



MARTHA YOLIMA SUAREZ VILLAGRAN

**Estudos do modelo de Hubbard desordenado
em
duas dimensões**

Campinas, 18 de outubro de 2013



Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física Gleb Wataghin

Martha Yolima Suarez Villagran

Estudos do modelo de Hubbard desordenado em duas dimensões

Tese apresentada ao “Instituto de Física Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutora em ciências

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Miranda

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À
VERSÃO FINAL TESE DEFENDIDA
PELA ALUNA MARTHA YOLIMA SUAREZ VILLAGRAN, E ORIENTADA PELO
PROF. DR. EDUARDO MIRANDA.



Campinas, 18 de outubro de 2013

Ficha catalográfica
 Universidade Estadual de Campinas
 Biblioteca do Instituto de Física Gleb Wataghin
 Lucimeire de Oliveira Silva da Rocha - CRB 8/9174

Su12e Suarez Villagran, Martha Yolima, 1984-
 Estudos do modelo de Hubbard desordenado em duas dimensões / Martha
 Yolima Suarez Villagran. – Campinas, SP : [s.n.], 2013.

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

1. Hubbard, Modelo de. 2. Transição de Mott. 3. Sistemas desordenados. 4.
 Teoria dinâmica de campo médio (DMFT). 5. Teoria dinâmica de campo médio
 estatística (StatDMFT). 6. Paredes de domínio. 7. Teoria de perturbação iterada
 (IPT). I. Miranda, Eduardo, 1963-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto
 de Física Gleb Wataghin. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Studies of the two-dimensional disordered Hubbard model

Palavras-chave em inglês:

Hubbard model
 Mott transition
 Disordered systems
 Dynamical mean-field theory (DMFT)
 Statistical dynamical mean-field theory (StatDMFT)
 Domain wall
 Iterated perturbation theory (IPT)

Área de concentração: Física

Titulação: Doutora em Ciências

Banca examinadora:

Eduardo Miranda [Orientador]
 Thereza Cristina de Lacerda Paiva
 Raimundo Rocha dos Santos
 Amir Ordacgi Caldeira
 Alex Antonelli

Data de defesa: 18-10-2013

Programa de Pós-Graduação: Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **MARTHA YOLIMA SUAREZ VILLAGRAN** – RA: 069829 APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 18 / 10 / 2013.

COMISSÃO JULGADORA:

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

Profa. Dra. Thereza Cristina de Lacerda Paiva
IF/UFRJ

Prof. Dr. Raimundo Rocha dos Santos
IF/UFRJ

Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira
DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Alex Antonelli
DFMC/IFGW/UNICAMP

Resumo

Estudamos nesta tese alguns aspectos da transição metal-isolante de Mott no caso desordenado. O modelo no qual baseamos nosso estudo é o modelo de Hubbard desordenado, que é o modelo mais simples a apresentar a transição metal-isolante de Mott. Analisamos esse modelo através da Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística (StatDMFT). Essa teoria é uma extensão natural da Teoria Dinâmica de Campo Médio (DMFT), que foi usada com relativo sucesso nos últimos anos para analisar a transição de Mott no caso limpo. Como no caso dessa última, a StatDMFT incorpora os efeitos de correlação eletrônica apenas nos seus aspectos locais. A desordem é tratada de maneira a incorporar todos os efeitos de localização de Anderson. Com essa técnica, analisamos a transição de Mott desordenada no caso bi-dimensional, usando o Monte Carlo quântico para resolver os problemas de impureza única de Anderson requeridos pela StatDMFT. Encontramos as linhas espinodais nas quais o metal e o isolante deixam de ser meta-estáveis. Também estudamos os padrões espaciais das flutuações de quantidades locais, como a auto-energia e a função de Green local, e mostramos como há o aparecimento de regiões metálicas dentro do isolante e vice-versa. Analisamos efeitos de tamanho finito e mostramos que, em consonância com os teoremas de Imry e Ma, a transição de primeira ordem desaparece no limite termodinâmico. Analisamos as propriedades de transporte desse sistema através de um mapeamento a um sistema de resistores aleatórios clássicos e calculamos a corrente média e sua distribuição através da transição metal-isolante. Finalmente, estudamos o comportamento da parede de domínio que se forma entre o isolante e o metal no caso limpo. Isso foi feito através de um modelo de uma cadeia unidimensional conectada a reservatórios, um metálico e um isolante, cada um em uma de suas extremidades.

Nesse caso, utilizamos o método da Teoria de Perturbação Iterada para a solução dos modelos de impureza única. Encontramos o comportamento da parede como função da temperatura e das interações.

Abstract

In this thesis, we studied some aspects of the Mott metal-insulator transition in the disordered case. The model on which we based our analysis is the disordered Hubbard model, which is the simplest model capable of capturing the Mott metal-insulator transition. We investigated this model through the Statistical Dynamical Mean-Field Theory (statDMFT). This theory is a natural extension of the Dynamical Mean-Field Theory (DMFT), which has been used with relative success in the last several years with the purpose of describing the Mott transition in the clean case. As is the case for the latter theory, the statDMFT incorporates the electronic correlation effects only in their local manifestations. Disorder, on the other hand, is treated in such a way as to incorporate Anderson localization effects.. With this technique, we analyzed the disordered two-dimensional Mott transition, using Quantum Monte Carlo to solve the associated single-impurity problems. We found the spinodal lines at which metal and insulator cease to be meta-stable. We also studied the spatial fluctuations of local quantities, such as the self-energy and the local Green's function, and showed the appearance of metallic regions within the insulator and vice-versa. We carried out an analysis of finite-size effects and showed that, in agreement with the theorems of Imry and Ma, the first-order transition is smeared in the thermodynamic limit. We analyzed transport properties by means of a mapping to a random classical resistor network and calculated both the average current and its distribution across the metal-insulator transition. Finally, we studied the behavior of the domain wall which forms between the metal and the insulator in the clean case. This was done by means of a model of a one-dimensional chain connected to two reservoirs, one metallic and the other insulating, each attached to one of the chain's ends. In this case, we used

x

the Iterated Perturbation Theory technique in order to solve the associated single-impurity problems. We then established the behavior of the domain wall width as a function of temperature and interactions.

Sumário

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Introdução | 1 |
| 2 | Importância do estudo da transição de Mott | 7 |
| 2.1 | Introdução | 7 |
| 2.2 | Transição de Mott do ponto de vista experimental. | 8 |
| 2.3 | Transição de Mott do ponto de vista teórico. | 11 |
| 3 | Tratamentos teóricos da transição de Mott. | 15 |
| 3.1 | Introdução | 15 |
| 3.2 | Modelo de Hubbard | 15 |
| 3.3 | Teoria Dinâmica de Campo Médio (DMFT): Caso limpo | 17 |
| 3.3.1 | Analogia com o modelo de impureza única de Anderson | 23 |
| 3.3.2 | Ciclo de auto-consistência: caso limpo | 24 |
| 3.4 | Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio | 24 |
| 3.4.1 | Ciclo de auto-consistência: caso desordenado | 26 |
| 4 | Resultados usando DMFT e StatDMFT. | 27 |
| 4.1 | Introdução | 27 |
| 4.2 | Metal e isolante na ausência de desordem: Resultados | 27 |
| 4.3 | Transição de Mott no caso desordenado: Resultados | 31 |
| 4.4 | Conclusões | 37 |
| 5 | Comportamento crítico da transição de Mott | 39 |
| 5.1 | Introdução | 39 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 5.2 | Classe de universalidade da transição Metal-Isolante | 40 |
| 5.3 | Modelo de Ising: comportamento crítico em 2D | 41 |
| 5.3.1 | Modelo de Ising com campo externo aleatório e teorema de Imry e Ma | 42 |
| 5.4 | Teorema do Imry e Ma generalizado para o modelo de Hubbard | 44 |
| 5.5 | Correlações | 45 |
| 5.6 | Efeitos de tamanho finito | 46 |
| 5.7 | Conclusões | 48 |
| 6 | Transporte | 51 |
| 6.1 | Introdução | 51 |
| 6.2 | Transporte incoerente | 51 |
| 6.3 | Rede de resistores | 53 |
| 6.4 | Cálculo da corrente na rede: resultados | 55 |
| 6.5 | Conclusões | 57 |
| 7 | Paredes de domínios | 59 |
| 7.1 | Introdução | 59 |
| 7.2 | Paredes de domínio | 60 |
| 7.3 | Parede de domínios: resultados | 64 |
| 7.4 | Conclusões | 69 |
| 8 | Conclusões | 71 |
| A | Função de Green da impureza | 75 |
| A.1 | Monte-Carlo Quântico: Algoritmo de Hirsch e Fye | 75 |
| A.2 | Teoria de Perturbação iterativa (IPT) | 82 |
| B | Função $\Gamma(i\omega_n)$ | 85 |

Capítulo 1

Introdução

TRANSIÇÕES DE FASE são fenômenos fascinantes que pode ser observados em uma grande variedade de sistemas químicos, físicos e biológicos. Elas apresentam grande variedade. Podemos citar (i) as transições entre as fases sólida, líquida e gasosa, (ii) transições entre paramagnetismo e várias fases ordenadas magneticamente (ferromagnéticas, antiferromagnéticas, ferrimagnéticas), (iii) a transição supercondutora, (iv) a transição superfluida e outras. Uma das características de uma transição de fase é a mudança singular em várias propriedades físicas do sistema. Frequentemente, embora nem sempre, a transição de fase é acompanhada pela aparição de algum tipo de ordenamento ou quebra espontânea de simetria. Exemplos de ordens emergentes são a ordem cristalina dos sólidos, a quebra de simetria de rotação e reversão temporal em sistemas magnéticos e a ordem não diagonal de longo alcance (“off-diagonal long range order”) presente em supercondutores e superfluidos.

Transições de fase podem ocorrer a temperatura finita ao variar-se alguma variável de estado ou mesmo a temperatura zero, com a variação de um parâmetro externo como pressão, pressão química, campo magnético ou elétrico. Uma transição de fase a $T = 0$ é chamada de uma transição de fase quântica. Ela é caracterizada por uma mudança singular no estado fundamental do sistema. É importante frisar que, embora a temperatura nula seja impossível de ser atingida, os efeitos da existência dessa transição de fase quântica a $T = 0$ se fazem sentir a temperaturas finitas. Decorre daí a importância de se estudar essas transições.

Uma transição de fase quântica de grande importância é a transição metal-isolante. A distinção entre o comportamento metálico e o isolante só é bem definida a temperatura nula: enquanto a resistividade de um isolante diverge quando $T \rightarrow 0$, esta propriedade de transporte tende a uma constante no caso de um metal. Em temperaturas finitas, a resistividade é finita em ambos os casos. Como consequência disso, poder-se-ia imaginar que a transição metal-isolante é uma transição essencialmente quântica. Entretanto, vários sistemas exibem um salto abrupto na condutividade de várias ordens de grandeza a uma temperatura finita. Portanto, é natural estender o conceito de transição metal-isolante também para o caso de temperaturas finitas.

A transição metal-isolante tem sido observada em vários sistemas físicos como (i) sistemas semicondutores dopados (como Si:P,B [6, 7]), (ii) sistemas bi-dimensionais de elétrons em MOSFETs (“metal-oxide-semiconductor field-effect transistors” [8]) ou heteroestruturas semicondutoras (GaAs/AlGaAs) [9, 10], (iii) sistemas contendo metais de transição (V_2O_3 [2], VO_2 [3], NiSSe [11], Nb [12]), (iv) condutores orgânicos (por exemplo, κ -(BEDT TTF) $_2$ Cu[N(CN) $_2$]Cl [13]) . Muitos desses sistemas não são puros, apresentando desordem intrínseca ou extrínseca.

Existem alguns mecanismos conhecidos capazes de transformar um metal num isolante. Na ausência de interação entre os elétrons, um nível suficientemente grande de desordem leva à localização das funções de onda de uma partícula, a chamada localização de Anderson [14]. Muito se sabe sobre esse mecanismo. Em particular, uma bem sucedida teoria de escala [15] mostrou que todos os estados de uma partícula são localizados na presença de qualquer nível de desordem em dimensões $d \leq 2$ (estamos considerando apenas o caso de potenciais espalhadores comuns, ignorando os casos de potenciais com interação spin-órbita ou inversão de spin). Em $d > 2$, é necessário adicionar uma desordem mínima para que o metal se torne um isolante. Essa transição é conhecida como transição metal-isolante de (localização de) Anderson.

Alternativamente, Mott propôs que, mesmo na ausência de desordem, a interação elétron-elétron pode, em algumas circunstâncias, induzir uma transição metal-isolante [16]. Embora o mecanismo original de Mott fosse essencialmente baseado no caráter de longo alcance da interação coulombiana, um modelo com interações de curto alcance proposto por Hubbard [17, 18, 19] também pode apresentar uma tran-

sição metal-isolante para interações eletrônicas suficientemente fortes quando há um elétron por sítio da rede cristalina. Devido a essas propostas iniciais, essa transição induzida pelas interações é conhecida como transição de Mott ou de Mott-Hubbard. O problema de se entender a conjunção de desordem e interações [20, 21, 22, 23], apesar de alguns progressos, é ainda hoje um problema essencialmente aberto.

Teoricamente, têm sido desenvolvidas várias formas de se descrever a transição de Mott. Uma das primeiras foi feita pelo próprio Hubbard em uma série de trabalhos [17, 18, 19]. Sua abordagem consiste essencialmente em começar pelo chamado limite atômico, no qual a interação elétron-elétron é muito maior que a energia cinética dos mesmos e o sistema é isolante, e gradualmente abaixar o valor dessa interação. O gap característico do isolante de Mott, que separa duas bandas de excitações chamadas de bandas de Hubbard, finalmente se fecha para um valor crítico da interação $U = U_{cHubb}$ e o sistema se metaliza. Um ponto de vista oposto é devido a Brinkman e Rice [24]. Usando uma função de onda variacional proposta por [25, 26, 27], eles analisaram como o metal correlacionado é destruído pelo aumento das interações eletrônicas. Nesse caso, num determinado valor crítico da interação $U = U_{cBR}$, as quase partículas do líquido de Fermi fortemente correlacionado desaparecem e o sistema se torna isolante. Nem a descrição de Hubbard consegue descrever corretamente as quase partículas do metal correlacionado, nem a abordagem de Brinkman e Rice consegue prever a presença das bandas de Hubbard. Tanto uma característica quanto a outra são observadas, por exemplo, em medidas de condutividade óptica, o que aponta para a insuficiência dessas duas abordagens.

O advento da Teoria Dinâmica de Campo Médio (DMFT) [28, 29] permitiu obter uma descrição da transição de Mott que unifica os pontos de vista de Hubbard e Brinkman e Rice. A DMFT é capaz de incorporar, para valores intermediários da interação U , tanto as quase partículas do líquido de Fermi em baixas energias quanto as bandas de Hubbard em altas energias. Nessa descrição, a transição de Mott é uma transição de primeira ordem, caracterizada pelo desaparecimento das quase-partículas e deixando para trás apenas as excitações de energia finita das bandas de Hubbard. A transição é caracterizada pela existência de uma região de coexistência entre o metal e o isolante, como no caso de super-resfriamento e super-aquecimento da transição

líquido-gás. Também como no caso dessa transição, a linha de transição de primeira ordem no diagrama de fases de temperatura versus a interação U termina num ponto crítico de segunda ordem em (T_c, U_c) . Abaixo de T_c , a resistividade apresenta um salto abrupto como função de U . Esse salto diminui com o aumento da temperatura e se anula no ponto crítico. Nesse sentido, existem grandes similaridades entre a transição de Mott na descrição da DMFT e a transição líquido-gás. Mais detalhes dessa similaridade serão dados no decorrer dessa tese.

O objetivo dessa tese é estudar os efeitos de desordem na transição de Mott. Para isso, precisamos utilizar uma generalização da DMFT capaz de incorporar de maneira não trivial esses efeitos. A generalização natural da DMFT para o caso desordenado é obtida na chamada Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatístico (StatDMFT) [30, 31]. As características mais importantes desse método são (i) a incorporação de todos os efeitos de localização de Anderson (na verdade, o método é exato no limite não interagente), que aparecem nas propriedades dos estados de partícula única e (ii) a incorporação dos efeitos locais da interação, como na DMFT. Efeitos de interação não locais são ausentes nessa abordagem. Existem poucos estudos através da StatDMFT para sistemas de redes realísticas que descrevem a transição de Mott desordenada [32, 33, 34, 35, 36]. Muitos sistemas estudados até agora analisaram a transição de Mott desordenada na rede de Bethe [32, 33, 34] ou se resumiram ao caso de temperatura nula [35, 36]. Portanto, os resultados obtidos nesta tese constituem uma contribuição nova para a análise desse importante problema físico.

A estrutura dessa tese é a seguinte. No capítulo 2 são apresentados resultados experimentais sobre alguns sistemas que apresentam a transição de Mott [3, 2]. Nele também é apresentado como a transição de Mott é descrita usando a DMFT [4].

No capítulo 3.3 é feita uma revisão das bases teóricas da DMFT e, no caso desordenado, da StatDMFT. Os resultados que obtivemos usando a DMFT para transição de Mott numa rede bi-dimensional no caso limpo estão na seção 4.2. Nela mostramos como é possível usar a função de Green local obtida a partir da DMFT para monitorar os comportamentos metálico e isolante do sistema. Essa quantidade é portanto usada como parâmetro de ordem para a transição de Mott. Obtivemos assim curvas de histerese para diferentes temperaturas e o diagrama de fases no caso limpo no plano

temperatura T versus interação U .

Os resultados que obtivemos usando a StatDMFT para o estudo da transição de Mott desordenadas em duas dimensões podem ser encontrados na seção 4.3. Uma descrição detalhada sítio a sítio da função de Green local é apresentada para diferentes valores de temperatura. A transição de Mott nesse caso caracteriza-se pelo aparecimento de bolhas metálicas dentro do isolante ou bolhas isolantes dentro do metal.

Como argumentado no capítulo 5, a transição de Mott pertence à mesma classe de universalidade da transição líquido-gás ou da transição ferromagnética no modelo de Ising [37, 2]. Dessa forma, é possível estender a análise para o caso desordenado através da analogia entre o modelo de Hubbard desordenado e o modelo de Ising com campo aleatório. Isso permite aplicar o chamado teorema de Imry e Ma e suas consequências [38, 39] para o modelo de Hubbard desordenado. Nas seções 5.5 e 5.6 são apresentados os resultados da StatDMFT à luz dessa analogia. Nossos resultados se mostraram perfeitamente compatíveis com essa generalização do teorema de Imry e Ma para o nosso modelo.

É muito importante também estudar as propriedades de transporte na transição de Mott desordenada. Embora não exista ainda uma maneira consensual de se calcular a resistividade na StatDMFT, podemos usar uma analogia com um sistema de resistores clássicos aleatórios no caso em que o transporte é completamente incoerente, ou seja, os efeitos de espalhamento inelástico são tais que o livre caminho médio é da ordem do parâmetro de rede. Isso é feito no capítulo 6. A distribuição espacial da corrente para diferentes valores de interação é mostrado na seção 6.4, assim como o valor médio da corrente em função da interação local de Coulomb, para diferentes valores de temperatura. Como cálculos de transporte no regime quântico na rede de Hubbard desordenada ainda constituem um assunto em aberto, nossa contribuição nesse capítulo constitui um primeiro passo no entendimento das propriedades de transporte.

Finalmente, no capítulo 7 é feito um estudo das paredes de domínio entre a fase metálica e a fase isolante usando um modelo baseado uma cadeia linear finita conectada a dois reservatórios, um metálico à esquerda e um isolante à direita. Esse estudo é importante porque, como será mostrado no capítulo 4, grande parte do sis-

tema é coberto por essas paredes de domínio, que portanto podem ter grande impacto nas propriedades de transporte. Na seção 7 são apresentados os resultados para as paredes de domínio para diferentes valores de temperatura na região de coexistência. Veremos como a largura da parede varia com a temperatura e como as quantidades locais variam através da parede.

Conclusões finais são apresentadas na seção 8.

Capítulo 2

Importância do estudo da transição de Mott

2.1 Introdução

COMO JÁ DITO, estamos interessados no estudo teórico da transição metal-isolante de Mott, especialmente nos efeitos de desordem sobre suas características. De fato, muitos dos sistemas onde essa transição é estudada não são puros. Eles contém impurezas, defeitos, ou outros tipos de imperfeições. A influência desta desordem aleatória é de interesse do ponto de vista teórico e experimental. Em particular, estamos interessados na transição metal-isolante de Mott, que acontece como uma consequência da competição entre a energia cinética e a energia de interação Coulombiana de um sistema. Compostos como V_2O_3 dopado com Cr [2], NiS_xSe_{2-x} , [40] e compostos orgânicos, apresentam este tipo de transição. Nesses sistemas, a condutividade muda descontinuamente no ponto da transição, o que caracteriza a transição como de primeira ordem. Esta propriedade física muda dramaticamente com a variação de parâmetros tais como, temperatura, pressão, ou a aplicação de um campo magnético externo [2, 40, 3, 13]. Como consequência da necessidade de novas tecnologias ou simplesmente a curiosidade de explorar novos e interessantes fenômenos, a transição metal-isolante de Mott tem sido um dos problemas mais estudados nas últimas décadas e um dos menos entendidos na física da matéria condensada [41]. Inicialmente

ele foi estudado por Mott [16] e, posteriormente Hubbard propôs um modelo teórico mínimo para descrever a transição de Mott [17, 18, 19]. Devido à sua importância, a transição de Mott tem sido muito estudada desde então, tanto do ponto de vista experimental [2, 13] quanto teoricamente [42, 43, 37, 44].

2.2 Transição de Mott do ponto de vista experimental.

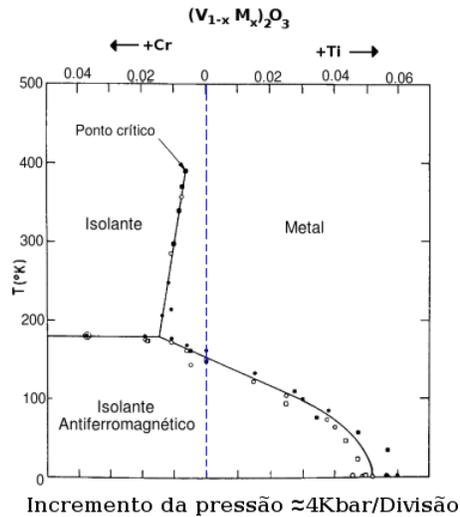


Figura 2.1: Diagrama de fases para a transição metal-isolante em V_2O_3 como função da dopagem com Cr ou Ti e como função da pressão química. A transição metal-isolante, que é de primeira ordem, termina num ponto crítico de segunda ordem. O ponto de pressão zero é movimentado com a escala superior [1].

A interação elétron-elétron é responsável pelo caráter isolante de muitos metais de transição. Há duas formas de fazer um isolante de Mott ter um comportamento metálico. A primeira é introduzindo portadores de carga por dopagem. A segunda consiste em diminuir a razão entre a correlação elétron-elétron e a energia cinética através da aplicação de pressão. Um dos compostos que apresentam transição metal-isolante de Mott é o óxido de vanádio dopado com cromo $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$, o qual exibe uma transição de um isolante de Mott paramagnético a um metal fortemente correlacionado [2]. A transição para o estado metálico pode ser desencadeada pela redução da temperatura (para um valor suficientemente pequeno da concentração x) diminuindo o valor da concentração x , ou pelo incremento da pressão P [1], como mostrado na figura 2.1.

Estudos experimentais no $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$ revelaram que um decrescimento no valor da concentração $\Delta x \sim -0.01$ corresponde a um incremento no valor da pressão $\Delta P \sim 4kbar$ [2]. A transição de Mott é uma transição de primeira ordem caracterizada por um salto abrupto em uma das grandezas físicas, neste caso a condutividade, que tem um salto típico de $(10^4 - 10^7)\mu\Omega cm$ na região da transição de Mott. Para se observar a transição de Mott pode-se começar, por exemplo, com o sistema preparado como isolante, sendo $x = 0.011$, $T = 350K$ e $P = 1atm$ (ver figura 2.2.b). Gradualmente o valor da pressão é incrementado até que para um valor crítico de pressão que vamos chamar de $P_M(T)$ é observado um salto abrupto na condutividade, da ordem de $10^3\mu\Omega cm$. De maneira similar podemos agora começar com um comportamento metálico, como por exemplo $x = 0.011$, $T = 350K$ e $P = 5000atm$. Gradualmente o valor da pressão diminui até que para um certo valor $P_I(T)$ é observada uma queda abrupta da condutividade. Abaixo da temperatura crítica T_c o caminho percorrido para ir de metal a isolante é diferente daquele de isolante para metal. Essa dependência da variação de uma quantidade física com o estado inicial do sistema caracteriza o que chamamos de histerese e os diferentes caminhos formam laços (“loops”) de histerese. A região compreendida dentro do laço de histerese é conhecida como região de coexistência pois nela os dois estados, metal e isolante, são observados. Evidentemente, apenas um desses estados é o estados de equilíbrio termodinâmico, o outro sendo apenas metaestável. As linhas que determinam os limites da região de coexistência são conhecidas como espinodais $(P_I(T), P_M(T))$. À medida que nos aproximamos do ponto crítico, o salto abrupto na condutividade diminui e ele é zero exatamente em (P_c, T_c) . A transição de primeira ordem termina em um ponto crítico de segunda ordem (P_c, T_c) e nesse ponto crítico a condutividade é contínua. Na figura 2.2 são apresentados alguns resultados experimentais obtidos no artigo [2], onde curvas de histerese da condutividade como função do decrescimento da pressão, na região de temperaturas abaixo de $T_c \sim 457.5K$ (curvas em azul), foram observadas. Deve-se notar como o salto da condutividade vai ficando cada vez menor à medida que a temperatura aumenta, acompanhado por uma redução da região de coexistência. Acima de $T_c \sim 457.5K$ (curvas em laranja) são observadas curvas suaves e ausência da região de coexistência.

