [170] E. Anderson *et al.*, *LAPACK, version 3.2.1* (2009), URL <http://www.netlib.org/lapack/>.
- [171] Intel® , *Math Kernel Library* (2009), URL http://software.intel.com/sites/products/collateral/hpc/mkl/mkl_indepth.pdf.
- [172] R. Žitko, *Phys. Rev. B* **80**, 125125 (2009).
- [173] N. Nagaosa, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics* (Springer Verlag, Berlin, 1999), 1st ed.
- [174] N. Nagaosa, *Quantum Field Theory in Strongly Correlated Systems* (Springer Verlag, Berlin, 1999), 1st ed.
- [175] H. Smith, *Physica Scripta* **28**, 287 (1983).
- [176] J. Lindhard, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-Fys. Medd.* **28** (1954).
- [177] M. J. Lighthill, *Introduction to Fourier Analysis and Generalised Functions* (Cambridge University Press, 1964), 1st ed.