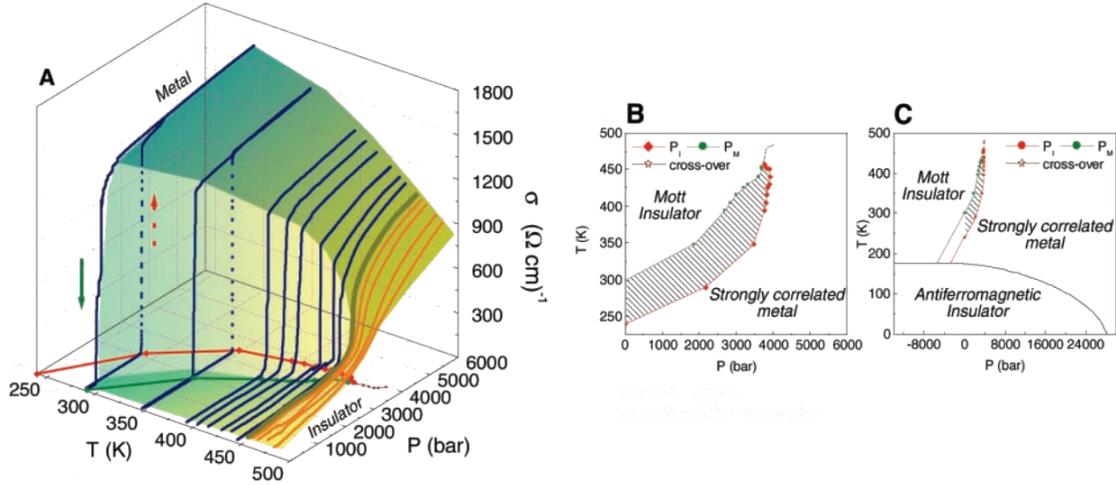


Figura 2.2: (A) Condutividade como função da pressão para diferentes valores de temperatura. (B) Diagrama de fases (P, T) para o óxido de vanádio dopado com cromo $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$ próximo de (P_c, T_c) (C) Visão global do diagrama de fases para o óxido de vanádio dopado com cromo $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$ sendo $x = 0.011$ [2].

Se queremos ter uma visão mais local do que acontece na transição de Mott pode-se fazer um estudo do comportamento espacial da condutividade como feito na referência [3]. Usando o método de Microscopia de Varredura do Infravermelho foi medido o valor da polarizabilidade local da amostra, sendo que esta está relacionada com a função dielétrica complexa

$$\alpha^{local}(2\omega) \rightarrow \epsilon_1^{local}(2\omega) + i\epsilon_2^{local}(2\omega).$$

Por sua vez, a parte imaginária da polarizabilidade local está relacionada com a condutividade através de

$$\sigma^{local}(2\omega) = \frac{\omega}{4\pi} \epsilon_2^{local}(2\omega).$$

Para diferentes valores de temperatura foram feitas medidas da condutividade local que permitem observar as flutuações locais na amostra como mostrado na figura 2.3. Deve-se notar que para um valor de temperatura de $341K$ a amostra é homogênea, com um valor baixo da condutividade, característico do comportamento isolante. Ao aumentar o valor da temperatura pode-se observar o aparecimento de

“bolhas” metálicas que aumentam o seu tamanho com o aumento da temperatura. Em $T = 342.8K$ é observada uma grande não homogeneidade na amostra, acompanhada de um incremento no valor da condutividade. Quando a temperatura aumenta ainda mais, a amostra torna-se homogênea novamente e a condutividade alcança um valor alto característico do comportamento metálico.

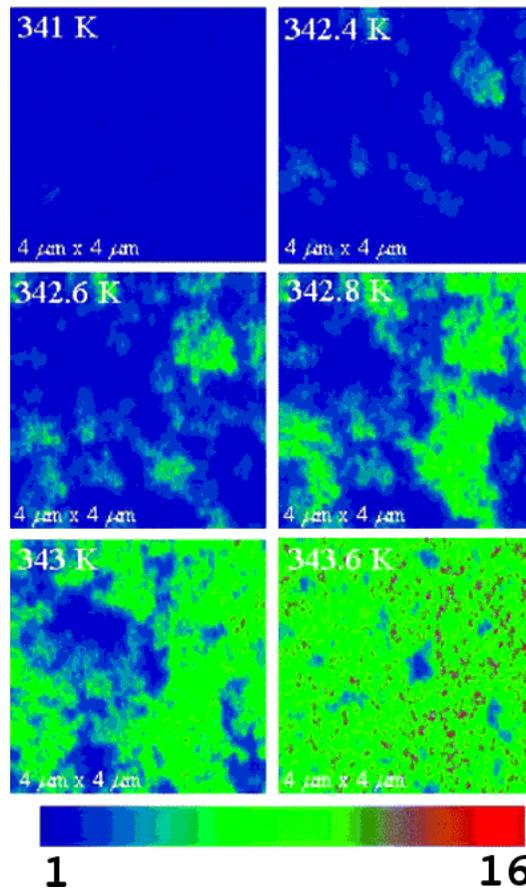


Figura 2.3: Condutividade local de uma amostra de óxido de vanádio VO_2 . A cor azul esta relacionada com valor baixos da condutividade (comportamento isolante). A cor vermelha é usada para descrever valores altos de condutividade (comportamento metálico) [3].

2.3 Transição de Mott do ponto de vista teórico.

Os limites em que um bom metal e um bom isolante são obtidos, representam sistemas físicos bastante diferentes, que são caracterizados por excitações elementares bem

distintas. No caso dos metais, estas correspondem a quase-partículas fermiônicas com carga e e spin $\frac{1}{2}$ excitadas na região da superfície de Fermi. No caso dos isolantes, em contraste, as excitações elementares são excitações bosônicas como ondas de spin. No regime intermediário da transição metal isolante de Mott, os dois tipos de excitações coexistem. Portanto, para fazer uma descrição completa da transição de Mott deve ser usado um modelo que consiga fazer a descrição da região metálica, isolante e da região de coexistência. Hubbard em 1964 introduziu o primeiro modelo teórico capaz de descrever a transição metal-isolante [45]. O Hamiltoniano associado é da forma:

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

sendo $c_{i\sigma}^\dagger$ o operador de criação no sítio i com projeção de spin σ . O parâmetro t corresponde à amplitude de probabilidade de um elétron pular para o sítio vizinho e U é a repulsão local entre elétrons no mesmo sítio.

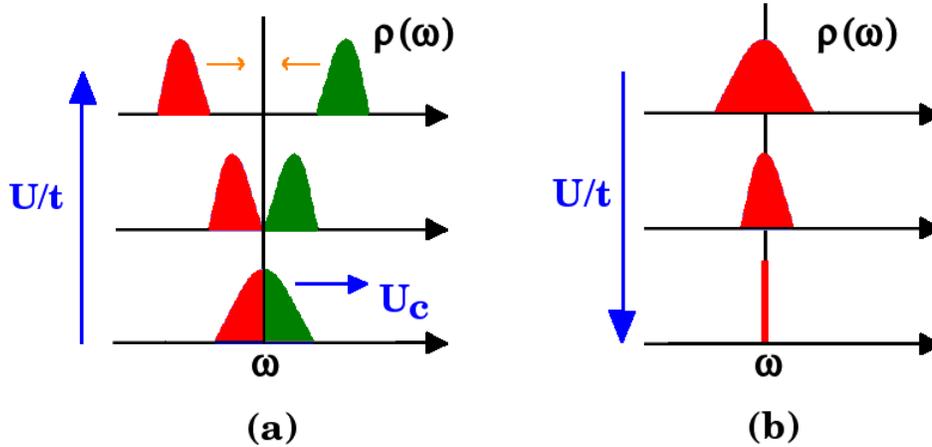


Figura 2.4: a) Transição de Mott segundo Hubbard. b) Transição de Mott segundo Brinkman e Rice.

A análise preliminar de Hubbard [17, 18, 19] focou o limite fortemente isolante, onde há duas bandas, as chamadas bandas de Hubbard inferior e superior, separadas por um gap da ordem de U . Ele concluiu que a transição de Mott ocorre quando as duas bandas se tocam e o gap se fecha em $\frac{U_c^{III}}{D} = \sqrt{3} \approx 1.732$ [19]. Este tratamento oferece uma boa solução isolante para valores de U grandes, mas não captura corre-

tamente a física de baixas energias da parte metálica, as quase-partículas do Líquido de Fermi [46]. Brinkman e Rice em 1970 [24], usando a função de onda variacional de Gutzwiller, encontraram que a transição de Mott ocorre para um valor maior de interação $\frac{U_c^{BR}}{D} = 8 \frac{\bar{e}}{D} \approx 3.37$. A função de onda de Gutzwiller [25] dá uma boa descrição do Líquido de Fermi na região metálica, mas não consegue fazer a descrição da região isolante e carece das excitações de altas energias que dão origem às bandas superior e inferior de Hubbard da solução isolante. Brinkman e Rice trabalharam na fase metálica, que descreve o Líquido de Fermi fortemente renormalizado, com a característica de que a escala de Fermi colapsa de maneira gradual à medida que o sistema se aproxima da transição. A transição metal-isolante é sinalizada pelo desaparecimento das quase-partículas do líquido de Fermi, ver figura 2.4.b.

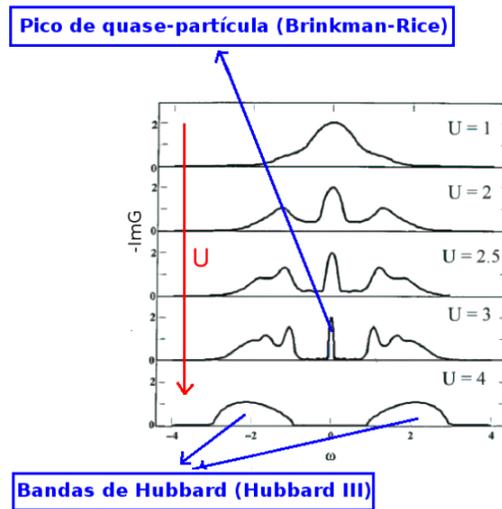


Figura 2.5: Transição de Mott usando a Teoria Dinâmica Campo Médio (DMFT) [4]

Em 1989, Metzner e Vollhardt [28], descobriram um limite simples, mas não trivial, do modelo de Hubbard: a alta dimensionalidade. Este limite de dimensão infinita fornece a chamada Teoria Dinâmica de Campo Médio (DMFT), que será introduzida posteriormente e através da qual será obtida uma descrição mais completa da transição de Mott. A figura 2.5 mostra a densidade de estados a temperatura zero como uma função da interação U segundo a DMFT. No gráfico, podemos observar as duas bandas obtidas por Hubbard e o pico de quase-partículas de Brinkman e Rice. Um

diagrama de fases característico dos metais de transição é obtido na DMFT.

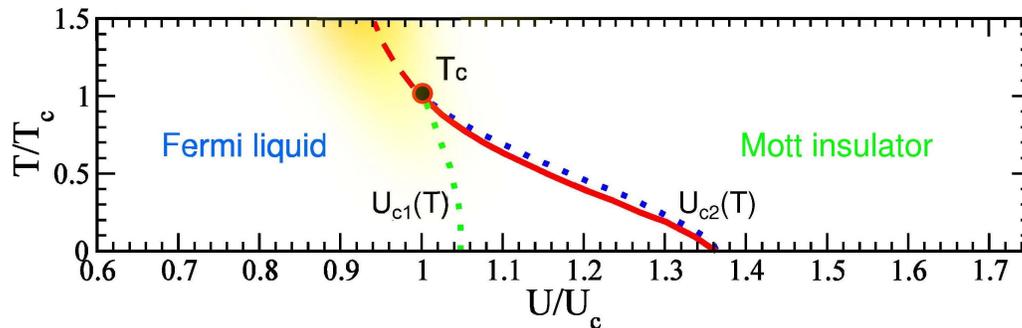


Figura 2.6: Diagrama de fases da transição de Mott segundo a DMFT [5].

Pode-se observar na figura 2.6 como, partindo da fase metálica para valores pequenos de U e aumentando-se o valor da interação de maneira gradual, o sistema sofre uma transição de metal a isolante em U_{c2} (linha azul pontilhada). De maneira similar, se o sistema inicialmente é preparado como isolante, ao diminuir o valor da interação é encontrado o valor U_{c1} (linha verde pontilhada) no qual o sistema abandona o comportamento isolante e apresenta comportamento metálico. Isto é válido para diferentes valores de temperatura. A região compreendida entre $U_{c1} < U < U_{c2}$ é denominada região de coexistência, pois nela as duas soluções, metálica e isolante, são encontradas. Nesta região há apenas uma fase estável, que é a fase de equilíbrio termodinâmico. A separação entre as fases estáveis é dada pela linha cheia vermelha. Dentro da região de coexistência quando uma fase é estável a outra é apenas meta-estável. Esta região culmina no ponto crítico de segunda ordem em T_c . Acima desta temperatura é possível ir de maneira contínua de metal a isolante via a região de “crossover” (Região em laranja).

Capítulo 3

Tratamentos teóricos da transição de Mott.

3.1 Introdução

HUBBARD foi o primeiro a apresentar uma solução aproximada do seu modelo capaz de descrever a transição de Mott, começando no limite isolante [17, 18, 19]. Posteriormente, Brinkman e Rice obtiveram uma descrição da transição de Mott como governada pelo desaparecimento das quase-partículas do líquido de Fermi [24]. A Teoria Dinâmica de Campo Médio (DMFT), introduzida em 1989 [28], permitiu unificar esses dois pontos de vista da transição de Mott. A DMFT será estudada neste capítulo, onde são apresentadas as deduções das equações no caso limpo (seção 3.3). No caso desordenado, a teoria usada será a chamada Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio (StatDMFT), que será apresentada na seção 3.4.

3.2 Modelo de Hubbard

O modelo de Hubbard é um dos modelos mais simples capaz de descrever a transição metal-isolante [17, 18, 19]. O Hamiltoniano de maneira geral pode ser escrito como

$$H = - \sum_{\langle \ell, m \rangle \sigma} t \left(c_{\ell\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + c_{m\sigma}^\dagger c_{\ell\sigma} \right) + \sum_{\ell\sigma} \epsilon_\ell n_{\ell\sigma} + U \sum_{\ell} \left(n_{\ell\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{\ell\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \quad (3.1)$$

onde $c_{\ell\sigma}^\dagger$ é o operador de criação no sítio ℓ com projeção de spin σ . O parâmetro t corresponde ao “hopping” entre sítios ℓ, m e $\langle \ell, m \rangle$ significa primeiros vizinhos. $U > 0$ é a repulsão local entre elétrons no mesmo sítio. O termo ϵ_ℓ é a energia orbital no sítio ℓ . No caso do sistema limpo ϵ_ℓ não depende do sítio. No caso desordenado as energias diagonais ϵ_ℓ são diferentes para cada sítio da rede, sendo distribuídas segundo uma distribuição de probabilidade $P(\epsilon)$ (geralmente uniforme ou gaussiana), cuja variância é dada por W^2 . Na ausência de desordem a transição de Mott é obtida quando há em média um elétron por sítio, como resultado da competição do termo associado com a energia cinética do sistema, neste caso t , e o termo de interação local U . Se a razão $\frac{t}{U} \rightarrow \infty$, então o comportamento do sistema é metálico, mas se $\frac{t}{U} \rightarrow 0$ o comportamento é isolante. O sistema então exhibe uma transição metal-isolante para algum valor $U = U_c$. No caso unidimensional, a solução exata do modelo é conhecida [47] e sabe-se que $U_c = 0$, mas acredita-se que $U_c \neq 0$ em dimensões superiores.

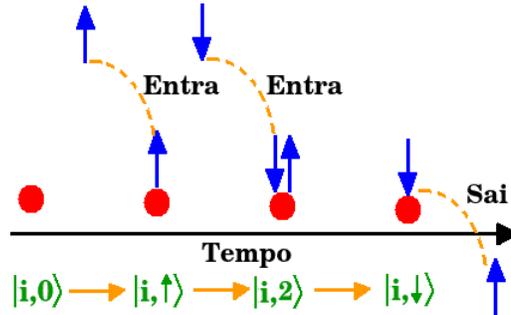


Figura 3.1: Dinâmica local do modelo de Hubbard. O estado de um sítio dado no modelo de Hubbard varia à medida que o tempo passa e pode ser $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ ou $|\uparrow\downarrow\rangle$.

Se focarmos a atenção em apenas um sítio da rede podemos observar como a ocupação varia em função do tempo e os estados variam entre $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ ou $|\uparrow\downarrow\rangle$, que são o estado vazio, com unicamente um elétron de spin para cima, para baixo ou um estado duplamente ocupado com spins opostos. Um elétron no sítio i pode sair, percorrer a rede e retornar para o sítio i , como é mostrado na figura 3.1. Descreveremos uma

teoria que é capaz de fazer a descrição local do modelo de Hubbard e, com isso, a transição de Mott. DMFT [4] e sua extensão no caso desordenado, a StatDMFT, conseguem fazer a descrição da dinâmica local do modelo de Hubbard. A DMFT e a StatDMFT serão apresentadas nas seções 3.3 e 3.4, respectivamente.

3.3 Teoria Dinâmica de Campo Médio (DMFT): Caso limpo

Os fundamentos da DMFT estão descritos nos trabalhos de W. Metzner e D. Vollhardt de 1989 [28, 48], onde as propriedades não triviais dos sistemas de muitos corpos são descritas em dimensão infinita. Posteriormente em 1992, Georges e Kotliar [49] provaram que DMFT [4], permite mapear o problema da rede no problema de uma única impureza embebida em um banho de elétrons de condução que é determinado de maneira auto-consistente.

No que se segue será apresentado o conjunto de equações auto-consistentes que definem a TDCM, que resulta da formulação em $d \rightarrow \infty$ e que consiste no mapeamento do modelo da rede no problema de uma impureza mais uma condição de auto-consistência. Consideraremos o modelo de Hubbard como definido na equação (3.1) com $\epsilon_\ell = 0$.

No limite de dimensão infinita ($d \rightarrow \infty$), como foi notado por Metzner e Vollhardt [28], o parâmetro de “hopping” t deve ser reescalado como $t \rightarrow \frac{\tilde{t}}{\sqrt{d}}$ para resultar num limite não trivial. Vamos focar nossa atenção num sítio particular da rede, chamado zero, que no caso limpo pode ser qualquer sítio. Para fazer a descrição da dinâmica do Hamiltoniano é preciso analisar a ação, que pode ser escrita no tempo imaginário como

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{\ell,\sigma} c_{\ell\sigma}^\dagger(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} c_{\ell\sigma}(\tau) - \sum_{\ell,m,\sigma} t \left[c_{\ell,\sigma}^\dagger(\tau) c_{m,\sigma}(\tau) + h.c \right] + \sum_\ell U n_{\ell\uparrow}(\tau) n_{\ell\downarrow}(\tau) \right]. \quad (3.2)$$

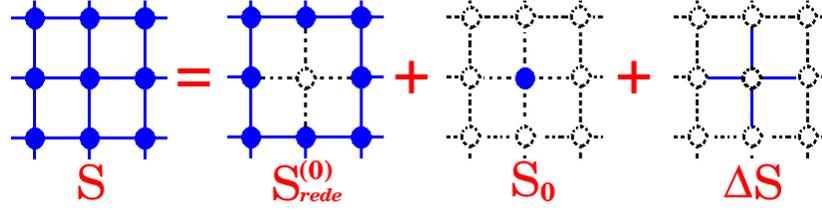


Figura 3.2: A decomposição da ação do Hamiltoniano de Hubbard.

Essa ação pode ser decomposta em três termos

$$S = S_o + S_{lat}^0 + \Delta S,$$

onde S_o é a ação do sítio zero, S_{lat}^0 a ação da rede com o sítio zero removido e ΔS é o termo de ação que liga o sítio zero com o resto da rede, como é mostrado na figura 3.2, onde

$$S_{lat}^o = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{\ell \neq 0, \sigma} c_{\ell\sigma}^\dagger(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} c_{\ell\sigma}(\tau) - \sum_{\ell \neq 0, m \neq 0, \sigma} t \left[c_{\ell, \sigma}^\dagger(\tau) c_{m, \sigma}(\tau) + h.c \right] + \sum_{\ell \neq 0} U n_{\ell\uparrow}(\tau) n_{\ell\downarrow}(\tau) \right], \quad (3.3)$$

$$S_o = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{\sigma} c_{0\sigma}^\dagger(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} c_{0\sigma}(\tau) + U n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau) \right], \quad (3.4)$$

$$\Delta S = -t \int_0^\beta d\tau \sum_{\ell \neq 0, (\ell, 0), \sigma} \left[c_{0, \sigma}^\dagger(\tau) c_{\ell, \sigma}(\tau) + c_{\ell, \sigma}^\dagger(\tau) c_{0, \sigma}(\tau) \right]. \quad (3.5)$$

A função de partição do modelo de Hubbard é escrita no formalismo de integral funcional sobre as variáveis de Grassmann [50] como

$$\begin{aligned} Z &= \int \prod_{\ell\sigma} [dc_{\ell\sigma}^\dagger] [dc_{\ell\sigma}] e^{-S} \\ Z &= \int \prod_{\sigma} [dc_{0\sigma}^\dagger] [dc_{0\sigma}] e^{-S_o} \int \prod_{\ell \neq 0, \sigma} [dc_{\ell\sigma}^\dagger] [dc_{\ell\sigma}] e^{-S_{lat}^o - \Delta S}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

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

$$\frac{1}{Z_{eff}} e^{-S_{eff}[c_{0\sigma}^\dagger, c_{0\sigma}]} = \frac{1}{Z} \int \prod_{\ell \neq 0, \sigma} [dc_{\ell\sigma}] [dc_{\ell\sigma}^\dagger] e^{-S}, \quad (3.7)$$

$$\frac{1}{Z_{eff}} e^{-S_{eff}[c_{0\sigma}^\dagger, c_{0\sigma}]} = \frac{e^{-S_0}}{Z} \int \prod_{\ell \neq 0, \sigma} [dc_{\ell\sigma}^\dagger] [dc_{\ell\sigma}] e^{-S_{latt}^0 - \Delta S}. \quad (3.8)$$

Substituindo a equação (3.5)

$$\frac{1}{Z_{eff}} e^{-S_{eff}[c_{0\sigma}^\dagger, c_{0\sigma}]} = \frac{e^{-S_0}}{Z} \int \prod_{\ell \neq 0, \sigma} [dc_{\ell\sigma}^\dagger] [dc_{\ell\sigma}] e^{-S_{latt}^0} e^{t \int_0^\beta d\tau \sum_{\ell \neq 0, \sigma} [c_{0, \sigma}^\dagger(\tau) c_{\ell, \sigma}(\tau) + c_{\ell, \sigma}^\dagger(\tau) c_{0, \sigma}(\tau)]} \quad (3.9)$$

Como $c_{0, \sigma}$ é uma fonte de campo para $c_{\ell\sigma}^\dagger$, então a integral sobre $c_{\ell\sigma}$ é o funcional geratriz das funções de Green conectadas da rede com o sítio zero removido. Portanto,

$$S_{eff} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\ell_1 \dots \ell_n, \sigma} t^{2n} \int c_{0\sigma}^\dagger(\tau_{\ell_1}) \dots c_{0\sigma}^\dagger(\tau_{\ell_n}) c_{0\sigma}(\tau_{m_1}) \dots c_{0\sigma}(\tau_{m_n}) * G_{\ell_1 \dots \ell_n}^{0(con)}(\tau_{\ell_1} \dots \tau_{\ell_n}, \tau_{m_1} \dots \tau_{m_n}) d\tau_{\ell_1} \dots d\tau_{m_n} + S_0 \quad (3.10)$$

$G_{\ell_1 \dots \ell_n}^{0(con)}(\tau_{\ell_1} \dots \tau_{\ell_n}, \tau_{m_1} \dots \tau_{m_n})$ é função de Green conectada de n corpos para propagação entre sítios vizinhos a 0 numa rede com o sítio zero removido.

No limite $d \rightarrow \infty$, t é reescalado como $t \sim \frac{\tilde{t}}{\sqrt{d}}$ e a ação efetiva simplifica. A seguir, vamos fazer a análise do termo de um corpo ($n = 1$), que é

$$S_{eff}^{(1)} = \sum_{\ell_1, m_1, \sigma}^d t^2 \int c_{0\sigma}^\dagger(\tau_{\ell_1}) c_{0\sigma}(\tau_{m_1}) G_{\ell_1, m_1}^{0(con)}(\tau_{\ell_1}, \tau_{m_1}) d\tau_{\ell_1} d\tau_{m_1}. \quad (3.11)$$

Note que $\sum_{\ell_1, m_1}^d \sim d^2$, $t^2 \sim \frac{1}{d}$. A função de Green $G_{\ell_1, m_1}^{0(con)}(\tau_{\ell_1}, \tau_{m_1})$ é calculada, em teoria de perturbação no hopping, escolhendo o caminho mostrado na figura 3.3.

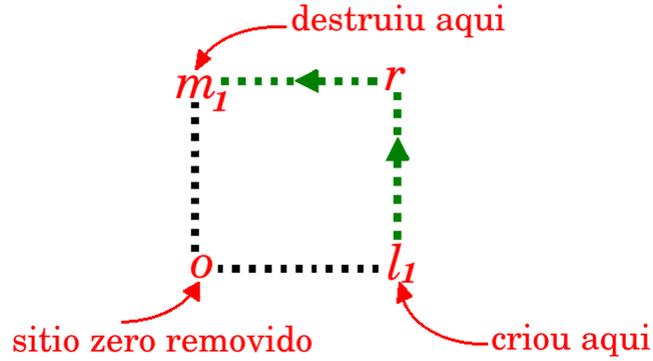


Figura 3.3: Caminho percorrido por um elétron descrito pela função de Green de um corpo. Em l_1 é criada uma partícula e em m_1 ela é destruída, sendo que o sítio zero foi removido.

No caso de dois corpos ($n = 2$), o termo é da forma

$$S_{eff}^{(2)} = \sum_{\ell_1, \ell_2, m_1, m_2, \sigma}^d t^4 \int c_{0\sigma}^\dagger(\tau_{\ell_1}) c_{0\sigma}^\dagger(\tau_{\ell_2}) c_{0\sigma}(\tau_{m_1}) c_{0\sigma}(\tau_{m_2}) * G_{\ell_1, \ell_2, m_1, m_2}^{0(con)}(\tau_{\ell_1}, \tau_{\ell_2}, \tau_{m_1}, \tau_{m_2}) d\tau_{\ell_1} d\tau_{\ell_2} d\tau_{m_1} d\tau_{m_2}, \quad (3.12)$$

de maneira geral, para ℓ_1, ℓ_2, m_1, m_2 todos distintos. Neste caso, $\sum_{\ell_1, \ell_2, m_1, m_2}^d \sim d^4$, $t^4 \sim \frac{1}{d^2}$ e a função de Green é calculada escolhendo caminhos como os ilustrados na figura 3.4. Em ℓ_1 e ℓ_2 temos criação de partículas e m_1, m_2 dão conta da sua destruição.

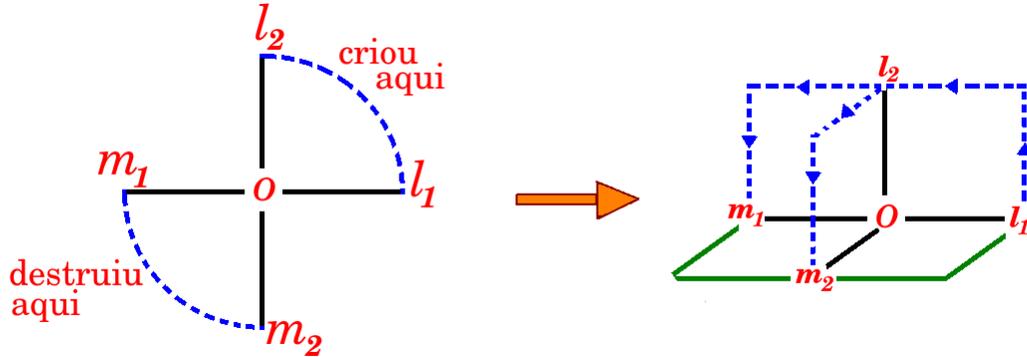


Figura 3.4: Caminhos escolhidos para fazer o cálculos da função de Green no caso $n = 2$.

A função de Green é calculada usando as distâncias de Manhattan entre sítios ℓ e m , $|\ell - m|$ e

$$G_{\ell_1 \ell_2 m_1 m_2}^{0(con)} \sim t^{|\ell_1 - \ell_2|} t^{|\ell_2 - m_1|} t^{|\ell_2 - m_2|}, \quad (3.13)$$

$$G_{\ell_1 \ell_2 m_1 m_2}^{0(con)} \sim \frac{1}{d} \frac{1}{d} \frac{1}{d} \sim \frac{1}{d^3}. \quad (3.14)$$

Assim, no limite $d \rightarrow \infty$, o termo considerado fica

$$S_{eff}^{(2)} = \frac{1}{d^2} d^4 \frac{1}{d^3} \sim \frac{1}{d} \xrightarrow{d \rightarrow \infty} 0, \quad (3.15)$$

de maneira que no limite de dimensão infinita, o termo com $n = 2$ da ação efetiva vai a zero. Similarmente, pode-se provar que todos os termos de ordem superior também se anulam. Portanto, em $d = \infty$ apenas o termo de um corpo sobrevive,

$$S_{eff} = \sum_{\ell, m, \sigma}^d t^2 \int c_{0\sigma}^\dagger(\tau) G_{\ell, m}^{0(con)}(\tau, \tau') c_{0\sigma}(\tau') d\tau d\tau' + S_0. \quad (3.16)$$

Da equação 3.4 temos

$$\begin{aligned} S_{eff} &= \sum_{\ell, m, \sigma}^d t^2 \int c_{0\sigma}^\dagger(\tau) G_{\ell, m}^{0(con)}(\tau, \tau') c_{0\sigma}(\tau') d\tau d\tau' \\ &+ \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{\sigma} c_{0\sigma}^\dagger(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} c_{0\sigma}(\tau) + U n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau) \right], \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$S_{eff} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\sigma} c_{0\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{0\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau), \quad (3.18)$$

onde

$$\mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') = \delta(\tau - \tau') \frac{\partial}{\partial \tau} + \sum_{\ell, m, \sigma}^d t^2 G_{\ell, m}^{0(con)}(\tau, \tau'), \quad (3.19)$$

ou

$$\mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') = \delta(\tau - \tau') \frac{\partial}{\partial \tau} + \Delta_0(\tau - \tau'). \quad (3.20)$$

Nessa última expressão $\Delta_0(\tau - \tau') = \sum_{\ell, m, \sigma}^d t^2 G_{\ell, m}^{0(con)}(\tau, \tau')$ é a chamada função de hibridização, que descreve a amplitude de probabilidade do sítio 0 doar um elétron para o

ambiente local em τ e recebê-lo de volta em τ' . A ação efetiva (3.18) corresponde a um modelo de impureza única de Anderson inserida num mar de elétrons de condução descrito pela função de hibridização $\Delta_0(\tau)$.

Dada S_{eff} , pode-se utilizar algum dos métodos de muitos corpos para calcular

$$-G_{00\sigma}(\tau - \tau') = \left\langle T \left[c_{0\sigma}(\tau) c_{0\sigma}^\dagger(\tau') \right] \right\rangle_{S_{eff}}, \quad (3.21)$$

e, no espaço de frequências de Matsubara,

$$G_{00\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \Delta_0(i\omega_n) - \Sigma(i\omega_n)},$$

onde $\Sigma(i\omega_n)$ é a chamada função de auto-energia, que contém todos os efeitos das interações. O valor de $\Sigma(i\omega_n)$ é sempre o mesmo para cada um dos sítios da rede. Portanto, conhecida $G_{00\sigma}(i\omega_n)$, podemos obter $\Sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - G_{00\sigma}^{-1}(i\omega_n)$.

Pode-se mostrar [28] que a auto-energia da função de Green da rede $G_{rede}(i\omega_n, \vec{k})$ não depende de \vec{k} , isto é, é puramente local e é igual a $\Sigma(i\omega_n)$ no limite $d \rightarrow \infty$. Portanto,

$$-G_{rede}(\tau - \tau') = \left\langle T \left[c_{0\sigma}(\tau) c_{0\sigma}^\dagger(\tau') \right] \right\rangle, \quad (3.22)$$

e, no espaço de frequências de Matsubara,

$$G_{rede}(i\omega_n, \vec{k}) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\vec{k}} - \Sigma(i\omega_n)}, \quad (3.23)$$

onde $\epsilon_{\vec{k}}$ corresponde ao valor de energia $\epsilon_{\vec{k}} = -2t \sum_{\ell=1}^d \cos(k_\ell)$. Para que o sistema tenha uma solução fechada, deve-se impor uma condição de auto-consistência. Esta consiste em igualar a função de Green calculada usando a ação efetiva com a função de Green local obtida a partir da função de Green da rede:

$$\sum_{\vec{k}} G_{rede}(i\omega_n, \vec{k}) = G_{00\sigma}(i\omega_n). \quad (3.24)$$

3.3.1 Analogia com o modelo de impureza única de Anderson

Vale lembrar que a função de hibridização $\Delta_0(\tau - \tau')$ descreve a amplitude de probabilidade do sítio 0 doar um elétron para o ambiente local em τ e recebê-lo de volta em τ' . O mesmo processo pode ser obtido se temos uma única impureza inserida num mar de elétrons de condução, que é descrita pelo Hamiltoniano de Anderson [51, 52]

$$H_{imp} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \epsilon_d \sum_{\sigma} c_{\sigma}^\dagger c_{\sigma} + U n_{c\uparrow} n_{c\downarrow} + \sum_{k,\sigma} V_k (a_{k\sigma}^\dagger c_{\sigma} + c_{\sigma}^\dagger a_{k\sigma}). \quad (3.25)$$

O primeiro termo do Hamiltoniano representa a dispersão dos elétrons de condução não interagentes. $a_{k\sigma}^\dagger$ é o operador de criação de elétrons com momento k e spin σ . O segundo termo corresponde à energia dos elétrons localizados. c_{σ}^\dagger é o operador de criação de elétrons localizados com spin σ . O terceiro termo representa a interação Coulombiana entre dois elétrons localizados, onde, $n_{c\sigma} = c_{\sigma}^\dagger c_{\sigma}$ é o operador número e U o potencial de interação. O último termo representa a energia de hibridização entre os estados estendidos e os estados localizados através do potencial de hibridização V_k .

A ação efetiva associada com o Hamiltoniano (3.25) é

$$S_{eff} = - \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\sigma} c_{0\sigma}^\dagger(\tau) \left[\delta(\tau - \tau') \frac{\partial}{\partial \tau} + \Delta_0(\tau - \tau') \right] c_{0\sigma}(\tau') + U \int_0^{\beta} d\tau n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau). \quad (3.26)$$

onde $\Delta_0(\tau - \tau')$ é a transformada de Fourier de

$$\Delta_0(i\omega_n) = \sum_k \frac{|V_k|^2}{i\omega_n - \epsilon_k}, \quad (3.27)$$

que tem a mesma forma que (3.18)-(3.20).

A importância de S_{eff}^{imp} é que agora podemos usar nossa intuição obtida a partir do entendimento do modelo de Anderson para entender a física de S_{eff} do modelo de Hubbard. Podemos ver o problema de uma rede na DMFT como um problema de uma impureza mais uma condição de auto-consistência. Métodos de muitos corpos como Monte Carlo Quântico (algoritmo de Hirsch e Fye) [53] e Teoria de Perturbação Iterativa (IPT) [54], que serão usados nesta tese e descritos em maior detalhe no

apêndice A, permitem encontrar a função de Green da ação efetiva S_{eff}^{imp}

$$-G_{00\sigma}(\tau - \tau') = \left\langle T \left[c_{0\sigma}(\tau) c_{0\sigma}^\dagger(\tau') \right] \right\rangle_{S_{eff}}, \quad (3.28)$$

que posteriormente é usada para continuar com o ciclo de auto-consistência da DMFT.

3.3.2 Ciclo de auto-consistência: caso limpo

O algoritmo usado para resolver problemas usando Teoria Dinâmica de Campo Médio consiste em propor um “chute” inicial para a função de hibridização¹ $\Delta_0^{(1)}(i\omega_n)$ e usar um dos métodos de muitos corpos para encontrar $G_{00\sigma}(i\omega_n)$. A partir da função de Green, pode-se obter a auto-energia $\Sigma(i\omega_n) = i\omega_n - \Delta_0^{(1)}(i\omega_n) - G_{00\sigma}^{-1}(i\omega_n)$. Calcula-se então a função de Green local da rede $G_{Local}(i\omega_n) = \sum_{\vec{k}} G_{rede}(i\omega_n, \vec{k})$. Podemos agora impor a condição de auto-consistência $G_{Local}(i\omega_n) = G_{00\sigma}(i\omega_n)$, para encontrar uma nova função de hibridização $\Delta_0^{(2)}(i\omega_n) = i\omega_n - \Sigma(i\omega_n) - [G_{Local}]^{-1}$. No caso em que $\Delta_0^{(1)}(i\omega_n) = \Delta_0^{(2)}(i\omega_n)$ segundo um critério de convergência determinado, o ciclo de auto-consistência termina. No caso contrário, voltamos para o início mas agora usando como função de hibridização $\Delta_0^{(2)}(i\omega_n)$ e continuamos até obtermos auto-consistência.

3.4 Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio

A abordagem da dinâmica da rede no caso desordenado será feita usando o Hamiltoniano de Hubbard (3.1). Como na DMFT, a StatDMFT começa por tomar um sítio genérico qualquer da rede, digamos ℓ , e integrar sobre todos os outros sítios para obter uma ação efetiva para o sítio ℓ . Devido às interações, serão gerados acoplamentos de todas as ordens (de dois, três, n corpos) entre os elétrons do sítio. A aproximação da StatDMFT consiste em reter, além da repulsão local de Hubbard, apenas termos quadráticos como na DMFT [52]. Esse passo não pode ser obtido no limite de dimensões infinitas como na DMFT, mas representa a generalização natural desta para o caso

¹O chute inicial é usualmente a uma função de hibridização que corresponde a uma solução metálica ou isolante para o modelo de Hubbard.

desordenado. Assim, a ação efetiva do sítio ℓ para o Hamiltoniano de Hubbard no caso desordenado é dada por

$$S_{eff}^{(\ell)} = \Sigma_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau d\tau' c_{\ell\sigma}^{\dagger}(\tau) \left[\delta(\tau - \tau') \frac{\partial}{\partial \tau} + \epsilon_{\ell} + \Delta_{\ell}(\tau - \tau') \right] c_{\ell\sigma}(\tau') + \int_0^{\beta} d\tau U n_{\ell\uparrow}(\tau) n_{\ell\downarrow}(\tau). \quad (3.29)$$

A função de hibridização $\Delta_{\ell}(\tau - \tau')$ é diferente para cada sítio da rede. $\Delta_{\ell}(\tau - \tau')$ descreve a amplitude de probabilidade do sítio ℓ doar um elétron para o ambiente local em τ e recebê-lo de volta em τ' . A ação efetiva (3.29) corresponde, como antes, a um modelo de impureza única de Anderson inserida num mar de elétrons de condução descrito pela função de hibridização $\Delta_{\ell}(\tau - \tau')$

$$\Delta_{\ell}(\tau - \tau') = t^2 \sum_{m,j=1}^z G_{jm}^{(\ell)}(\tau - \tau'), \quad (3.30)$$

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

$$G_{\ell m}^{(\ell)}(\tau - \tau') = - \left\langle T \left[c_{j\sigma}(\tau) c_{m\sigma}^{\dagger}(\tau') \right] \right\rangle^{(\ell)}. \quad (3.31)$$

A função de Green da rede pode ser escrita na base dos sítios como

$$\hat{G}_{\ell m}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n \hat{1} - \hat{H}_0 - \Sigma_{\ell m}(i\omega_n)}, \quad (3.32)$$

onde $\hat{H}_0 = - \sum_{\langle \ell, m \rangle \sigma} t \left(c_{\ell\sigma}^{\dagger} c_{m\sigma} + c_{m\sigma}^{\dagger} c_{\ell\sigma} \right) + \sum_{\ell\sigma} \epsilon_{\ell} n_{\ell\sigma}$ constitui a parte não interagente do Hamiltoniano de Hubbard. A auto-energia $\Sigma_{\ell m}(i\omega_n)$ contém todos os efeitos das interações. Assim como no caso limpo, assumimos que a auto-energia é puramente local $\Sigma_{\ell m}(i\omega_n) = \delta_{\ell m} \Sigma_{\ell\ell}(i\omega_n)$, mas agora muda de sítio para sítio.

Dada $S_{eff}^{(\ell)}$ pode-se utilizar algum método de muitos corpos, para calcular a função de Green local $G_{\ell\ell}(i\omega_n)$ correspondente à ação efetiva (3.18)

$$-G_{\ell\ell}(\tau - \tau') = \left\langle T \left[c_{\ell}(\tau) c_{\ell}^{\dagger}(\tau') \right] \right\rangle_{S_{eff}}. \quad (3.33)$$

Tendo conhecida $G_{\ell\ell}(i\omega_n)$ pode-se encontrar $\Sigma_{\ell\ell}(i\omega_n)$

$$G_{\ell\ell}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\ell} - \Delta_{\ell}(i\omega_n) - \Sigma_{\ell\ell}(i\omega_n)}. \quad (3.34)$$

A auto-consistência da StatDMFT é obtida especificando-se como encontrar, a partir da auto-energia, as funções de hibridização. As funções de Green interagentes são obtidas, usando inversão matricial, da equação (3.32). Como os termos diagonais, após fazer a inversão matricial, representam a função de Green local de cada sítio da rede, $G_{\ell\ell}(i\omega_n)$, as funções de hibridização podem ser obtidas como

$$\Delta_{\ell}(i\omega_n) = i\omega_n - \epsilon_{\ell} - \Sigma_{\ell\ell}(i\omega_n) - G_{\ell\ell}^{-1}. \quad (3.35)$$

3.4.1 Ciclo de auto-consistência: caso desordenado

Para uma dada realização de desordem ϵ_{ℓ} e U é usado um palpite inicial para $\Delta_{\ell}^{(1)}(i\omega_n)$. Encontra-se então a função de Green local $G_{\ell\ell}(i\omega_n)$ para $S_{eff}^{(\ell)}$, para todos os valores de ℓ . A partir de $G_{\ell\ell}(i\omega_n)$, obtém-se a auto-energia $\Sigma_{\ell\ell}(i\omega_n) = i\omega_n - \epsilon_{\ell} - \Delta_{\ell}(i\omega_n) - G_{\ell\ell}^{-1}(i\omega_n)$. Calcula-se então o resolvente (3.32) por inversão matricial. Os termos diagonais correspondem à função de Green para cada sítio da rede. Utilizando as funções de Green locais, obtém-se um novo conjunto de funções de hibridização $\Delta_{\ell}^{(2)}(i\omega_n) = i\omega_n - \epsilon_{\ell} - \Sigma_{\ell\ell}(i\omega_n) - G_{\ell\ell}^{-1}(i\omega_n)$. Os novos valores $\Delta_{\ell}^{(2)}(i\omega_n)$ são usados para encontrar uma nova ação efetiva, a partir da qual é obtida a nova função de auto-energia, para seguir com o ciclo de auto-consistência, que termina quando é atingida a convergência segundo algum critério determinado.

Capítulo 4

Resultados usando DMFT e StatDMFT.

4.1 Introdução

USANDO a DMFT no caso limpo, e StatDMFT no caso desordenado, foi possível obter uma descrição da transição de Mott para uma rede quadrada de $L \times L$ sítios, com $L \leq 20$. A função de Green local de cada sítio foi calculada usando Monte Carlo Quântico (algoritmo de Hirsch e Fye) [53], que é descrito em detalhe no apêndice A. Os resultados para o caso limpo estão na seção 4.2 e do caso desordenado na seção 4.3.

4.2 Metal e isolante na ausência de desordem: Resultados

Para fazer a descrição da transição de Mott em duas dimensões usamos o Hamiltoniano de Hubbard para uma rede quadrada. Acrescentamos “hopping” entre segundos vizinhos para eliminar a singularidade de Van Hove que aparece no nível de Fermi no caso sem desordem em semi-preenchimento, ao mesmo tempo em que se preserva a simetria partícula buraco. O Hamiltoniano fica então

$$H = - \sum_{\langle\ell,m\rangle\sigma} t \left(c_{\ell\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + c_{m\sigma}^\dagger c_{\ell\sigma} \right) - \sum_{\langle\langle\ell,m\rangle\rangle\sigma} t^* \left(c_{\ell\sigma}^\dagger c_{m\sigma} - c_{m\sigma}^\dagger c_{\ell\sigma} \right) + U \sum_{\ell} \left(n_{\ell\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{\ell\downarrow} - \frac{1}{2} \right). \quad (4.1)$$

$c_{\ell\sigma}^\dagger$ é o operador de criação no sítio ℓ com projeção de spin σ . O parâmetro t corresponde ao “hopping” entre primeiros vizinhos ℓ, m . A notação $\langle\langle\ell,m\rangle\rangle$ significa que se trata de segundos vizinhos. O “hopping” entre segundos vizinhos é $t^* = i0.5t$. $U > 0$ é a repulsão local entre elétrons no mesmo sítio. A densidade de estados característica do Hamiltoniano de Hubbard sem interação com “hopping” entre primeiros e segundos vizinhos é apresentada na figura 4.1. Foi escolhido $t = 0.25$. A semi-largura de banda é $D = \frac{\sqrt{2}+1}{2} \approx 1.207$. A partir de agora, a semi-largura de banda D será usada como unidade de energia em todos os resultados apresentados.

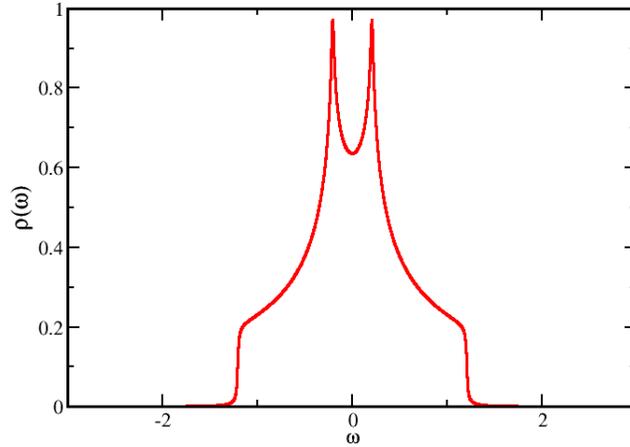


Figura 4.1: Densidade de estados para o Hamiltoniano de Hubbard não interagente com “hopping” entre primeiros e segundo vizinhos ($t = 0.25$ e $t^* = i0.5t$).

Para fazermos a análise da transição de Mott, primeiro devemos identificar o comportamento metálico e o isolante. Nesse caso, lembramos que a densidade de estados local no nível de Fermi está relacionada com $\text{Im}G(\omega \rightarrow 0)$

$$\rho(\omega = 0) = - \frac{\text{Im}G(\omega \rightarrow 0)}{\pi}. \quad (4.2)$$

Quando $\rho(\omega = 0) \sim 0$ as duas bandas de Hubbard encontram-se separadas por um gap de energia, comportamento típico do isolante. Quando $\rho(\omega = 0) \neq 0$ temos um

comportamento típico de um metal.

Na figura 4.2 é apresentado o resultado da parte imaginária da função de Green como função da frequência de Matsubara para diferentes valores de U na vizinhança da transição de Mott para temperatura $T = 0.02D$ e uma rede quadrada com $20 * 20$ sítios.

Valores acima de $U = 2.21D$ apresentam comportamento isolante caracterizado por valores perto de zero na parte imaginária da função de Green da primeira frequência de Matsubara. Entretanto, para valores menores que $U = 2.18D$, temos um comportamento metálico caracterizado por valores significativos da parte imaginária da função de Green na primeira frequência de Matsubara. Assim, na primeira frequência de Matsubara observa-se um salto abrupto no valor da parte imaginária da função de Green. Portanto, vamos usar a primeira frequência de Matsubara para monitorar a transição de Mott. A parte imaginária da função de Green na primeira frequência de Matsubara $\text{Im}G(\omega_1)$ constituirá o parâmetro de ordem da transição.

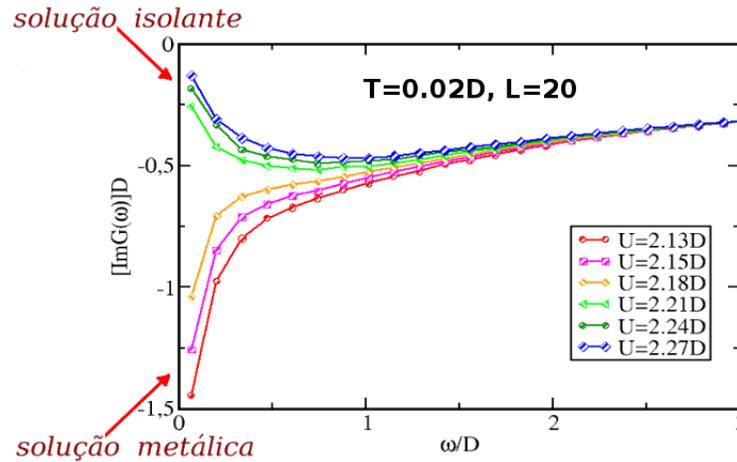


Figura 4.2: $\text{Im}G(\omega)$ como função da frequência de Matsubara para diferentes valores de U na vizinhança da transição de Mott. Observe que na frequência mais baixa ω_1 , temos um salto abrupto na parte imaginária da função de Green $\text{Im}G(\omega_1)$.

Para analisarmos a transição de Mott, supomos que inicialmente o sistema apresenta comportamento como metal ou isolante. Para um valor de interação U_0 encontra-se $G(i\omega_n)$, após ter sido obtida a convergência. Os resultados da $G(i\omega_n)$ para U_0 são usados como palpite inicial para obter a $G(i\omega_n)$ em $U_1 = U_0 + \Delta U$ (indo de metal a

isolante) ou $U_1 = U_0 - \Delta U$ (indo de isolante a metal). O novo resultado para $G(i\omega_n)$ é usado para gerar a $G(\omega_n)$ do seguinte U_2 e assim de maneira consecutiva fazendo uma varredura de valores de U , indo de metal a isolante ou de isolante para metal. Feita a varredura de U é observado um salto abrupto na $\text{Im}G(\omega_1)$ como mostrado na figura 4.2. Vamos chamar de U_{c1} se o salto acontece indo de isolante para metal e U_{c2} se o salto acontece indo de metal para isolante. A diferença de caminhos percorridos indo de metal a isolante e de isolante para metal define curvas de histerese, como as mostradas na figura 4.3. A região que está contida entre U_{c1} e U_{c2} é a região de coexistência.

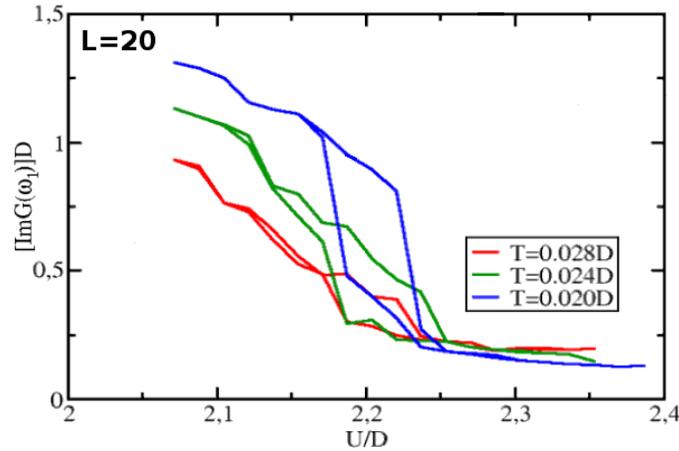


Figura 4.3: Curvas de histerese para diferentes valores de temperatura, abaixo do ponto crítico da transição de Mott. Com o aumento da temperatura as curvas de histerese vão ficando cada vez mas reduzidas.

Na região de coexistência, para um valor de U , é possível encontrar os dois comportamentos, metálico e isolante. Para diferentes valores de temperatura são encontrados os valores U_{c1} e U_{c2} , conhecidos como as linhas espinoisdais, como mostrado no diagrama de fases na figura 4.4. A transição de Mott apresenta uma transição de primeira ordem que culmina num ponto crítico de segunda ordem $T_c = 0.035D$. Veja como à medida que o valor da temperatura aumenta a região de coexistência diminui: e desaparece no ponto crítico da transição.

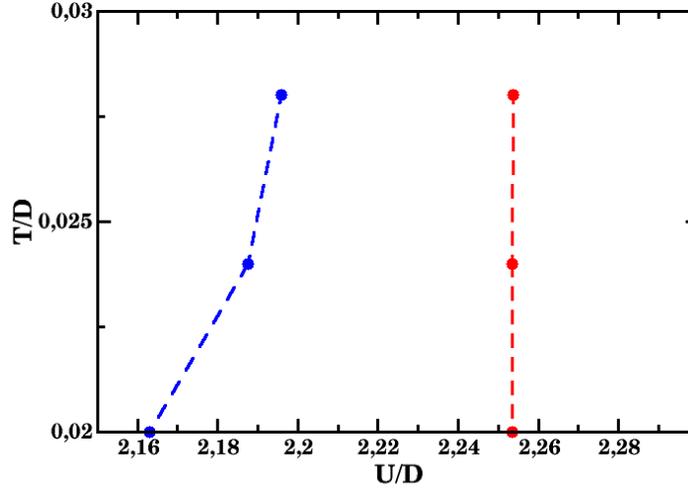


Figura 4.4: Diagrama de fases: As linhas representam as espínodais da transição de Mott. Indo de metal a isolante encontramos a linha vermelha U_{c2} e de isolante a metal a linha azul U_{c1} . A transição de Mott é uma transição de primeira ordem que culmina em um ponto crítico de segunda ordem em $T_c = 0.035D$.

4.3 Transição de Mott no caso desordenado: Resultados

Para fazer a descrição da transição de Mott no caso desordenado usamos o hamiltoniano de Hubbard, para uma rede quadrada

$$H = - \sum_{\langle \ell, m \rangle \sigma} t \left(c_{\ell \sigma}^\dagger c_{m \sigma} + c_{m \sigma}^\dagger c_{\ell \sigma} \right) - \sum_{\langle\langle \ell, m \rangle\rangle \sigma} t^* \left(c_{\ell \sigma}^\dagger c_{m \sigma} - c_{m \sigma}^\dagger c_{\ell \sigma} \right) + \sum_{\ell \sigma} \epsilon_\ell n_{\ell \sigma} + U \sum_{\ell} \left(n_{\ell \uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{\ell \downarrow} - \frac{1}{2} \right), \quad (4.3)$$

As energias diagonais ϵ_ℓ são diferentes para cada sítio da rede e estão distribuídas segundo uma distribuição de probabilidade $P(\epsilon)$ uniforme, cuja largura é dada por W . O valor da desordem usada é $W = 0.52D$. O “hopping” entre segundos vizinhos é $t^* = i0.5t$. Os outros termos do Hamiltoniano têm o mesmo significado como descrito na seção 4.2.

Para monitorar a transição, em analogia com o caso limpo, vamos usar $\text{Im}G_\ell(\omega_1)$, só que agora ela muda de sítio para sítio. É importante garantir que para cada um

dos sítios da rede a convergência é atingida. Gráficos da parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara em cada iteração da auto-consistência, para cada sítio da rede, permitem-nos olhar com mais detalhes a convergência. Na figura 4.5 é apresentado o gráfico de $\text{Im}G_\ell(\omega_1)$ para $T = 0.024D$. Neste caso, 400 linhas representando cada um dos sítios da rede permitem observar os valores alcançados durante o ciclo iterativo e as flutuações dentro das regiões metálica e isolante. Dentro do gráfico menor é mostrado o valor médio da parte imaginária da função de Green $\langle \text{Im}G(\omega) \rangle$. Similarmente, como no caso limpo, o comportamento metálico é indicado por valores finitos bem diferentes de zero e comportamentos isolantes têm valores pequenos perto de zero. Veja que, no caso metálico, os valores para a parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara estão no intervalo $0.52 \leq [\text{Im}G(\omega_1)] D \leq 0.65$, enquanto que, no caso isolante, $0.22 \leq [\text{Im}G(\omega_1)] D \leq 0.31$.

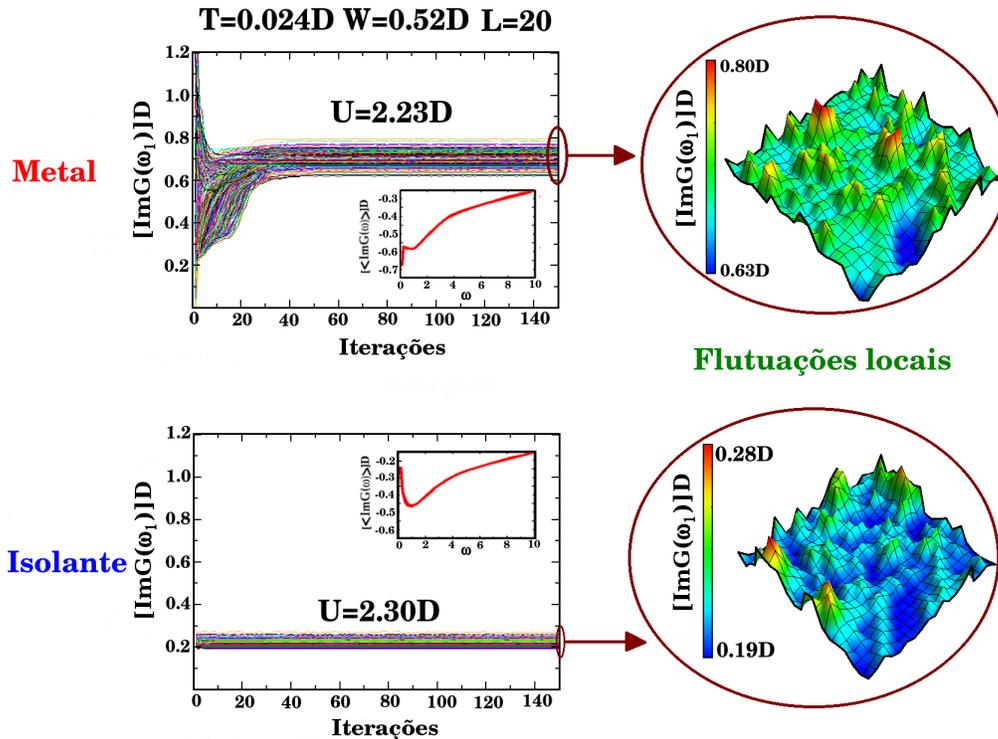


Figura 4.5: Comportamento metálico e isolante no caso desordenado. Observe como cada sítio da rede apresenta um comportamento diferente.

Seguindo o mesmo procedimento do caso limpo, descrito na seção 4.2, curvas de histerese foram encontradas no caso em que temos desordem, para valores diferentes de temperatura. Na figura 4.6 estão os resultados das curvas de histerese juntamente com aquelas obtidas no caso limpo. Veja como a adição de desordem faz com que as curvas de histerese sejam deslocadas para valores de interação maior e que a região de coexistência diminui.

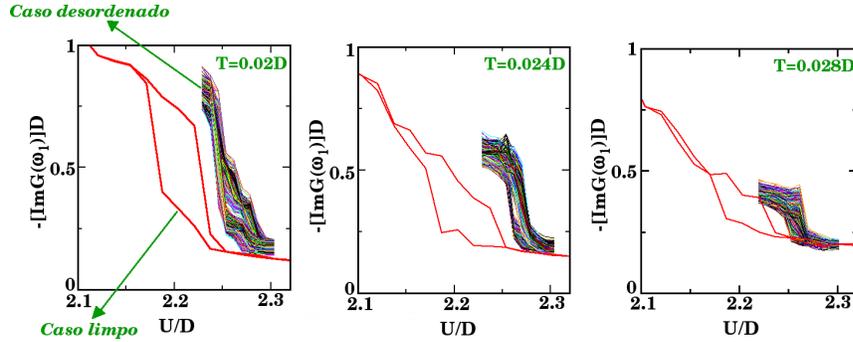


Figura 4.6: Curvas de histerese para três valores diferentes de temperatura. Observe como a desordem faz com que as curvas sejam deslocadas para valores de interação maiores e que a região de coexistência diminui.

Vamos fixar agora a atenção nas vizinhanças da transição de Mott. Para cada valor de U em uma varredura de valores em que $\Delta U = 0.008D$, é feito um mapeamento espacial da parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara. Na figura 4.7 apresenta-se o resultado da parte imaginária da função de Green para a primeira frequência de Matsubara para $T = 0.024D$. A escala de cores está organizada de modo que o maior valor de $\text{Im}G(\omega_1)$ corresponde à cor vermelha e o menor valor à cor azul. À medida que aumenta o valor da interação local entre os elétrons, o sistema, que inicialmente era um metal com grande homogeneidade espacial, começa a exibir “bolhas” correspondentes a regiões isolantes, que vão aumentando de tamanho até dominar todo o sistema, que ao final se torna um isolante bastante homogêneo. De maneira similar, começando com valores de interação local alta entre os elétrons observa-se que, à medida que o valor da interação local diminui, “bolhas” metálicas começam a aparecer até tornar metálica a rede, como mostrado na figura 4.8. Uma análise similar é feita para outros valores de temperatura como $T = 0.02D$, e $T = 0.028D$, mostrados nas figuras 4.9 a 4.12.

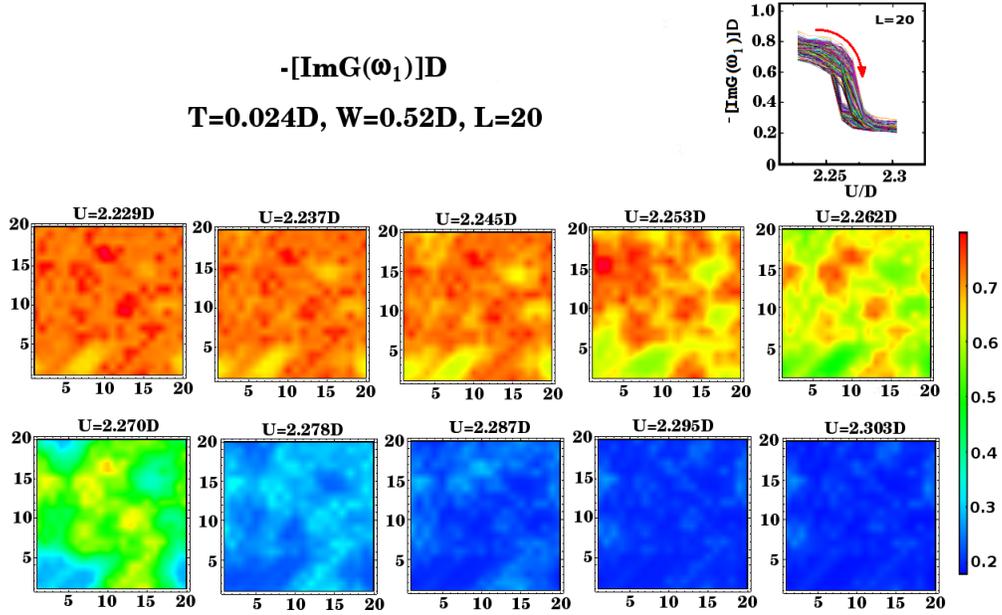


Figura 4.7: Parte imaginária da função de Green na primeira frequência de Matsu-
bara para cada sítio da rede para $T = 0.024D$ e uma varredura de valores de U na
vizinhança da transição de Mott.

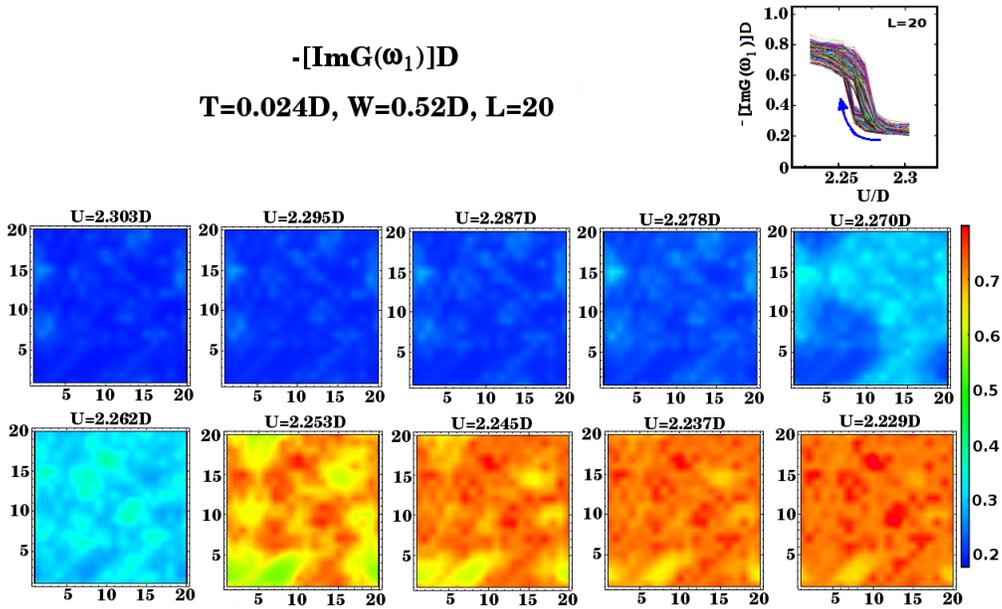


Figura 4.8: Parte imaginária da função de Green na primeira frequência de Matsu-
bara para cada sítio da rede para $T = 0.024D$ e uma varredura de valores de U na
vizinhança da transição de Mott.

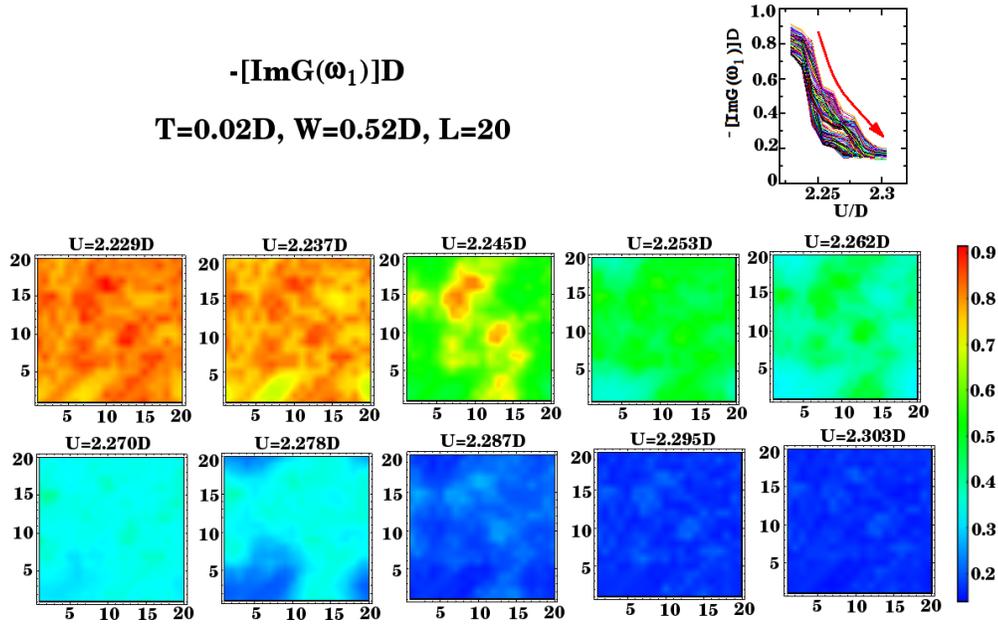


Figura 4.9: Parte imaginária da função de Green na primeira frequência de Matsubara para cada sítio da rede para $T = 0.02D$ e uma varredura de valores de U na vizinhança da transição de Mott.

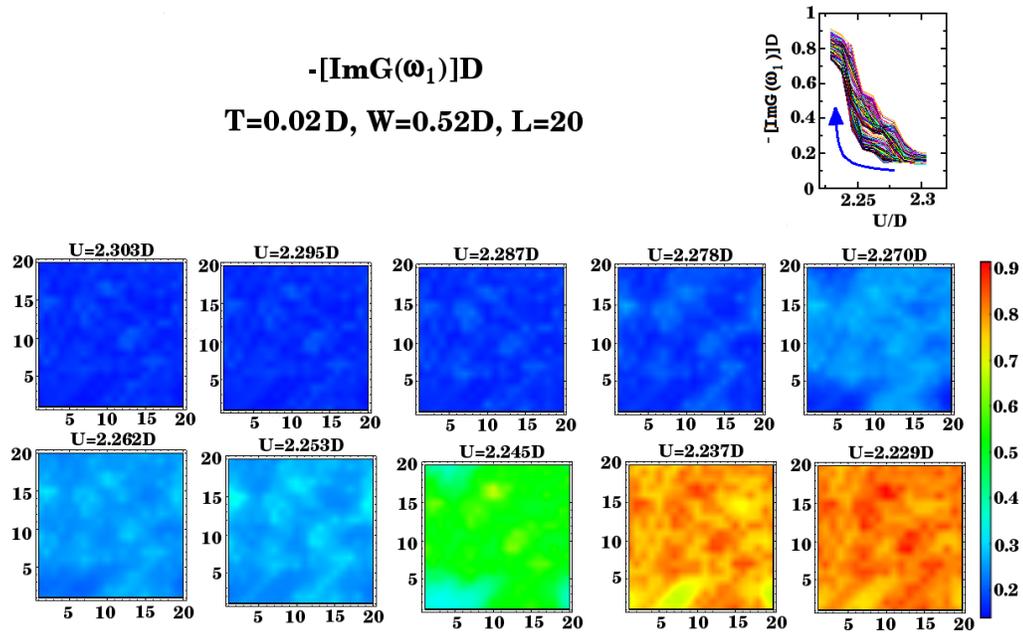


Figura 4.10: Parte imaginária da função de Green na primeira frequência de Matsubara para cada sítio da rede para $T = 0.02D$ e uma varredura de valores de U na vizinhança da transição de Mott.

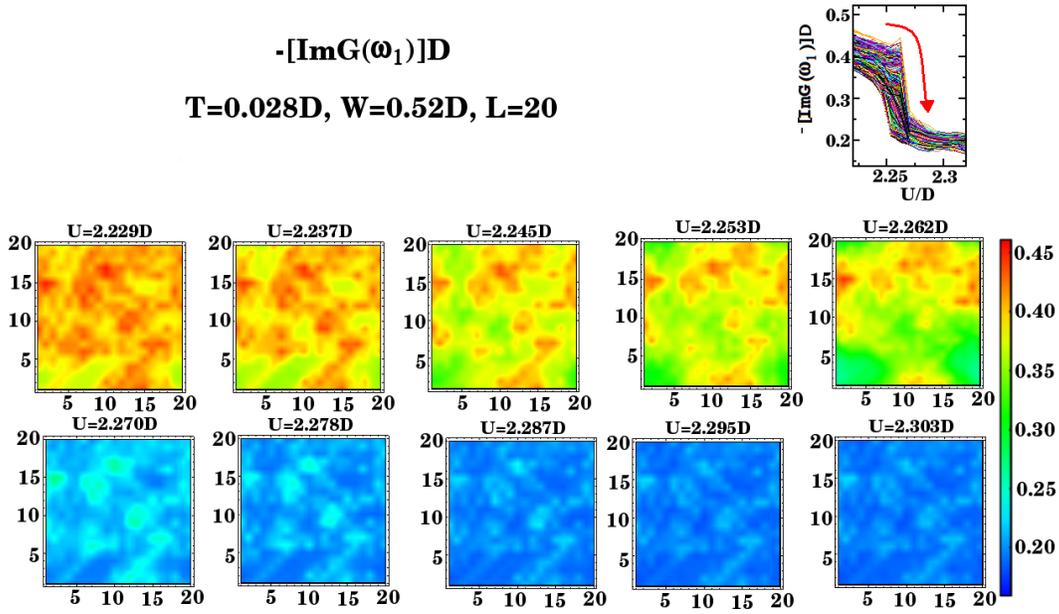


Figura 4.11: Parte imaginária da função de Green na primeira frequência de Matsubara para cada sítio da rede para $T = 0.028D$ e uma varredura de valores de U na vizinhança da transição de Mott.

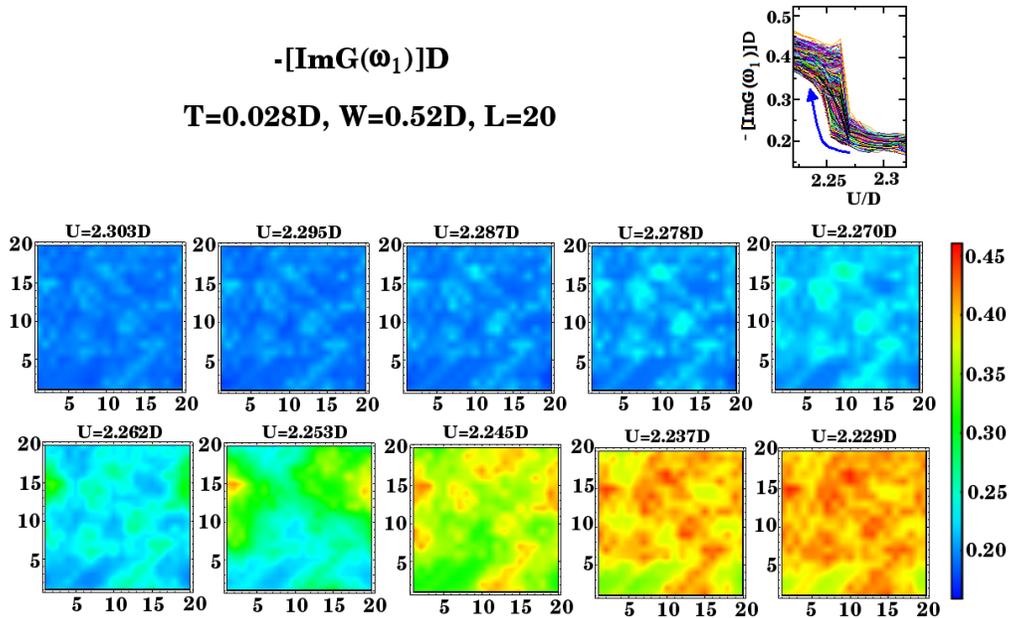


Figura 4.12: Parte imaginária da função de Green na primeira frequência de Matsubara para cada sítio da rede para $T = 0.028D$ e uma varredura de valores de U na vizinhança da transição de Mott.

4.4 Conclusões

Usando DMFT, no caso limpo, e StatDMFT, no caso desordenado, foi possível analisar a transição de Mott para uma rede quadrada com “hopping” entre primeiros e segundos vizinhos. Começando com um sistema inicialmente metálico ou isolante, foi possível observar as curvas de histerese para diferentes valores de temperatura ao fazer uma varredura nos valores de U , simulando um caminho contínuo para a transição de Mott. As linhas espinoidais que definem a região de coexistência limpa foram encontradas. No caso limpo, foi determinado o diagrama de fases $T \times U$, sendo que a transição é uma transição de primeira ordem que culmina em um ponto crítico de segunda ordem. Como efeito da adição da desordem, as curvas de histerese se deslocam para valores de interação maior. Vale a pena lembrar que no caso desordenado cada sítio da rede tem a sua própria curva de histerese. Como resultado do mapeamento espacial da transição de Mott para os diferentes valores de temperatura, foi possível observar o crescimento das bolhas isolantes dentro da região metálica e vice-versa.

Capítulo 5

Comportamento crítico da transição de Mott

5.1 Introdução

ESTUDOS teóricos e experimentais parecem indicar que a transição de Mott pertence à mesma classe de universalidade da transição líquido-gás e do modelo de Ising [55, 2]. Nesse caso, uma análise sobre os efeitos da desordem diagonal estudada nessa tese leva-nos a concluir que o comportamento crítico do caso desordenado é análogo ao do modelo de Ising num campo magnético aleatório. O campo aleatório modifica o comportamento crítico da transição de Ising. Em particular, em duas dimensões, $T_c(W \neq 0) \rightarrow 0$, isto é, a transição em temperatura finita é destruída por qualquer desordem, por menor que ela seja. Esse resultado foi primeiramente discutido por Imry e Ma [38] e posteriormente generalizado por Aizenman e Wehr [39]. A analogia acima nos leva então a concluir que a transição de Mott a temperaturas finitas também seria destruída pela desordem em duas dimensões. Vamos, portanto, nesse capítulo analisar o comportamento crítico da transição de Mott em duas dimensões à luz da descrição da StatDMFT. Na seção 5.2 vamos discutir a classe de universalidade da transição de Mott. Na seção 5.3, vamos analisar o efeito do campo aleatório no comportamento crítico do modelo de Ising e expor o conteúdo dos resultados de Imry e Ma. Na seção 5.4, vamos construir a analogia entre o modelo de Ising

no campo aleatório e a transição de Mott desordenada. Na seção 5.5 são apresentados alguns resultados para as flutuações do parâmetro de ordem e sua correlação com flutuações da desordem. Estes foram obtidos no intuito de verificar se há analogia entre o modelo de Hubbard desordenado e os resultados do teorema de Imry e Ma para o caso do modelo de Ising num campo aleatório. Na seção 5.6 estudamos os efeitos de tamanho finito na transição de Mott e verificamos a sua compatibilidade com um valor nulo de T_c no limite termodinâmico.

5.2 Classe de universalidade da transição Metal-Isolante

Como já discutido anteriormente, pode-se tomar como o parâmetro de ordem para a transição de Mott a parte imaginária da função de Green local na primeira frequência de Matsubara $\text{Im}G(\omega_1)$. Além disso, tanto experimentalmente quando na descrição da DMFT, a transição de Mott limpa é uma transição de primeira ordem que culmina num ponto crítico de segunda ordem. A classe de universalidade desse ponto crítico é definida por seus expoentes críticos, ou seja, pelos expoentes que governam as singularidades de várias quantidades físicas à medida que se aproxima da temperatura crítica. Portanto, é do nosso interesse conhecer que expoentes críticos estão envolvidos na transição de Mott.

Do ponto de vista teórico e dentro da descrição da DMFT, essa análise foi feita na referência [55], que analisou o comportamento crítico de $\text{Im}G(i\omega_n)$ do ponto de vista da teoria de Landau das transições de fase de segunda ordem. Foi mostrado que esse é governado por um funcional de Landau idêntico ao do modelo de Ising. É claro que, em se tratando de uma teoria de campo médio, a DMFT fornece necessariamente expoentes de campo médio. Entretanto, espera-se que expoentes não triviais sejam observados em sistemas reais na região crítica.

Posteriormente, em [2], Limelette e colaboradores obtiveram alguns resultados experimentais que permitiram obter experimentalmente os expoentes críticos da transição de Mott para o óxido de vanádio dopado com cromo. Como exemplo, como mostrado na figura 5.1, pode-se analisar a diferença entre a condutividade e o seu valor no ponto crítico $\sigma - \sigma_c$ como função da temperatura reduzida $\Delta T/T_c$.

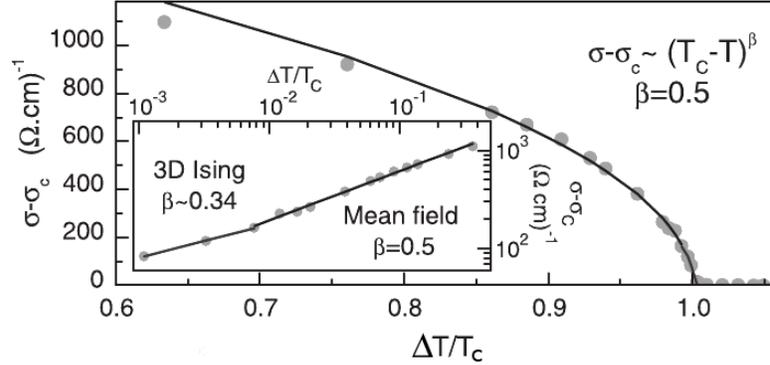


Figura 5.1: Condutividade como função da variação da temperatura. A condutividade $\sigma - \sigma_c$ decresce com o incremento da temperatura reduzida $\Delta T/T_c$. Ao fazer um ajuste na escala log-log encontram-se os expoentes relacionados com a transição. Observe como longe da região crítica o comportamento pode ser descrito por uma teoria de campo médio, com $\beta = 0.5$, enquanto que na região crítica da transição o expoente associado é $\beta \sim 0.34$, característico da transição de Ising em $3D$ [2].

A condutividade decresce com o incremento de $\Delta T/T_c$. Ao fazer um ajuste na escala log-log encontram-se os expoentes relacionados com a transição. Observe como, longe da região crítica, o comportamento pode ser descrito por uma teoria de campo médio, com $\beta = 0.5$. Entretanto, dentro da região crítica da transição o expoente associado é $\beta \sim 0.34$, característico da transição de Ising em $3D$. Portanto, esses resultados podem ser tomados com uma comprovação experimental de que a transição de Mott apresenta a mesma classe de universalidade do modelo de Ising.

5.3 Modelo de Ising: comportamento crítico em duas dimensões

Vamos agora analisar o efeito de um campo aleatório na transição do modelo de Ising. Consideremos primeiramente o caso limpo, descrito pelo Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (5.1)$$

onde σ_i assume os valores $+1$ ou -1 , a soma $\langle ij \rangle$ é tomada sobre pares de primeiros vizinhos, J é a constante de acoplamento (constante de troca) e h é o campo externo. A

transição descrita pelo modelo de Ising é uma transição ferromagnética. Para $h = 0$, o sistema é paramagnético acima de uma temperatura crítica T_c . Em T_c , o sistema apresenta uma transição de segunda ordem (contínua) para um estado ferromagnético, que é observado para $T < T_c$.

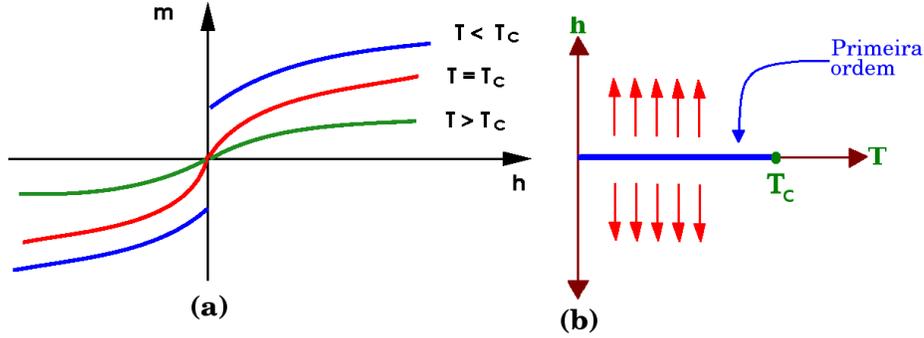


Figura 5.2: (a) Magnetização no modelo de Ising como função do campo externo. (b) Diagrama de fases do modelo de Ising no plano $h \times T$, mostrando a linha de transições de primeira ordem em $h = 0$ e $T < T_c$, que termina no ponto crítico em $h = h_c = 0$ e $T = T_c$.

O campo externo $h \neq 0$ provoca o alinhamento dos spins e uma magnetização não nula, sendo $\langle \sigma_i \rangle > 0$ se $h > 0$ e $\langle \sigma_i \rangle < 0$ se $h < 0$. Para uma temperatura fixa $T < T_c$ e como função de h a magnetização apresenta um salto abrupto em $h = 0$, como mostrado na figura 5.2(a). Esse salto vai a zero quando $T \rightarrow T_c$. O diagrama de fases resultante, portanto, tem uma linha de transições de fase de primeira ordem em $h = 0$ e $T < T_c$, que termina num ponto crítico de segunda ordem em $h = h_c = 0$ e $T = T_c$, como mostrado na figura 5.2(b).

5.3.1 Modelo de Ising com campo externo aleatório e teorema de Imry e Ma

O que acontece se o campo externo não for uniforme? Nesse caso, o hamiltoniano para o modelo de Ising pode ser escrito como

$$H = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i, \quad (5.2)$$

onde h_i são variáveis aleatórias independentes com uma distribuição de probabilidade em princípio genérica $P(h)$. O sistema, nesse caso, apresentará estados nos quais a magnetização média é diferente de zero em regiões de tamanho finito. Se em uma dada região R o valor médio do campo magnético $\langle h \rangle > 0$, a orientação da magnetização nessa região será positiva, $\langle m \rangle > 0$. Se $\langle h \rangle < 0$, a magnetização será negativa, $\langle m \rangle < 0$. Isso está mostrado esquematicamente na figura 5.3. Separando uma região de magnetização positiva de outra com magnetização negativa temos uma parede de domínio.

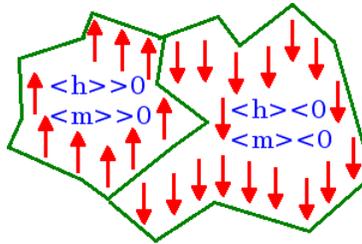


Figura 5.3: Quando o campo é aleatório, temos a formação de regiões com magnetizações para cima ou para baixo. Se $\langle h \rangle > 0$, a magnetização $\langle m \rangle > 0$. Se $\langle h \rangle < 0$, a magnetização $\langle m \rangle < 0$. Entre as duas regiões há uma parede de domínio.

Imry e Ma desenvolveram um argumento genérico para analisar o efeito da desordem na estabilidade da fase ferromagnética. Para isso, considere o custo energético para a formação de uma região R de tamanho linear L com $\sigma_i = +1$ ($i \in R$) e $\langle h \rangle_R > 0$ num estado ferromagnético com $\sigma_i = -1$ ($i \notin R$). O ganho de energia é dado por $\Delta E_{ORD} = - \sum_{(i \in R)} h_i$. Se os h_i são variáveis independentes $\sum_i h_i \sim WL^{d/2}$, pelo teorema central do limite, onde W é a largura da distribuição $P(h)$ e d é a dimensão do sistema. Haverá um custo energético a ser pago pela formação da parede de domínio entre a região R e o resto do sistema que é de $\Delta E_{PAREDE} \sim JL^{d-1}$, dado pela área da superfície da região R .

Se $\Delta E_{ORD} < \Delta E_{PAR}$ para qualquer L , a fase ferromagnética é estável. Entretanto, se $d - 1 < \frac{d}{2} \implies d < 2$, $\Delta E_{ORD} > \Delta E_{PAR}$ para L suficientemente grande. Nesse caso, há uma proliferação de regiões com magnetizações opostas, e na média do sistema como um todo $\langle m \rangle = 0$. Nesse caso, não há transição de fase, não temos curvas de histerese e nem temos região de coexistência. No caso em que $d > 2$, a temperatura

crítica é diferente de zero $T_c \neq 0$ para desordem fraca. Este resultado constitui o teorema de Imry e Ma [38]. Ainda falta saber o que acontece quando $d = 2$. Neste caso, como mostrado por Aizenman e Wehr [39], o estado ferromagnético é destruído por qualquer desordem infinitesimal.

5.4 Teorema do Imry e Ma generalizado para o modelo de Hubbard

Seja o hamiltoniano de Hubbard no caso limpo com o termo de potencial químico μ

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) - \sum_{i\sigma} \mu n_{i\sigma} \quad (5.3)$$

Para valores da interação local $U > U_c$ o sistema apresenta comportamento isolante para valores do número de ocupação médio $\langle n \rangle = 1$. Para valores de $\langle n \rangle \neq 1$, o sistema é metálico. O diagrama de fases da transição corresponde a uma transição de primeira ordem em $n = 1$ que culmina em um ponto crítico de segunda ordem em T_c , como apresentado na figura 5.4. Nessa figura também se vê a dependência de n com o potencial químico μ para $T = 0$. Note que há um platô em $n = 1$. A presença do gap de Mott torna o sistema incompressível ($dn/d\mu = 0$).

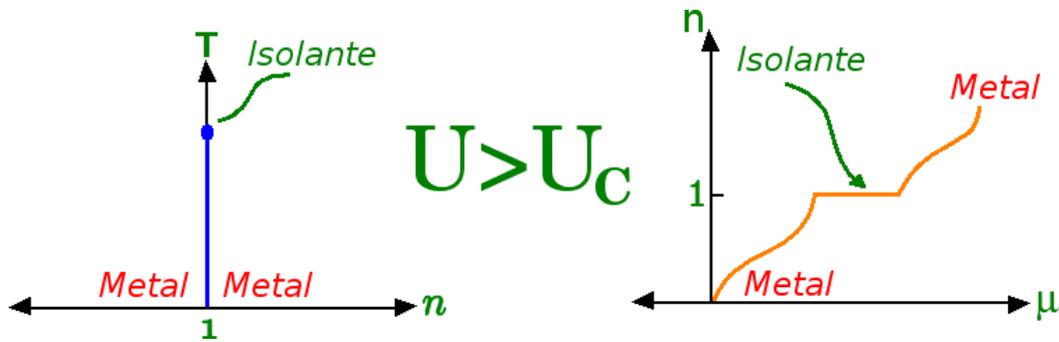


Figura 5.4: Diagrama de fases $T \times n$ para a transição de Mott e número de ocupação como função de potencial químico em $T = 0$ no modelo de Hubbard.

Com base no comportamento acima, fica claro que a desordem diagonal $\sum_{i\sigma} \epsilon_i n_{i\sigma}$ age como um potencial químico “local”, dopando o isolante e tornando-o metálico em uma

dada região para valores suficientemente grandes de $|\epsilon_i|$. Por um raciocínio análogo ao do modelo de Ising com campo aleatório, se as flutuações de $|\epsilon_i|$ são suficientemente grandes numa região R , o isolante é instável com relação à formação de uma região metálica. Se N é o número de sítios dentro da região, então a flutuação é dada por

$$\Delta\epsilon = \sqrt{\frac{\sum_i \epsilon_i^2}{N-1}} \begin{cases} \lesssim \Delta\epsilon_c & \text{Permanece Isolante,} \\ \gtrsim \Delta\epsilon_c & \text{Metalização local,} \end{cases} \quad (5.4)$$

onde $\Delta\epsilon_c \sim U$ quando $T = 0$. Portanto, a região permanece isolante se o valor da flutuação for menor que um valor crítico, a partir do qual temos metalização local. Isso é análogo ao efeito do campo aleatório no modelo de Ising. Portanto, as mesmas considerações feitas anteriormente nos levam a concluir que a desordem destrói a transição Metal-Isolante em duas dimensões no limite termodinâmico, porque o sistema quebra-se em várias regiões metálicas e isolantes. Essa é a generalização do teorema de Imry e Ma para a transição de Mott.

5.5 Correlação entre as flutuações da desordem e o parâmetro de ordem da transição de Mott

Vamos agora analisar nossos resultados à luz das considerações acima. Na figura 5.5 mostramos o padrão espacial do nosso parâmetro de ordem $\text{Im}G(i\omega_1)$ para quatro realizações de desordem diferentes e $W = 0.52D$, $U = 2.27D$ e $T = 0.024D$. A variação para cada uma das realizações de desordem está entre $0.20 < [\text{Im}G(\omega_1)]D < 0.57$. A cor vermelha representa as regiões com maior contribuição metálica e regiões azuis representam o isolante. Por conveniência, vamos definir arbitrariamente a região metálica como aquela em que é satisfeita a condição $[\text{Im}G(\omega_1)]D > 0.45$. Regiões isolantes são definidas como aquelas em que $[\text{Im}G(\omega_1)]D < 0.27$. Em cada uma destas regiões encontramos a flutuação local relativa da desordem $\Delta\epsilon/\Delta\epsilon_{distr}$ onde definimos

$$\bar{\epsilon} = 0 \text{ e } \Delta\epsilon = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N \epsilon_i^2}{N-1}} \text{ e o desvio padrão da distribuição é } \Delta\epsilon_{distr} = \sqrt{\frac{W^2}{12}} = 0.15D.$$

Na tabela 5.1 é apresentado o resultado de $\Delta\epsilon/\Delta\epsilon_{distr}$ para cada uma das regiões. Se $0.20 \leq [\text{Im}G(\omega_1)]D \leq 0.27$ os valores de $\Delta\epsilon/\Delta\epsilon_{distr}$ são 0.79, 0.75, 0.81, 0.73, todos

menores do que 1. Os valores de $\Delta\epsilon/\Delta\epsilon_{distr}$ obtidos para $0.45 < [\text{Im}G(\omega_1)]D < 0.57$ foram 1.28, 1.36, 1.33, 1.30, todos maiores do que 1. Em concordância com a análise da seção 5.4, há uma forte correlação entre valores pequenos (grandes) de $\Delta\epsilon$ e um comportamento isolante (metálico). Também percebe-se que $\Delta\epsilon_c \simeq \Delta\epsilon_{distr}$.

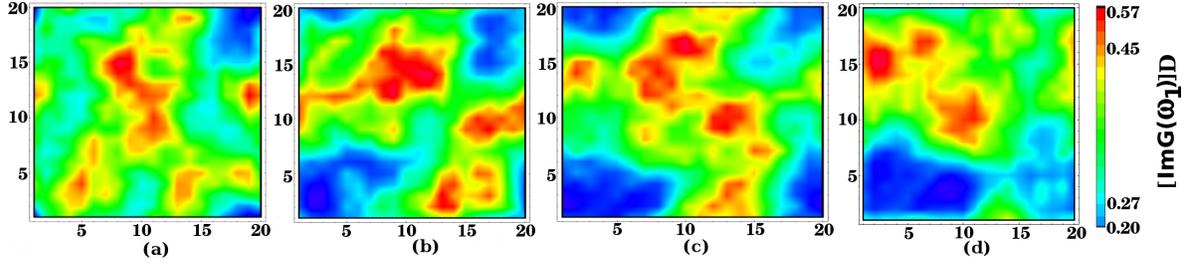


Figura 5.5: Para 4 diferentes realizações de desordem, mostramos $\text{Im}G(\omega_1)$ através de uma escala de cor. A cor vermelha representa os sítios da rede que tem um caráter metálico. O comportamento isolante corresponde a regiões azuis. Utilizamos $W = 0.52D$, $U = 2.27D$ e $T = 0.024D$.

| | Isolante | R. Intermediária | Metal |
|--|---|---|---|
| Intervalos | $0.20 \leq [\text{Im}G(\omega_1)]D \leq 0.27$ | $0.27 < [\text{Im}G(\omega_1)]D < 0.45$ | $0.45 \leq [\text{Im}G(\omega_1)]D \leq 0.57$ |
| Realização 1 $\Delta\epsilon/\Delta\epsilon_{distr}$ | 0.79 | 0.88 | 1.28 |
| Número de sítios | 7 | 273 | 120 |
| Realização 2 $\Delta\epsilon/\Delta\epsilon_{distr}$ | 0.75 | 0.93 | 1.36 |
| Número de sítios | 75 | 262 | 63 |
| Realização 3 $\Delta\epsilon/\Delta\epsilon_{distr}$ | 0.81 | 0.90 | 1.33 |
| Número de sítios | 74 | 264 | 62 |
| Realização 4 $\Delta\epsilon/\Delta\epsilon_{distr}$ | 0.73 | 0.93 | 1.30 |
| Número de sítios | 76 | 264 | 60 |

Table 5.1: Flutuações de $\Delta\epsilon$ para as regiões isolante, metálica e intermediária, correspondentes às realizações de desordem da figura 5.5.

5.6 Efeitos de tamanho finito

O nosso estudo da transição de Mott até agora tem sido feito com um valor fixo do tamanho da rede. Segundo a análise da seção 5.4, a transição de Mott é instável em $d = 2$ no limite termodinâmico, pois há a proliferação de regiões metálicas e isolantes quando $L \rightarrow \infty$. Vamos agora estudar como nossos resultados se modificam à medida

que L varia.

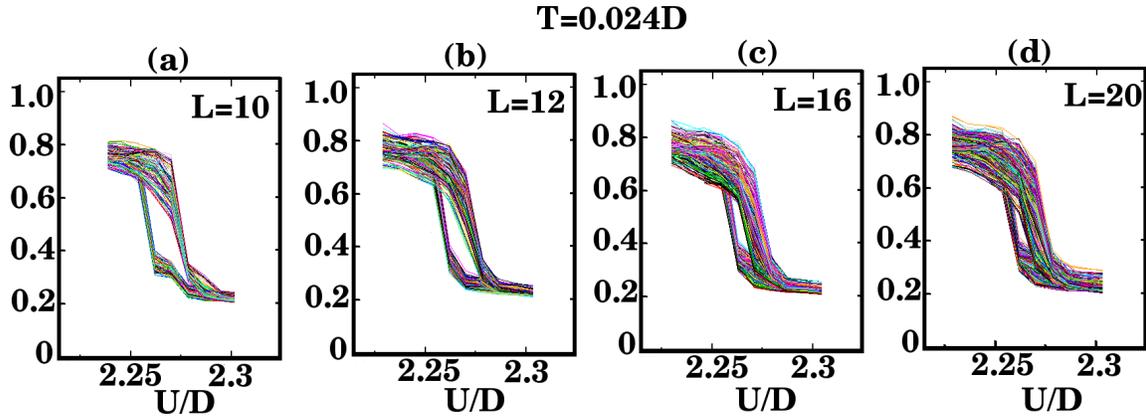


Figura 5.6: Efeitos de tamanho finito: $\text{Im}G(i\omega_1)$ para os sítios da rede à medida que aumentamos L . Ao aumentar o tamanho da rede observamos como a região de coexistência vai ficando cada vez menor. Espera-se que ela desapareça no limite termodinâmico.

Na figura 5.6 é apresentado um conjunto de curvas de histerese para diferentes tamanhos de rede, para $T = 0.024D$ e $W = 0.53D$. Observa-se que o intervalo de valores de U/D em que acontece a transição de Mott é o mesmo, independentemente do tamanho da rede, assim como os valores de $[-\text{Im}G(\omega_1)]D$ permanecem entre 0.2 e 0.8. Veja que no caso em que temos uma rede quadrada de 10×10 sítios, como mostrado na figura 5.6, aparece uma ampla região de coexistência, que vai se tornando cada vez menor à medida que o tamanho da rede é incrementado. Esse comportamento parece compatível com a análise da seção 5.4: a transição de Mott de primeira ordem torna-se uma transição “arredondada” (“rounded”) à medida que $L \rightarrow \infty$, em conformidade com o teorema de Imry e Ma generalizado para o modelo de Hubbard desordenado. Infelizmente, é computacionalmente muito difícil obter resultados para $L > 20$.

Agora fixamos a atenção num determinado valor de interação Coulombiana $U = 2.27D$ e analisamos o padrão espacial de $\text{Im}G(i\omega_1)$, como mostrado na figura 5.7, para vários valores de temperatura. Para crescer o sistema, mantivemos a mesma realização de desordem para valores baixos de L e fomos acrescentando novos sítios nas bordas, distribuídos com o mesmo valor de W . Veja como à medida que o tamanho da rede é incrementado, regiões metálicas persistem nas mesmas posições, mas observa-se também o aparecimento de bolhas isolantes. Espera-se, como descrito na seção 5.4,

que no limite termodinâmico tenhamos a proliferação de regiões metálicas e isolantes.

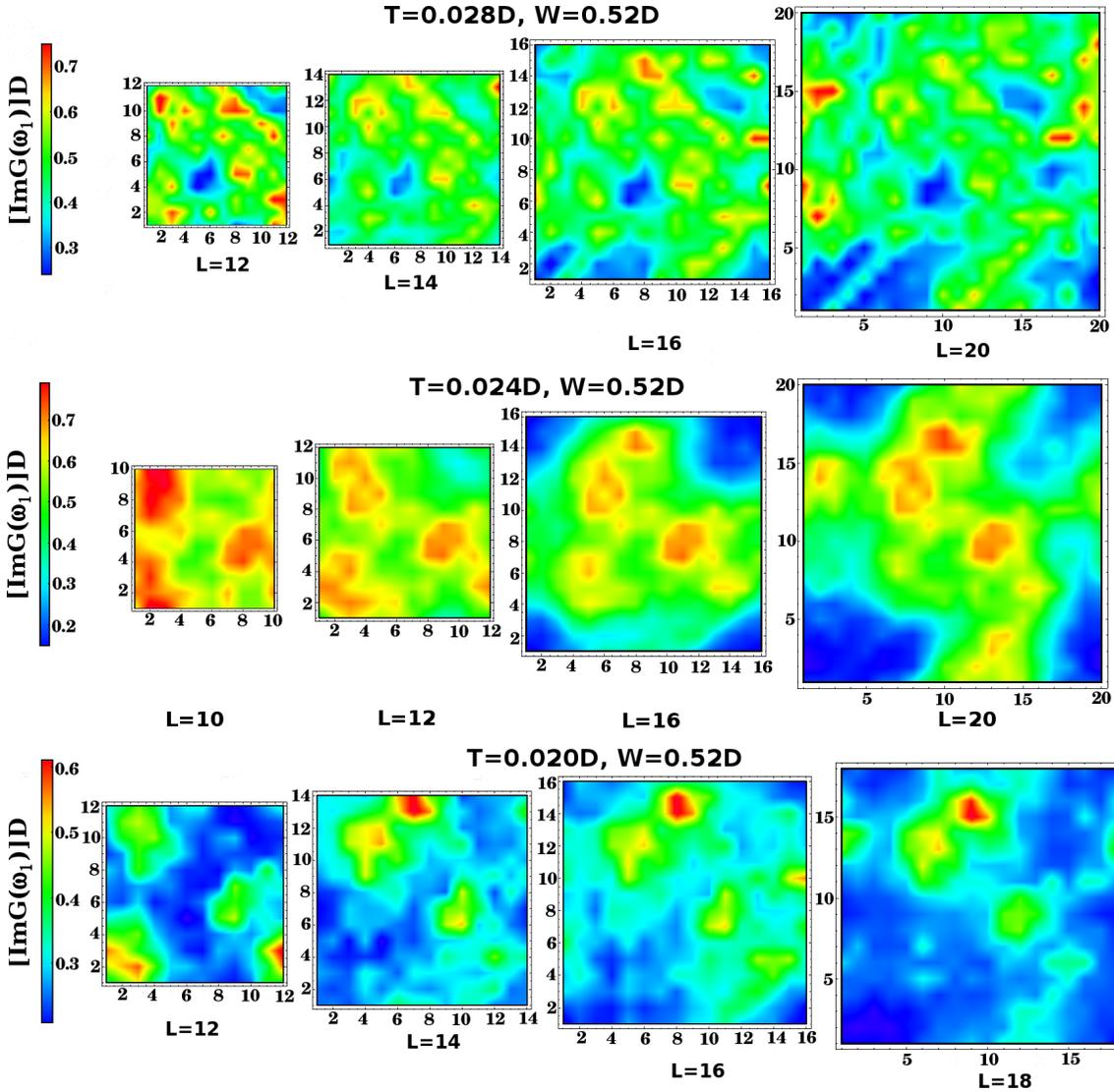


Figura 5.7: Efeitos de tamanho finito: quando observamos o padrão espacial de $\text{Im}G(i\omega_1)$, vemos que à medida que aumentamos o tamanho da rede, bolhas metálicas e isolantes se proliferam.

5.7 Conclusões

Estendemos as conclusões do teorema de Imry e Ma para a transição de Mott desordenada em $d = 2$. Segundo a análise, a transição de Mott é destruída pela adição de

desordem. Verificamos que, de acordo com o esperado, pequenos (grandes) valores das flutuações das energias orbitais $\Delta\epsilon$ correlacionam-se fortemente com a tendência isolante (metálica). Além disso, à medida que o sistema cresce, observamos a diminuição da histerese, compatível com o “arredondamento” (“rounding”) da transição causado pela desordem, no limite termodinâmico. Através da análise da distribuição espacial de $\text{Im}G(i\omega_1)$, podemos também notar o aparecimento tanto de regiões metálicas quanto de regiões isolantes. A proliferação dos dois tipos de regiões é responsável pela destruição da transição quando $L \rightarrow \infty$.

Capítulo 6

Transporte

6.1 Introdução

EMBORA a parte imaginária da função de Green $\text{Im}G(i\omega_1)$ sirva como parâmetro de ordem da transição de Mott, como vimos, seria importante ser capaz de calcular diretamente propriedades de transporte dentro da StatDMFT. Isso é possível dentro do formalismo de Landauer [56] a $T = 0$, através do cálculo da matriz de transmissão entre as bordas do sistema. Esse formalismo, no entanto, não tem uma extensão exata para $T \neq 0$. Entretanto, quando o transporte ocorre sem coerência quântica em nenhuma escala de comprimento, devido ao forte espalhamento inelástico, é possível fazer uma descrição clássica da resistividade. Vamos mostrar que, nas temperaturas e interações em que trabalhamos, o transporte é completamente incoerente e utilizaremos uma rede de resistores clássicos para calcular os valores relativos de resistência do sistema. Essa é a primeira tentativa de cálculo de transporte dentro da StatDMFT.

6.2 Transporte incoerente

Vamos agora revisar alguns conceitos básicos da teoria de transporte. Da teoria de muitos corpos, existe uma relação entre o valor da auto-energia em frequência nula e vetor de onda na superfície de Fermi e a meia vida inelástica da partícula [57]

$$\text{Im}\Sigma(|\vec{k}| \sim k_F, \omega \simeq 0) \sim \frac{1}{\tau_{in}(\vec{k})}. \quad (6.1)$$

Se $\tau_{in}(\vec{k})$ é aproximadamente isotrópico $\tau_{in}(\vec{k}) \rightarrow \tau_{in}$, a fórmula de Kubo nos fornece a condutividade e, portanto, a resistividade como sendo

$$\rho \sim \frac{1}{\tau_{in}} \propto \text{Im}\Sigma(|\vec{k}| \sim k_F, \omega \simeq 0). \quad (6.2)$$

De fato, da formula de Drude, temos que

$$\rho = \frac{m}{ne^2\tau}, \quad (6.3)$$

em concordância com a equação (6.2) se o transporte é dominado completamente por processos inelásticos. Nesse caso, definimos o livre caminho médio inelástico como sendo

$$l_{in} = v_F\tau_{in}, \quad (6.4)$$

onde v_F é a velocidade de Fermi. Para $l \gtrsim l_{in}$ o transporte é incoerente pois espalhamentos inelásticos apagam a “memória” da fase quântica da onda do elétron. Nessas escalas, podemos descrever o transporte classicamente. Podemos estimar a velocidade de Fermi por $v_F \sim \frac{E_F}{k_F}$ onde E_F é a energia de Fermi. No modelo de Hubbard, E_F pode ser tomada como a meia largura de banda D no caso de semi-preenchimento. Finalmente, usando que $k_F \sim \frac{1}{a}$ onde a é o parâmetro de rede temos $v_F \sim aD$. Sendo assim, de (6.2) e (6.4)

$$l_{in} = v_F\tau_{in} = \frac{aD}{\text{Im}\Sigma} \Rightarrow \frac{l_{in}}{a} = \frac{D}{\text{Im}\Sigma} \quad (6.5)$$

Podemos agora analisar localmente a quantidade $\frac{\text{Im}\Sigma}{D}$ através da StatDMFT. A menor frequência que se pode usar neste caso é a primeira frequência de Matsubara. Assim, usamos $\Sigma_i(i\omega_1)$ como uma estimativa de $\Sigma_i(\omega \rightarrow 0)$. Na figura 6.1, apresenta-se o valor $\frac{\text{Im}\Sigma(i\omega_1)}{D}$, sendo $T = 0.024D$ e $W = 0.52D$, para cada sítio da rede e valor de interação U , nas vizinhanças da transição de Mott. Observe que $0.98 \leq \frac{\text{Im}\Sigma(\omega_1)}{D} \leq 5.09$

. Portanto $0.2 \lesssim \frac{D}{\text{Im}\Sigma(\omega_1)} \lesssim 1$, ou seja, $0.2 \lesssim \frac{l_{in}}{a} \lesssim 1$. Assim, $l_{in} \lesssim a$. Portanto, podemos descrever o transporte classicamente em todas as escalas. Na próxima seção, construiremos uma rede de resistores clássicos para calcular as propriedades de transporte do sistema.

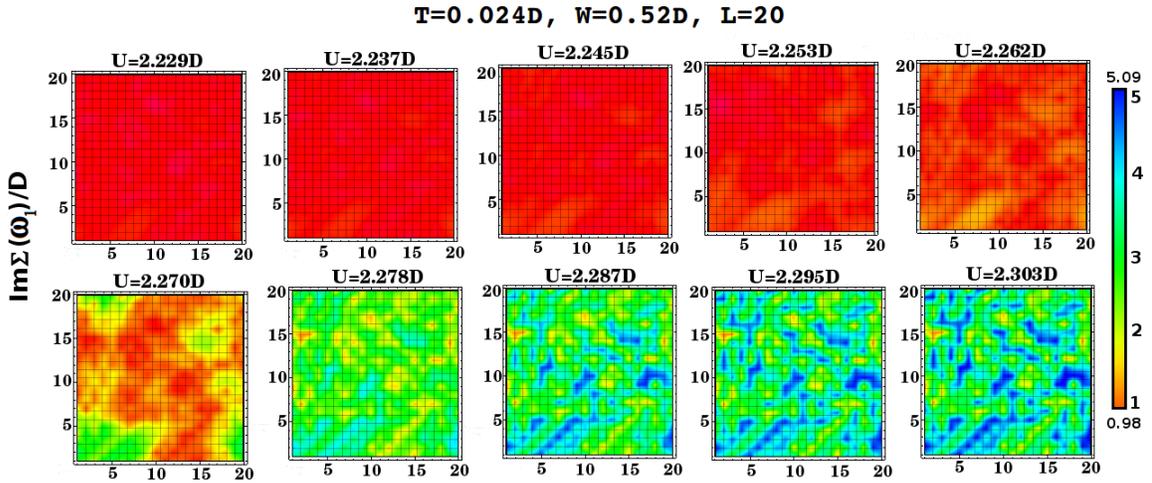


Figura 6.1: Parte imaginária da auto-energia para a primeira frequência de Matsubara, para $T = 0.024D$.

6.3 Rede de resistores

Vamos agora descrever como podemos substituir o sistema de elétrons interagentes por uma rede de resistores clássicos. Primeiramente, cada sítio da rede original tem associado um valor da resistividade local $\rho_i = \text{Im}\Sigma_i(\omega_1) \sim 1/\tau_{in}(i)$. Dados dois sítios vizinhos i e j , associamos um resistor à ligação entre eles cuja resistência é a média das resistividades de i e j : $R_{ij} = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j)$, como mostrado na figura 6.2. Note que essa associação nos dá a resistividade a menos de um pré-fator.

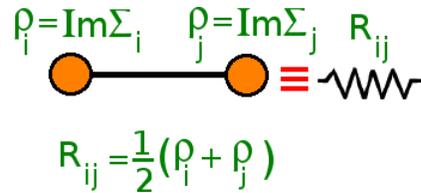


Figura 6.2: Resistor associado a dois sítios vizinhos na rede quadrada.

Os vários resistores se conectam pela geometria da rede. Nos extremos da rede são colocados resistores externos que estão ligados a voltagens externas ϕ_i . O valor dos resistores externos é dado pela resistividade do sítio da borda. As voltagens externas são tomadas como fixas em ϕ_0 na borda esquerda e ϕ na borda direita. A rede de resistores tem a forma mostrada na figura 6.3 para o caso particular de uma rede de 3×3 . As voltagens internas e as correntes que atravessam cada um dos resistores são desconhecidas, e precisam ser determinadas usando a teoria de circuitos elétricos.

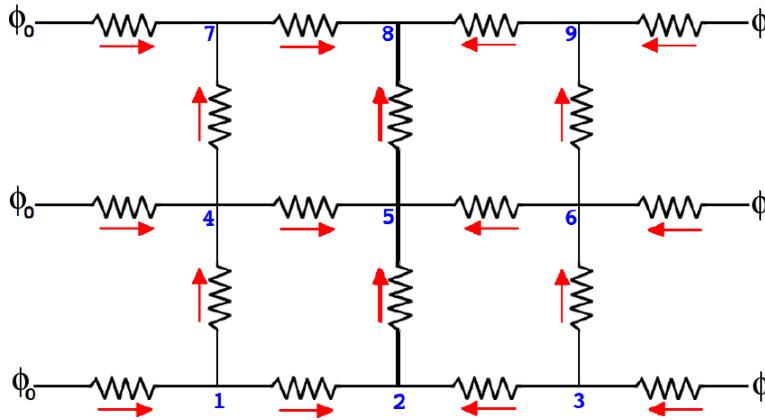


Figura 6.3: Rede de resistores com voltagens externas aplicadas ϕ_0 e ϕ .

De maneira geral, para uma rede com $L \times L$ sítios, o número total de nós é $2L + L^2$, sendo L^2 nós internos e $2L$ nós externos. O número total de resistores é $2L^2$. Precisamos encontrar as $2L^2$ correntes I_{ij} que atravessam os resistores e as L^2 voltagens em cada nó interno. Ao todo são, portanto, $3L^2$ incógnitas.

A corrente nos nós internos é conservada (Lei de Kirchhoff) o que nos fornece as L^2 equações

$$\sum_j I_{ij} = 0. \quad (6.6)$$

Para cada resistor, aplicamos a lei de Ohm

$$I_{ij} = \frac{V_i - V_j}{R_{ij}}, \quad (6.7)$$

o que nos dá $2L^2$ equações. Temos, portanto, um total de $3L^2$ equações para $3L^2$ incógnitas. Encontramos a solução numericamente.

6.4 Cálculo da corrente na rede: resultados

Após encontrarmos as correntes I_{ij} , como o explicado na seção anterior, podemos fazer um mapeamento da sua distribuição espacial. Para isso, calculamos o valor médio da corrente em cada nó $I(i) = \frac{\sum_j |I_{ij}|}{N_s}$, sendo N_s o número de resistores que estão conectados a um nó determinado. Nas figuras 6.4, 6.5 e 6.6 apresentamos o resultado do mapeamento espacial da corrente para $T = 0.024D$, $T = 0.02D$ e $T = 0.028D$ com $W = 0.52D$, nas vizinhanças da transição de Mott. A cor vermelha representa regiões em que a corrente apresenta valores maiores, que, em concordância com a análise da transição de Mott, acontece para valores de interação local U menores. Valores baixos de corrente são representados pela cor azul e estão associados ao comportamento isolante da rede. Notamos que a corrente não é uniforme no sistema e apresenta flutuações. Entretanto, seu perfil é suave e seus valores diminuem com o aumento de U .

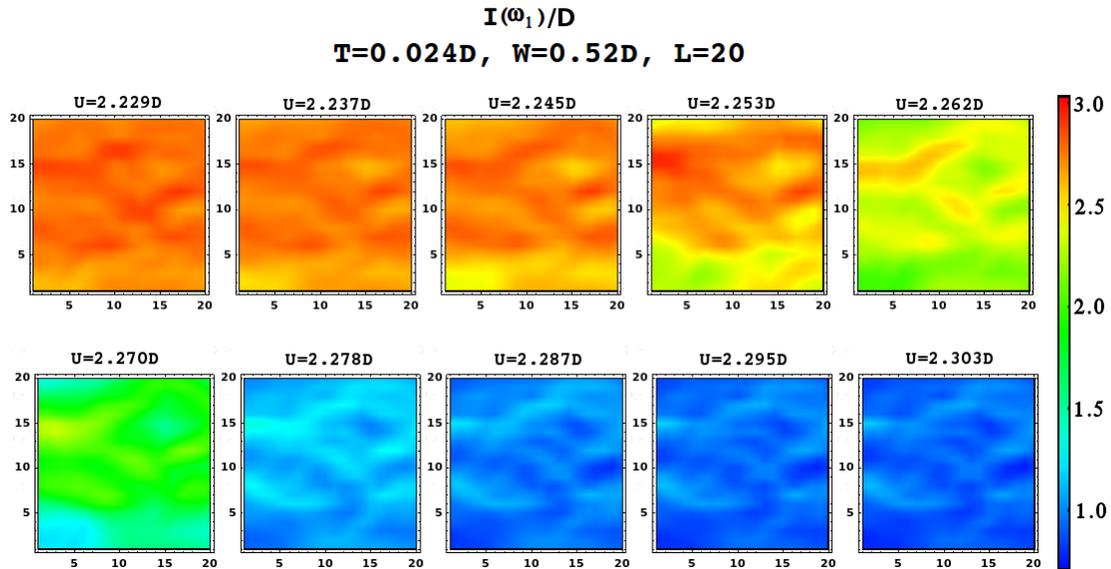


Figura 6.4: Mapeamento espacial da corrente nas vizinhanças da transição de Mott para $T = 0.024D$.

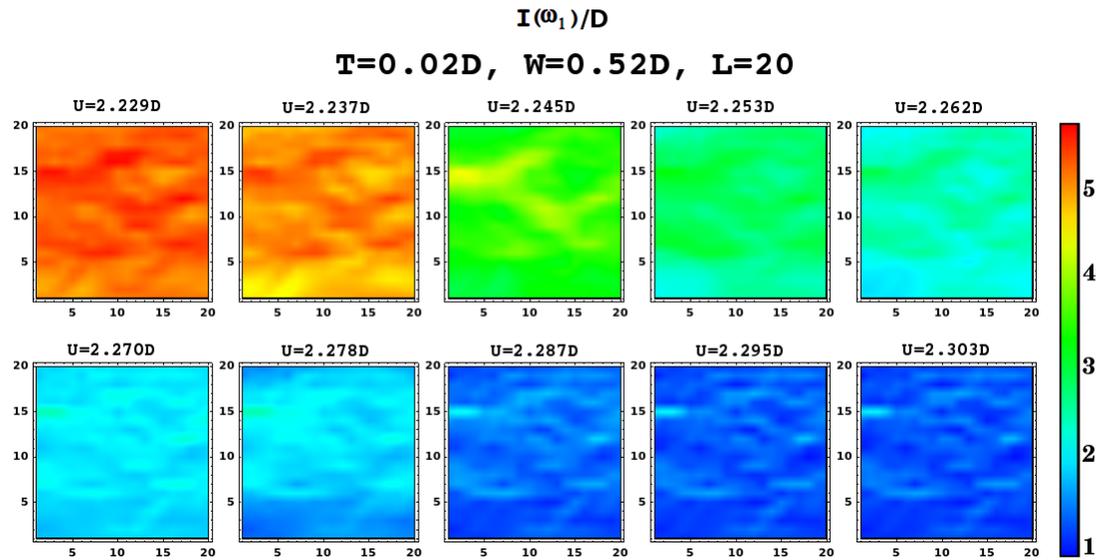


Figura 6.5: Mapeamento espacial da corrente nas vizinhanças da transição de Mott para $T = 0.02D$.

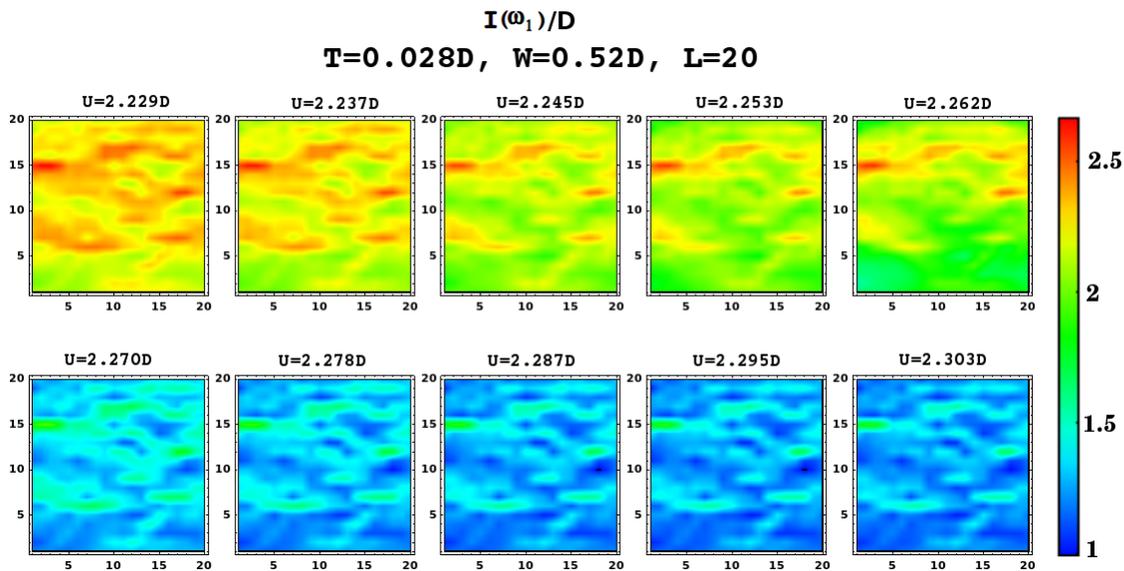


Figura 6.6: Mapeamento espacial da corrente nas vizinhanças da transição de Mott para $T = 0.028D$.

Depois de calcularmos o valor da corrente média para cada um dos sítios da rede, podemos encontrar o valor médio sobre a rede completa para cada valor de interação local U nas vizinhanças da transição de Mott. Isso está mostrado na figura 6.7 para

três temperaturas. A variação da corrente média é grande para o caso de $T = 0.02D$. À medida que aumenta a temperatura a corrente na região da transição apresenta ainda uma mudança notável, mas ela é bem mais suave do que no caso de $T = 0.02D$. Como os potenciais externos usados nos cálculos são fixos, a corrente é uma medida da condutância da rede $G = \frac{I}{(\Phi - \Phi_0)}$. Notamos que, embora a condutância apresente uma forte dependência com a temperatura no regime metálico, ela é quase independente de T no isolante. Essa característica é consequência do fato de que $\text{Im}G(i\omega_1)$ não consegue captar a dependência exponencial com a temperatura que advém da presença do gap de Mott. Isso, por sua vez, só pode ser remediado se utilizarmos algum método capaz de fornecer $\text{Im}\Sigma_i(\omega \rightarrow 0)$ o, que vai além do escopo dessa tese.

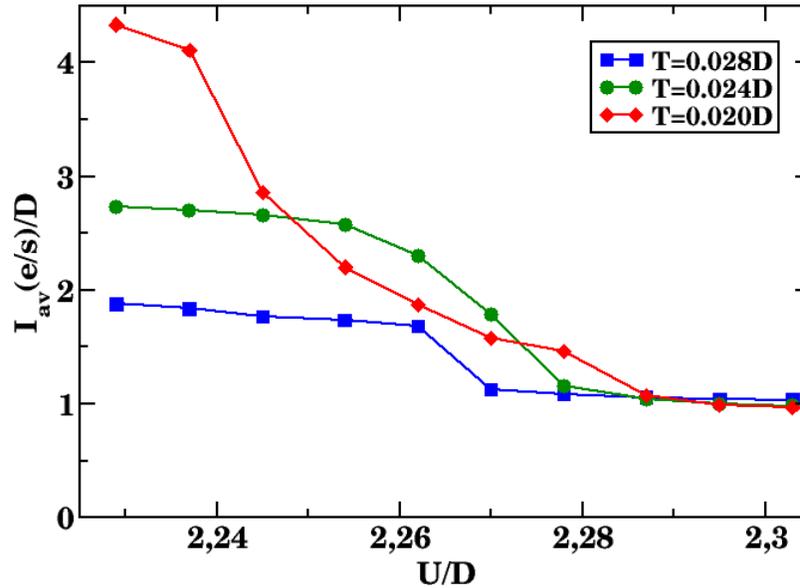


Figura 6.7: Corrente média como função do potencial de Coulomb na região da transição de Mott para diferentes valores de temperatura.

6.5 Conclusões

Nessa seção, realizamos o primeiro cálculo de propriedades de transporte dentro da StatDMFT. Isso só foi possível porque o sistema analisado encontra-se num regime altamente incoerente, onde $k_{Flin} \sim a$, e o cálculo pôde ser feito através do mapeamento em um sistema de resistores clássicos. Uma dificuldade dessa abordagem foi o uso

de $\text{Im}\Sigma_i(\omega_1)$ em lugar de $\text{Im}\Sigma_i(\omega \rightarrow 0)$. Essa substituição tem dificuldades em lidar com o sistema isolante e, em particular, não consegue descrever bem o comportamento exponencial nesse regime. Para um cálculo mais confiável, é necessário utilizar algum método que forneça a auto-energia no eixo de frequências reais, mas isso vai além do escopo desta tese. Mesmo assim, foi possível captar a distribuição espacial não homogênea da corrente e a sua forte variação na região da transição de Mott.

Capítulo 7

Paredes de domínios

7.1 Introdução

COMO pode ser visto na figura 5.7, grande parte da extensão espacial do sistema descrito pelo modelo de Hubbard desordenado nas proximidades da transição de Mott é ocupada por regiões que não podem ser classificadas facilmente como metálicas ou isolantes. Isso é especialmente notável nas temperaturas próximas de T_c ($T = 0.028D$ na figura 5.7). Na verdade, essas regiões intermediárias podem ser vistas como paredes de domínio entre a fase metálica e a fase isolante. É importante estudar o comportamento dessas paredes de domínio, já que elas podem ter grande influência nas propriedades de transporte do sistema. Em particular, tratamentos anteriores baseados em redes aleatórias de resistores postulam apenas dois tipos de condutividades nas amostras, uma alta, associada a regiões metálicas, e outra baixa, característica das regiões isolantes [58]. Se as paredes de domínio, no entanto, ocupam grande parte da amostra, uma descrição mais rica, que leve em conta as regiões dessas paredes, pode ser indispensável. É esse estudo que iremos fazer nesse capítulo.

O estudo será feito através de um modelo simples: uma cadeia linear finita conectada a dois reservatórios, um reservatório metálico à esquerda e um reservatório isolante à direita. No meio da cadeia obteremos a parede de domínio.

Na seção 7.2 será descrito o modelo teórico que será usado. Os resultados obtidos para a formação de paredes de domínio são apresentados na seção 7.3.

7.2 Paredes de domínio

Para fazer o estudo das paredes de domínio vamos usar uma cadeia linear constituída por uma cadeia finita de N sítio, conectada a dois reservatórios semi-infinitos, um reservatório metálico à esquerda e um reservatório isolante à direita, como mostrado na figura 7.1.

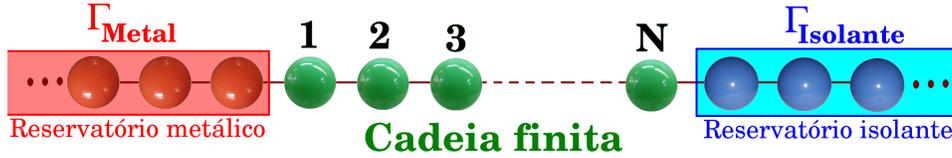


Figura 7.1: Cadeia linear finita conectada a dois reservatórios semi-infinitos, um reservatório metálico à esquerda e um reservatório isolante à direita.

O sistema será descrito pelo Hamiltoniano de Hubbard unidimensional *no caso limpo*

$$H = -t \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{(i+1)\sigma} + \text{h.c.} + U \sum_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right), \quad (7.1)$$

em notação usual. É conveniente separá-lo em três termos

$$H = H_S + H_R + H_C, \quad (7.2)$$

onde H_S é o Hamiltoniano da cadeia finita (a “amostra”)

$$H_S = -t \sum_{i=1,\sigma}^{N-1} c_{i\sigma}^\dagger c_{(i+1)\sigma} + \text{h.c.} + U \sum_{i=1}^N \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right), \quad (7.3)$$

H_R é o Hamiltoniano dos reservatórios

$$H_R = -t \sum_{i=-\infty,\sigma}^{-1} c_{i\sigma}^\dagger c_{(i+1)\sigma} + \text{h.c.} + U \sum_{i=-\infty}^0 \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \quad (7.4)$$

$$-t \sum_{i=N+1,\sigma}^{\infty} c_{i\sigma}^\dagger c_{(i+1)\sigma} + \text{h.c.} + U \sum_{i=N+1}^{\infty} \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right), \quad (7.5)$$

e H_C é o Hamiltoniano do contato que liga os reservatórios à amostra

$$H_C = -t \sum_{\sigma} c_{0\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma} + \text{h.c.} - t \sum_{\sigma} c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} + \text{h.c.} \quad (7.6)$$

Vamos mostrar agora que, para o cálculo da função de Green da rede, necessário para a implementação da StatDMFT, podemos “integrar” sobre os graus de liberdade dos reservatórios e concentrar nossa atenção apenas na amostra. Vamos discutir primeiramente o caso não interagente. A generalização para o caso interagente é imediata, como veremos.

A separação do Hamiltoniano feita na Eq. (7.2) sugere a partição do espaço de Hilbert em dois blocos, um relativo à amostra, e outro aos reservatórios. Essa partição pode ser posta em forma matricial. O Hamiltoniano total fica então

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \hat{H}_S & \hat{H}_C \\ \hat{H}_C & \hat{H}_R \end{bmatrix}, \quad (7.7)$$

onde o bloco superior esquerdo atua no sub-espço de Hilbert da amostra, o bloco inferior direito no sub-espço dos reservatórios e estes são conectados pelo Hamiltoniano do contato. A função de Green da rede satisfaz a equação do resolvente

$$(i\omega_n \hat{1} - \hat{H}) \hat{G} = \hat{1}, \quad (7.8)$$

que pode ser expandida em forma matricial como

$$\begin{bmatrix} i\omega_n \hat{1} - \hat{H}_S & \hat{H}_C \\ \hat{H}_C & i\omega_n \hat{1} - \hat{H}_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{G}_S & \hat{G}_C \\ \hat{G}_C & \hat{G}_R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & \hat{1} \end{bmatrix}. \quad (7.9)$$

A primeira coluna da Eq. (7.9) é dada pelas seguintes equações matriciais

$$(i\omega_n \hat{1} - \hat{H}_S) \hat{G}_S + \hat{H}_C \hat{G}_C = \hat{1}, \quad (7.10)$$

$$\hat{H}_C \hat{G}_S + (i\omega_n \hat{1} - \hat{H}_R) \hat{G}_C = 0. \quad (7.11)$$

A Eq. (7.11) pode ser resolvida para obtermos

$$\hat{G}_C = - \left(i\omega_n \hat{1} - \hat{H}_R \right)^{-1} \hat{H}_C \hat{G}_S, \quad (7.12)$$

que, quando levada na Eq. (7.10), nos fornece

$$\hat{G}_S = \frac{1}{i\omega_n \hat{1} - \hat{H}_S - \hat{H}_C \left(\frac{1}{i\omega_n \hat{1} - \hat{H}_R} \right) \hat{H}_C} \equiv \frac{1}{i\omega_n \hat{1} - \hat{H}_S - \hat{\Gamma}(i\omega_n)}, \quad (7.13)$$

onde

$$\hat{\Gamma}(i\omega_n) = \hat{H}_C \left(\frac{1}{i\omega_n \hat{1} - \hat{H}_R} \right) \hat{H}_C, \quad (7.14)$$

contém toda a informação sobre os reservatórios necessária para o cálculo da função de Green da amostra.

A generalização para o caso interagente, dentro da StatDMFT, é imediata. Nesse caso, os efeitos da interação são inteiramente contidos na auto-energia, que é puramente local, embora, em princípio, possa variar de sítio para sítio. Sendo assim, podemos fazer a substituição formal

$$i\omega_n \hat{1} \rightarrow i\omega_n \hat{1} - \hat{\Sigma}(i\omega_n), \quad (7.15)$$

de tal forma que obtemos

$$\hat{G}_S = \frac{1}{i\omega_n \hat{1} - \hat{\Sigma}_S(i\omega_n) - \hat{H}_S - \hat{H}_C \left(\frac{1}{i\omega_n \hat{1} - \hat{\Sigma}_R(i\omega_n) - \hat{H}_R} \right) \hat{H}_C} \quad (7.16)$$

$$= \frac{1}{i\omega_n \hat{1} - \hat{\Sigma}_S(i\omega_n) - \hat{H}_S - \hat{\Gamma}(i\omega_n)}, \quad (7.17)$$

$$\hat{\Gamma}(i\omega_n) = \hat{H}_C \left(\frac{1}{i\omega_n \hat{1} - \hat{\Sigma}_R(i\omega_n) - \hat{H}_R} \right) \hat{H}_C, \quad (7.18)$$

No estudo que faremos da parede de domínio, o reservatório da esquerda será descrito por uma auto-energia obtida através de um cálculo auto-consistente de um sistema unidimensional infinito no seu estado metálico. Já a auto-energia do reservatório da direita corresponderá a uma solução auto-consistente isolante. A amostra descreverá então como o sistema varia espacialmente para ir de um estado a outro.

Ela será resolvida dentro da StatDMFT, segundo o algoritmo já descrito em capítulo anterior. Deve-se notar que, embora o Hamiltoniano do sistema seja uniforme, haverá variação espacial nas suas propriedades, o que requer uma descrição não uniforme como aquela fornecida pela StatDMFT.

Se o tamanho da amostra for grande o suficiente para que a solução não apresente grande variação espacial nas regiões dos contatos, as soluções nos reservatórios serão uniformes e as auto-energias correspondentes não variarão de sítio para sítio. Nesse caso, a função definida na Eq. (7.18) pode ser obtida facilmente. De fato, para uma rede unidimensional “tight-binding” com “hopping” entre primeiros vizinhos, ela é dada por (ver apêndice B)

$$\hat{\Gamma}(\omega_n) = \hat{\Gamma}_D(\omega_n) + \hat{\Gamma}_E(\omega_n), \quad (7.19)$$

onde $\hat{\Gamma}_{D(E)}(\omega_n)$ é a contribuição do reservatório da direita (esquerda), e cada uma dessas é dada, em termos das auto-energias de cada reservatório $\Sigma_{R,D(E)}(i\omega_n)$, por

$$\hat{\Gamma}_{D(E)}(\omega_n) = \frac{i}{2} \left[\Omega_{D(E)}(\omega_n) - \text{sgn}(\omega_n) \sqrt{[\Omega_{D(E)}(\omega_n)]^2 + 4t^2} \right], \quad (7.20)$$

onde $\Omega_{D(E)}(\omega_n) = \omega_n - \text{Im}\Sigma_{R,D(E)}(\omega_n)$.

Como já mencionado, utilizaremos a StatDMFT para tratar o sistema com a parede de domínio, como descrito na Seção 3.4. O problema de uma impureza de cada sítio do sistema será resolvido através da teoria de perturbação iterada (IPT) [59, 60]. Os detalhes dessa técnica são descritos no apêndice A. Para cada reservatório, usamos a auto-energia obtida resolvendo o sistema uniforme infinito. Trabalhamos com valores de U dentro da região de coexistência para garantirmos que tanto a solução metálica quanto a solução isolante são meta-estáveis. As linhas espinodais (que delimitam a região de coexistência) obtidas pela técnica de IPT são mostradas na Fig. (7.2).

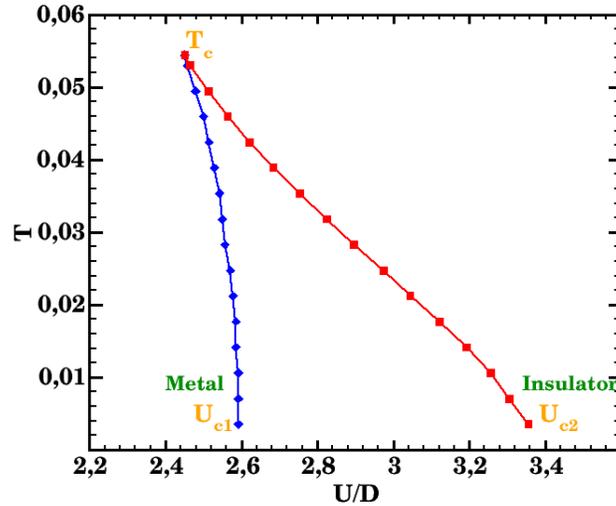


Figura 7.2: Linhas espinodais U_{c1} e U_{c2} , que delimitam a região de coexistência de soluções metálica e isolante, para o sistema unidimensional uniforme e infinito.

7.3 Parede de domínios: resultados

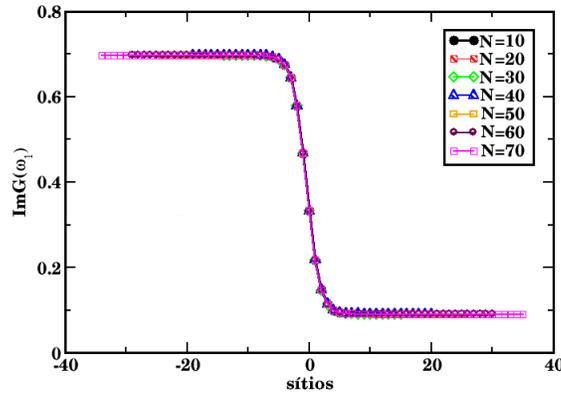


Figura 7.3: Parede de domínio: função de Green local na primeira frequência de Matsubara para cada sítio da amostra e vários tamanhos, para $T = 0.0351D$ e $U = 2.69773D$.

Vamos apresentar agora nossos resultados para a parede de domínio entre o isolante e o metal. Como discutido na Seção anterior, é importante trabalharmos com um tamanho da amostra N tal que a solução para a parede de domínio interpole suavemente entre o metal e isolante e que não apresente uma variação muito grande na região das bordas. A Figura 7.3 mostra a variação do perfil da parede de domínio com o ta-

manho da amostra, para $T = 0.0351D$ e $U = 2.69733D$. Pode-se concluir dessa figura que um valor de $N = 50$ é suficiente para a análise da parede, pois o seu perfil varia muito pouco para $N > 50$. Isso foi constatado para outras temperaturas, exceto a mais próxima de T_c , $T = 0.0544D$, para a qual precisamos usar $N = 70$.

Para cada valor de temperatura $T < T_c$, encontramos o valor de U dentro da região de coexistência para o qual a parede de domínio fica centrada o mais próximo possível do ponto médio da rede. Na Figura 7.4 apresentamos os valores da parte imaginária da (a) função de Green local e da (b) auto-energia local na primeira frequência de Matsubara de cada sítio da amostra e para vários valores de temperatura. Primeiramente, nota-se que tanto a função de Green local quanto a auto-energia são quase constantes na região das bordas, justificando as suposições feitas no modelo descrito na Seção anterior. Por outro lado, estas quantidades apresentam uma variação suave entre o metal e o isolante, caracterizando de maneira clara a região da parede de domínio. Deve-se notar que a posição da parede é bastante sensível ao exato valor de U . Foi preciso trabalhar com uma precisão de várias casas decimais para que a parede ficasse o mais centrada possível.

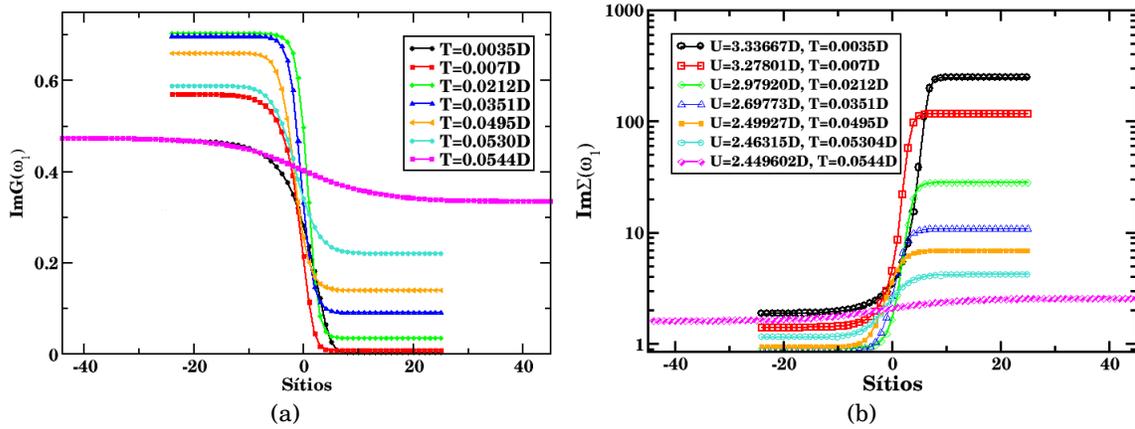


Figura 7.4: Parede de domínio: (a) função de Green local e (b) auto-energia, ambas na primeira frequência de Matsubara, para cada sítio da amostra para diferentes valores de temperatura.

Para melhor visualização da variação da forma da parede com a temperatura, na Fig. 7.5 mostramos novamente a parte imaginária da função de Green local na

primeira frequência de Matsubara para cada sítio, só que agora deslocamos os dados ao longo das abscissas e das ordenadas para que o centro da parede ficasse posicionado na origem do sistema de coordenadas.

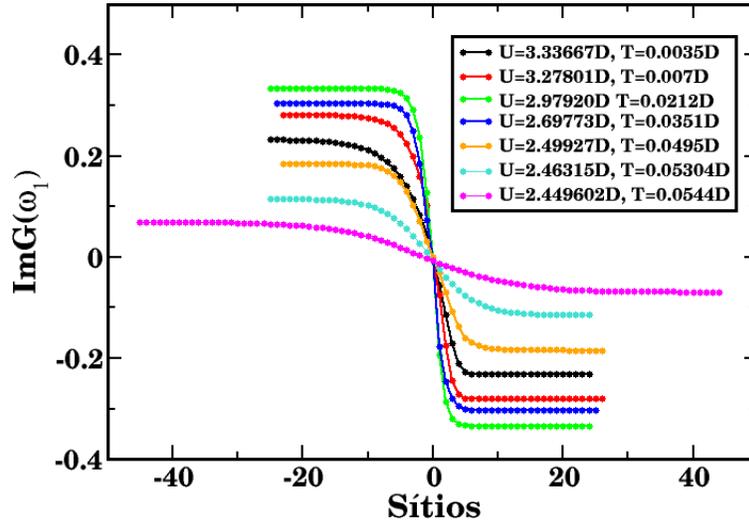


Figura 7.5: Parede de domínio: função de Green local na primeira frequência de Matsubara para cada sítio da amostra para diferentes valores de temperatura. Os dados são os mesmos da Fig. 7.4(a) mas foram aqui deslocados horizontal e verticalmente para que o centro da parede caia na origem do sistema de coordenadas.

É também interessante analisar o comportamento das quantidades locais acima em função da frequência de Matsubara, à medida que se atravessa a parede de domínio. Na Figura 7.6, mostramos a parte imaginária da (a) função de Green local e da (b) auto-energia local, como funções da frequência de Matsubara para alguns sítios na região do centro da parede de domínio entre o metal e o isolante para uma temperatura fixa ($T = 0.035D$). A evolução do comportamento metálico à esquerda ao comportamento isolante à direita do centro da cadeia (que se encontra no sítio rotulado de 0 na Figura 7.4) é gradual e se concentra predominantemente nas frequências mais baixas. Deve-se notar que a separatriz entre os dois tipos de comportamentos parece tender a um valor constante intermediário entre o valor metálico e o isolante quando a frequência vai a zero.

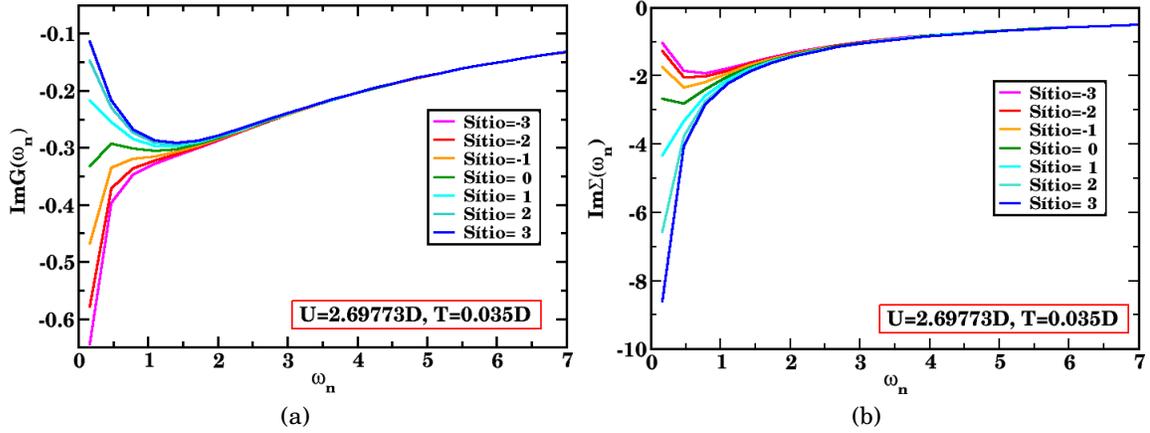


Figura 7.6: Parede de domínio: (a) função de Green local e (b) auto-energia como funções das frequências de Matsubara para alguns sítios da amostra dentro da região da parede de domínio.

Podemos analisar a dependência das quantidades locais com a frequência de Matsubara à medida que varia a temperatura. Isso é mostrado na Fig. 7.7, onde mostramos as curvas dos dois sítios centrais da parede de domínio para cada valor de temperatura estudado. O mais interessante dessa figura é a observação de que os pontos centrais têm uma dependência com a frequência que é típica do isolante, exceto para as frequências mais baixas.

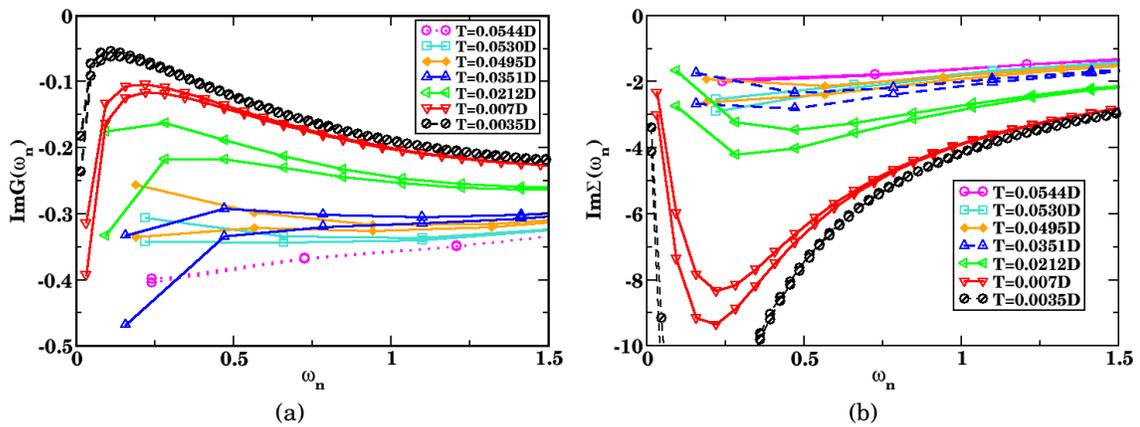


Figura 7.7: Parede de domínio: (a) função de Green local e (b) auto-energia como funções das frequências de Matsubara e várias temperaturas para os dois sítios centrais da parede de domínio.

Finalmente, podemos tentar quantificar a largura da parede de domínio. Uma maneira de fazer isso é, primeiramente, definir quais sítios estão dentro da parede e quais estão fora. Guiados visualmente pelas variações típicas das Figs. 7.4, determinamos que, se $\text{Im}G(i\omega_1)$ varia relativamente de um sítio para o próximo por um valor maior do que 1.0×10^{-3} , então o sítio pertence à parede de domínio. Utilizando essa definição, determinamos a variação da largura da parede ξ como função da temperatura. Esses resultados são mostrados na Fig. 7.8.

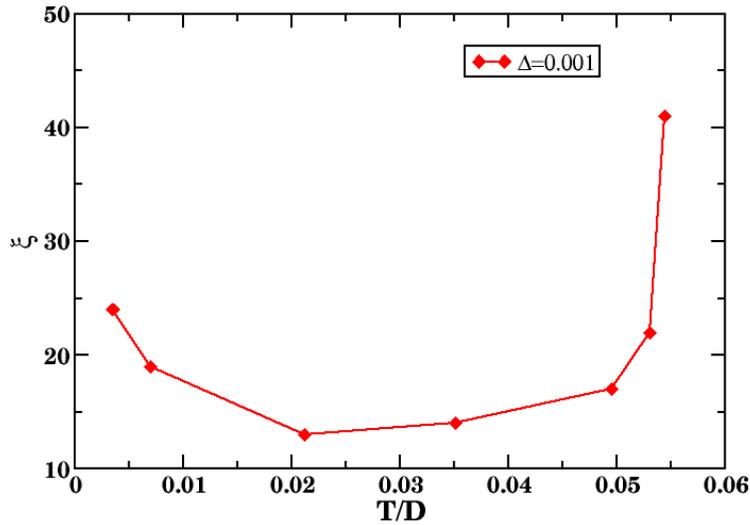


Figura 7.8: Largura da parede de domínio como função da temperatura.

É interessante notar que a parede alarga-se tanto quando $T \rightarrow T_c$ quanto quando $T \rightarrow 0$. A primeira destas tendências é natural, já que a proximidade do ponto crítico de segunda ordem em $T = T_c$ faz com que a barreira entre as duas fases se torne cada vez menor e, conseqüentemente, diminua a tensão superficial da parede. De fato, na teoria de campo médio de Landau para parâmetros de ordem do tipo Ising, a largura da parede de domínio é proporcional ao comprimento de correlação e diverge como ele no ponto crítico

$$\xi \sim \xi_{corr} \sim \frac{1}{|T - T_c|^{1/2}}. \quad (7.21)$$

O aumento da largura da parede que encontramos quando $T \rightarrow 0$ advém do fato de que a barreira entre as soluções metálica e isolante também diminui em baixas temperaturas, o que leva a esse alargamento da parede. Entretanto, não podemos ter

certeza de que a barreira não vai a zero quando $T \rightarrow 0$. Infelizmente, temperaturas tão baixas estão fora do alcance dos nossos códigos.

7.4 Conclusões

Usando uma cadeia linear finita conectada a dois reservatórios, um reservatório metálico à esquerda e um outro isolante à direita, foi possível gerar e estudar a parede de domínio entre uma e outra fase no modelo de Hubbard, dentro da aproximação da StatDMFT, para diferentes valores de temperatura. Observou-se como, à medida que a temperatura se aproxima do ponto crítico, a parede de domínio vai ficando cada vez mais larga, tendendo a divergir em T_c . Além disso, mostramos como a auto-energia do centro da parede tem um comportamento intermediário entre o metal e o isolante. Quando a temperatura diminui, esse comportamento tende ao caso isolante. Um próximo passo a ser feito seria o estudo das propriedades de transporte da parede de domínio, que, no entanto, requerem um tratamento mais detalhado do transporte no regime quântico, que vai além do escopo dessa tese.

Capítulo 8

Conclusões

FIZEMOS NESSA TESE várias aplicações da Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística (StatDMFT). Em especial, ela foi usada para analisar a transição de Mott no modelo de Hubbard bi-dimensional desordenado. Os problemas de impureza única, inerentes ao método, foram resolvidos através de Monte Carlo Quântico. Encontramos que, como efeito da adição da desordem, as linhas espinoidais U_{c1} e U_{c2} são deslocadas para valores de interação maior quando comparadas com o caso limpo. Além disso, a região de coexistência também é reduzida em comparação com o caso não desordenado. Analisamos os padrões espaciais das quantidades físicas locais (a função de Green local e a auto-energia) gerados pela não homogeneidade induzida pelo perfil de desordem. Pudemos detectar a formação de bolhas metálicas na fase isolante e bolhas isolantes dentro da fase metálica. Essas bolhas são separadas por regiões de paredes de domínio, cuja largura é especialmente grande próximo do ponto crítico de segunda ordem.

Também constatamos que a natureza de primeira ordem da transição, embora presente nos sistemas finitos estudados, é suprimida quando o tamanho do sistema aumenta. Esse comportamento parece confirmar a aplicabilidade dos resultados do teorema de Imry e Ma e suas conseqüências, usualmente aplicado em sistemas de spins do tipo Ising.

É importante frisar que nossos estudos ficaram severamente limitados pelo grande custo computacional do método de Monte Carlo Quântico. Para as temperaturas es-

tudadas, foi necessário que 100,000 passos fossem usados, o que tornava o estudo extremamente longo e difícil. Em particular, o uso de um número menor de passos impede a obtenção da histerese no caso limpo. Por causa disso, não pudemos explorar mais pontos do espaço de fase, como, por exemplo, outros valores de desordem.

A natureza completamente incoerente do transporte nas regiões estudadas, nas quais o livre caminho médio inelástico é da ordem do parâmetro de rede $a \sim l_{in}$, torna-o essencialmente clássico. Por isso, uma análise baseada no mapeamento da rede de elétrons em uma rede de resistores clássicos conectados a um conjunto de potencial externos fixos. Isso é feito associando-se uma resistividade local a cada sítio da rede dada pela auto-energia local obtida na StatDMFT $\rho_j = \text{Im}\Sigma_j(i\omega_1)$. As equações clássicas foram resolvidas e a distribuição espacial da corrente e o seu valor médio foram obtidos para várias temperaturas e interações. Para valores de temperatura menor a corrente em função da interação local tem uma mudança abrupta na região da transição. Ao nos aproximarmos do ponto crítico da transição de Mott a variação da corrente fica cada vez mais suave.

Finalmente, o formalismo da StatDMFT foi também usada para gerarmos e analisarmos paredes de domínio entre as soluções metálica e isolante de um sistema limpo. Isso foi feito através de um modelo simplificado baseado em uma cadeia linear finita com N sítios conectada a dois reservatórios, um reservatório isolante à direita e um reservatório metálico à esquerda. O cálculo da função de Green da impureza, nesse caso, foi feito através da Teoria de Perturbação Iterada (IPT). Os dois reservatórios tem um valor fixo da auto-energia, que corresponde à solução obtida para uma cadeia linear infinita e homogênea. A influência desses reservatórios semi-infinitos foi levada em conta exatamente, integrando-se analiticamente seus graus de liberdade. Através do ajuste fino de U , conseguiu-se centralizar a parede de domínio no centro da cadeia. Valores de $N = 50$ foram suficientes para obtermos uma parede que interpola suavemente entre o metal e o isolante, exceto para a temperatura mais alta, na qual um valor de $N = 70$ foi necessário. Observamos que, à medida que nos aproximamos do ponto crítico da transição, a largura da parede se torna cada vez maior, em conformidade com a expectativa baseada na teoria de Landau para a classe de universalidade de Ising.

Um passo importante a ser seguido após este estudo é a implementação de cálculos de propriedades de transporte no regime quântico dentro da StatDMFT. Além disso, fica claro que sistemas maiores só poderão ser analisados com essa técnica se um método mais barato computacionalmente de resolução dos problemas de impureza única for utilizado. Finalmente, seria interessante incorporar os graus de liberdade dos íons da rede, que são observados como fortemente acoplados aos graus de liberdade eletrônico na transição metal-isolante. Essas implementações constituem uma continuação natural dessa tese e podem finalmente nos ajudar a melhor descrever a transição de Mott no seu caso desordenado.

Apêndice A

Função de Green da impureza

A.1 Monte-Carlo Quântico: Algoritmo de Hirsch e Fye

Um dos métodos que podem ser usados para resolver o problema de uma impureza é o método de Monte-Carlo Quântico, segundo o algoritmo proposto por Hirsch e Fye [53]. Vamos descrever agora como funciona o algoritmo. Nosso objetivo é encontrar a função de Green local

$$-G_{00}(\tau - \tau') = \left\langle T \left[c_0(\tau) c_0^\dagger(\tau') \right] \right\rangle_{S_{eff}} \quad (\text{A.1})$$

para uma dada ação efetiva

$$S_{eff} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{0\sigma}^\dagger(\tau) \left[\delta(\tau - \tau') \frac{\partial}{\partial \tau} + \Delta_0(\tau - \tau') \right] c_{0\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau). \quad (\text{A.2})$$

Como explicado na Seção 3.3.1, essa ação descreve a dinâmica do sítio de uma impureza correlacionada no modelo de impureza única de Anderson, que é descrito pelo Hamiltoniano

$$H_{imp} = \sum_{p>0,\sigma}^N \epsilon_p c_{p\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + \sum_\sigma \epsilon_0 c_{0\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} + \sum_{p>0,\sigma}^N \left[V_{0p} c_{0\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + V_{0p}^* c_{p\sigma}^\dagger c_{0\sigma} \right], \quad (\text{A.3})$$

onde os operadores de criação e destruição descrevem dois tipos distintos de estados: estados estendidos de uma banda de condução rotulados por um sub-índice $p \in \{1, 2, \dots, N\}$ ($c_{p\sigma}$) e estados localizados no sítio da impureza ($c_{0\sigma}$). O primeiro termo no Hamiltoniano representa a energia dos elétrons da banda de condução. O segundo termo representa a energia do orbital da impureza. O terceiro termo dá conta da repulsão coulombiana entre elétrons no sítio da impureza. O último termo representa a hibridização entre estados estendidos e a impureza, sendo V_{0p} o potencial de hibridização. A relação entre o Hamiltoniano acima e a ação da Eq. A.2 é obtida a partir da integração dos graus de liberdade dos elétrons de condução, donde se pode mostrar que, em termos das frequências de Matsubara,

$$\Delta_0(i\omega_n) = \sum_{p>0}^N \frac{|V_{0p}|^2}{i\omega_n - \epsilon_p}.$$

O Hamiltoniano A.3 pode ser separado em dois termos

$$H_{imp} = H_0 + H_I, \quad (\text{A.4})$$

onde

$$H_0 = \sum_{p,\sigma} \left(\epsilon_p + \delta_{p,0} \frac{U}{2} \right) c_{p\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + \sum_{p>0,\sigma} \left[V_{0p} c_{0\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + V_{0p}^* c_{p\sigma}^\dagger c_{0\sigma} \right],$$

e

$$H_I = U [n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} - \frac{1}{2} (n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow})], \quad (\text{A.5})$$

que contém o termo de interação U .

A função de partição do Hamiltoniano da Eq.(A.3) é

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau [H_0 + H_I]}, \quad (\text{A.6})$$

onde separamos o intervalo $[0, \beta]$ em L partes iguais de tamanho $\Delta\tau = \frac{\beta}{L}$. O algoritmo é baseado na decomposição de Suzuki-Trotter para a exponencial

$$e^{\Delta\tau H_0 + \Delta\tau H_I} \cong e^{\Delta\tau H_0} e^{\Delta\tau H_I} + \mathcal{O}(\Delta\tau)^2 U,$$

que nos leva à seguinte forma para a função de partição

$$Z \cong \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H_0} e^{-\Delta\tau H_l}. \quad (\text{A.7})$$

Essa expressão é exata no limite em que $L \rightarrow \infty$, mas contém uma aproximação quando L é finito.

Por outro lado, podemos usar uma versão discreta da transformação de Hubbard-Stratonovich para re-escrever o termo em H_l

$$e^{-\Delta\tau U[n_{0\uparrow}n_{0\downarrow} - \frac{1}{2}(n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow})]} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\lambda s(n_{0\uparrow} - n_{0\downarrow})}, \quad (\text{A.8})$$

onde λ é dado pela equação $\cosh \lambda = e^{-\Delta\tau U/2}$. Substituindo a Eq. (A.8) na Eq. (A.7), obtemos a função de partição

$$Z^{\Delta\tau} = \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H_0} \frac{1}{2} \sum_{s_l=\pm 1} e^{\lambda s_l(n_{0\uparrow} - n_{0\downarrow})}, \quad (\text{A.9})$$

$$Z^{\Delta\tau} = \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} \text{Tr} \prod_{l=1}^L [e^{-\Delta\tau H_0} e^{\lambda s_l(n_{0\uparrow} - n_{0\downarrow})}], \quad (\text{A.10})$$

onde $\{s\} = (s_1, s_2, s_3, \dots, s_L)$. O termo não interagente pode-se separar nas suas componentes de spin de modo que $H_0 = \sum_{\sigma} H_{0\sigma}$ e definindo o operador $V^{\sigma}(s_l) = \sum_{pp'} c_{p\sigma}^{\dagger} V_{pp'}^{\sigma}(l) c_{p'\sigma}$, com $V_{pp'}^{\sigma}(l) = \delta_{pp'} \delta_{0p} \lambda \sigma s_l$, pode-se escrever

$$Z^{\Delta\tau} = \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} \text{Tr} \prod_{l=1}^L \prod_{\sigma=\downarrow, \uparrow} [e^{-\Delta\tau H_{0\sigma}} e^{V^{\sigma}(s_l)}], \quad (\text{A.11})$$

$$Z^{\Delta\tau} = \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} \prod_{\sigma=\downarrow, \uparrow} \text{Tr} \prod_{l=1}^L [e^{-\Delta\tau H_{0\sigma}} e^{V^{\sigma}(s_l)}]. \quad (\text{A.12})$$

Vamos chamar

$$Z[\{s\}] = \prod_{\sigma=\downarrow,\uparrow} \text{Tr} \prod_{l=1}^L [e^{-\Delta\tau H_{0\sigma}} e^{V^\sigma(s_l)}], \quad (\text{A.13})$$

que é uma função de partição auxiliar para uma dada configuração de spins de Ising $\{s\}$, de tal forma que

$$Z^{\Delta\tau} = \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} Z[\{s\}]. \quad (\text{A.14})$$

Calculando o traço da Eq. (A.13), obtemos

$$Z[\{s\}] = \prod_{\sigma=\downarrow,\uparrow} \det [1 + B_1^\sigma \dots B_L^\sigma], \quad (\text{A.15})$$

onde $B_l^\sigma = e^{-\Delta\tau \mathcal{H}_{0\sigma}} e^{\mathcal{V}^\sigma(s_l)}$, sendo $\mathcal{H}_{0\sigma}$ a matriz $N \times N$, que não depende do spin, do operador $H_{0\sigma}$ e $\mathcal{V}^\sigma(s_l)$ a matriz $N \times N$ do operador $V^\sigma(s_l)$.

Tomando $U_{\Delta\tau} = e^{-\Delta\tau H_0} e^{-\Delta\tau H_I}$ como operador de evolução entre intervalos de tempo, pode-se definir a função de Green (a menos de um sinal) dentro da mesma aproximação

$$g_{\sigma,p_1 p_2}^{\Delta\tau}(l_1, l_2) = \left\langle T_\tau c_{p_1\sigma}(\tau_{l_1}) c_{p_2\sigma}^\dagger(\tau_{l_2}) \right\rangle, \quad (\text{A.16})$$

$$g_{\sigma,p_1 p_2}^{\Delta\tau}(l_1, l_2) = \frac{1}{Z^{\Delta\tau}} \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} \text{Tr} \left[T \prod_{l=1}^L \prod_{\sigma=\downarrow,\uparrow} [e^{-\Delta\tau H_{0\sigma}} e^{V^\sigma(s_l)}] c_{p_1\sigma}(\tau_{l_1}) c_{p_2\sigma}^\dagger(\tau_{l_2}) \right] \quad (\text{A.17})$$

Seja agora a função de Green para uma dada configuração de spins de Ising $\{s\}$:

$$g_{\sigma,p_1 p_2}^{\Delta\tau, \{s\}}(l_1, l_2) = \frac{1}{Z[\{s\}]} \text{Tr} \left[T \prod_{l=1}^L \prod_{\sigma=\downarrow,\uparrow} [e^{-\Delta\tau H_{0\sigma}} e^{V^\sigma(s_l)}] c_{p_1\sigma}(\tau_{l_1}) c_{p_2\sigma}^\dagger(\tau_{l_2}) \right], \quad (\text{A.18})$$

de modo que

$$g_{\sigma,p_1p_2}^{\Delta\tau}(l_1, l_2) = \frac{\sum_{\{s\}} g_{\sigma,p_1p_2}^{\Delta\tau,\{s\}}(l_1, l_2) Z[\{s\}]}{\sum_{\{s\}} Z[\{s\}]}.$$
 (A.19)

Calculando como anteriormente o traço

$$g_{\sigma,p_1p_2}^{\Delta\tau,\{s\}}(l_1, l_2) = \begin{cases} [B_{l_1-1}^\sigma \dots B_{l_2}^\sigma (1 + B_{l_2-1}^\sigma \dots B_1^\sigma B_L^\sigma \dots B_{l_2}^\sigma)^{-1}]_{p_1p_2} & \text{se } l_1 \geq l_2 \\ [-B_{l_1-1}^\sigma \dots B_1^\sigma B_L^\sigma \dots B_{l_2}^\sigma (1 + B_{l_2-1}^\sigma \dots B_1^\sigma B_L^\sigma \dots B_{l_2}^\sigma)^{-1}]_{p_1p_2} & \text{se } l_1 < l_2 \end{cases}$$
 (A.20)

Vamos chamar $g_{\{s\}}^\sigma$ a matriz de Green completa definida por $g_{\{s\}}^\sigma(p_1, l_1; p_2, l_2) = g_{\sigma,p_1p_2}^{\Delta\tau,\{s\}}(l_1, l_2)$, com índices (l_1, l_2) e (p_1, p_2) , cuja dimensão é NL . Essa matriz pode ser escrita como a inversa de uma matriz que vamos chamar de $\mathcal{O}_\sigma(\{s\})$

$$g_{\{s\}}^\sigma = \mathcal{O}_\sigma^{-1}(\{s\}),$$

onde

$$\mathcal{O}_\sigma(\{s\}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & B_L^\sigma \\ -B_1^\sigma & 1 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -B_2^\sigma & 1 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 1 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & B_{L-1}^\sigma & 1 \end{bmatrix},$$
 (A.21)

cujo determinante é

$$\det \mathcal{O}_\sigma = [1 + B_1^\sigma \dots B_L^\sigma],$$
 (A.22)

que é o determinante necessário para o cálculo da função partição, como pode ser visto na Eq. (A.15).

Para duas configurações dos spins Ising diferentes, as funções de Green estão relacionadas por uma equação de Dyson, como notaram Hirsch e Fye [53]

$$g_{\{s'\}}^\sigma - g_{\{s\}}^\sigma = (g_{\{s\}}^\sigma - 1)(e^{\mathcal{V}^\sigma(\{s'\}) - \mathcal{V}^\sigma(\{s\})} - 1)g_{\{s'\}}^\sigma, \quad (\text{A.23})$$

onde

$$(e^{\mathcal{V}^\sigma(\{s'\}) - \mathcal{V}^\sigma(\{s\})} - 1)_{(p_1 p_2), (l_1 l_2)} \propto \delta_{l_1 l_2} \delta_{0 p_1} \delta_{0 p_2}. \quad (\text{A.24})$$

Os graus de liberdade do banho podem ser integrados, dado que a Eq. (A.23) é válida quando $p_1 = 0$ e $p_2 = 0$. O interesse concentra-se no cálculo da função de Green do orbital da impureza $g_{\sigma, 00}^{\Delta\tau, \{s\}}(l_1, l_2)$, que por enquanto vamos chamar de $G_{l_1 l_2}$. Assim,

$$G' = \mathcal{A}^{-1}G, \quad (\text{A.25})$$

onde

$$\mathcal{A} = 1 + (1 - G)(e^{\mathcal{V}' - \mathcal{V}} - 1) \quad (\text{A.26})$$

e

$$\mathcal{V}' - \mathcal{V} = \begin{bmatrix} \lambda\sigma(s'_1 - s_1) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda\sigma(s'_2 - s_2) & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda\sigma(s'_L - s_L) \end{bmatrix}. \quad (\text{A.27})$$

Consideremos agora duas configurações que diferem apenas por um spin, s_l . A matriz \mathcal{A} simplifica para

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & \mathcal{A}_{1l} & \dots & 0 \\ \dots & 0 & \dots & \mathcal{A}_{2l} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathcal{A}_{ll} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathcal{A}_{Ll} & \dots & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.28})$$

A inversa de \mathcal{A} pode ser calculada como sendo

$$\mathcal{A}^{-1} = 1 + (\mathcal{A}_{ll})^{-1}(1 - \mathcal{A}), \quad (\text{A.29})$$

$$\mathcal{A}^{-1} = 1 + (\mathcal{A}_{ll})^{-1}(G - 1)(e^{\mathcal{V}' - \mathcal{V}} - 1). \quad (\text{A.30})$$

O determinante de \mathcal{A} é

$$\det \mathcal{A} = \mathcal{A}_{ll} = 1 + (G - G_{ll})(e^{\lambda\sigma(s'_l - s_l)} - 1). \quad (\text{A.31})$$

Substituindo a equação (A.30) em (A.25) obtemos

$$G'_{l_1 l_2} = G_{l_1 l_2} + (G - 1)_{l_1 l} (e^{\mathcal{V}' - \mathcal{V}} - 1)_{ll} (\mathcal{A}_{ll})^{-1} G_{ll_2}, \quad (\text{A.32})$$

Além disso, pode-se provar a partir da Eq. (A.25) que

$$\frac{\det \mathcal{O}_\sigma(\{s'\})}{\det \mathcal{O}_\sigma(\{s\})} = \frac{\det g_{\{s\}}^\sigma}{\det g_{\{s'\}}^\sigma} = \det \mathcal{A}^\sigma. \quad (\text{A.33})$$

Essencialmente, usaremos as técnicas de amostragem usuais do método de Monte Carlo nas variáveis de spins de Ising para encontrar a função de Green local, que é dada por

$$G_\sigma = \frac{\sum_{\{s\}} G_\sigma^{\{s\}} Z[\{s\}]}{\sum_{\{s\}} Z[\{s\}]}. \quad (\text{A.34})$$

Inicialmente fazemos todos os spins iguais a zero ($s_1 \dots s_L = 0$) e com isso obtemos a função de Green não interagente. Um intervalo de tempo imaginário l é escolhido de maneira aleatória. O spin correspondente ao intervalo pode ser invertido, dependendo de uma certa probabilidade P . Essa probabilidade deve satisfazer o princípio de balanço detalhado

$$\frac{P(s \rightarrow s')}{P(s' \rightarrow s)} = \frac{\prod_{\sigma} \det \mathcal{O}_{\sigma}(\{s'\})}{\prod_{\sigma} \det \mathcal{O}_{\sigma}(\{s\})}. \quad (\text{A.35})$$

Usualmente, escolhemos uma de duas possibilidades de definição da probabilidade $P(s \rightarrow s')$

$$P(s \rightarrow s') = \frac{\prod_{\sigma} \det \mathcal{O}_{\sigma}(\{s'\})}{\left[\prod_{\sigma} \det \mathcal{O}_{\sigma}(\{s'\}) + \prod_{\sigma} \det \mathcal{O}_{\sigma}(\{s\}) \right]} \quad (\text{Banho térmico}) \quad (\text{A.36})$$

$$P(s \rightarrow s') = \begin{cases} 1 & \text{se } \prod_{\sigma} \det \mathcal{O}_{\sigma}(\{s'\}) > \prod_{\sigma} \det \mathcal{O}_{\sigma}(\{s\}) \\ \frac{\prod_{\sigma} \det \mathcal{O}_{\sigma}(\{s'\})}{\prod_{\sigma} \det \mathcal{O}_{\sigma}(\{s\})} & \text{de outro modo} \end{cases} \quad (\text{Metropolis}) \quad (\text{A.37})$$

Ambas só dependem da razão de determinantes obtida a partir da Eq. (A.33). Se a inversão é aceita, utilizamos a Eq. (A.32) para obter a nova função de Green. Este procedimento é repetido para vários intervalos aleatórios de tempo que vão permitir obter a soma dada na Eq. (A.34). Erros de arredondamento são acumulados ao usar a Eq. (A.32). Portanto, é preciso de vez em quando utilizar a expressão da Eq. (A.25), que é mais precisa mas envolve uma inversão completa da matriz \mathcal{A} e é computacionalmente mais cara.

A.2 Teoria de Perturbação iterativa (IPT)

A teoria de perturbação iterativa (IPT) é um método perturbativo de muitos corpos usado para resolver o problema de uma única impureza de Anderson [59, 60]. Como sempre, dada a ação efetiva da forma

$$S_{eff} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{\ell\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_{\ell\ell}^{-1}(\tau - \tau') c_{\ell\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{\ell\uparrow}(\tau) n_{\ell\downarrow}(\tau), \quad (\text{A.38})$$

estamos interessados em calcular a função de Green

$$G_{\ell\ell}(\tau - \tau') = - \left\langle T \left[c_{\ell}(\tau') c_{\ell}^\dagger(\tau) \right] \right\rangle_{S_{eff}}. \quad (\text{A.39})$$

Neste método, o termo $U n_{\ell\uparrow}(\tau) n_{\ell\downarrow}(\tau)$ é tratado em segunda ordem de teoria de perturbação. Nossa aplicação do método se resume ao caso com simetria partícula-buraco. Nessa caso, a auto-energia é dada por

$$\Sigma_{\ell\ell}^{IPT}(i\omega_n) = \frac{U}{2} + \tilde{\Sigma}^{(2)}(i\omega_n), \quad (\text{A.40})$$

$$\Sigma_{\ell\ell}^{IPT}(i\omega_n) = \frac{U}{2} + U^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} [\mathcal{G}_{\ell\ell}(\tau)]^3 \quad (\text{A.41})$$

onde a função $\mathcal{G}_{\ell\ell}(\tau)$ é modificada pelo termo de Hartree $\mathcal{G}_{\ell\ell}^{-1}(\tau) \rightarrow \mathcal{G}_{\ell\ell}^{-1}(\tau) - \frac{U}{2}$. Diagramaticamente, o termo de segunda ordem corresponde ao diagrama da Fig. A.1. A função de Green procurada é então dada por

$$G_{\ell\ell}^{-1}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{\ell\ell}^{-1}(i\omega_n) - \Sigma_{\ell\ell}^{IPT}(i\omega_n). \quad (\text{A.42})$$

Note-se que a expressão da auto-energia é mais simples no tempo imaginário, mas a relação entre a auto-energia e a função de Green é feita em termos das frequências de Matsubara. Portanto, o cálculo é bastante acelerado pelo uso rotinas de “Fast Fourier Transform” para as transformadas de Fourier de uma representação para a outra.

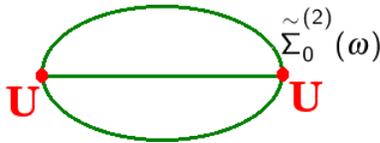


Figura A.1: Diagrama de Feynman descrevendo a contribuição $\tilde{\Sigma}_0^{(2)}(\omega)$ na IPT.

Apêndice B

Função $\Gamma(i\omega_n)$

Vamos agora mostrar a dedução da forma da função $\Gamma(i\omega_n)$, definida na Eq. (7.18), no caso de uma rede unidimensional “tight-binding” com “hopping” entre primeiros vizinhos. Vamos supor um sistema não interagente pois, como discutido na Seção 7.2, a generalização para um sistema interagente dentro da StatDMFT é imediata.

Primeiramente calcularemos o efeito de apenas um dos reservatórios, digamos o da direita. O efeito do outro reservatório é completamente análogo e o resultado final é a soma das duas contribuições. Da definição da Eq. (7.18), temos que a contribuição do reservatório da direita é

$$\Gamma_D(i\omega_n) = t^2 G_R^{(N+1)}(i\omega_n), \quad (\text{B.1})$$

onde $G_R^{(N+1)}(i\omega_n)$ é a função de Green local do sítio $N + 1$ do reservatório da direita. Esta, por sua vez, pode ser vista como a função de Green local de um sítio l do sistema unidimensional infinito, com o “hopping” ao sítio $l - 1$ removido, que chamaremos de $\tilde{G}_{1D}^l(i\omega_n)$. Esta última quantidade satisfaz uma relação de recorrência simples

$$\tilde{G}_{1D}^l(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - t^2 \tilde{G}_{1D}^{(l+1)}(i\omega_n)}. \quad (\text{B.2})$$

Como estamos supondo o sistema como sendo uniforme (ver discussão na Seção 7.2), segue que $\tilde{G}_{1D}^l(i\omega_n) = \tilde{G}_{1D}^{(l+1)}(i\omega_n) \equiv \tilde{G}_{1D}(i\omega_n)$. A Eq. (B.2) pode agora ser resolvida

facilmente e fornece, quando levada a Eq. (B.1),

$$\hat{\Gamma}_D(\omega_n) = \frac{i}{2} \left[\omega_n - \operatorname{sgn}(\omega_n) \sqrt{\omega_n^2 + 4t^2} \right]. \quad (\text{B.3})$$

Se agora fizermos

$$i\omega_n \rightarrow i\omega_n - \Sigma_{R,D}(i\omega_n), \quad (\text{B.4})$$

obtemos a equação procurada (7.20).

Referências Bibliográficas

- [1] D. B. McWhan, A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman, T. M. Rice. Metal-Insulator Transitions in pure and Doped V_2O_3 . *Phys. Rev. B.* **1973**, 7, 1920–1932.
- [2] P. Limelette, A. Georges, D. Jerome, P. Wzietek, P. Metcalf, J. M. Honig. Universality and Critical Behavior at the Mott Transition. *Science* **2003**, 302, 89–92.
- [3] M. M. Qazilbash, M. Brehm, a. P. Byung-Gyu Chae, G. O. Andreev, Bong-Jun Kim, Sun Jin Yun, A.V. Balatsky, M. B. Maple, F. Keilmann, Hyun-Tak Kim, D. N. Basov. Mott Transition in VO_2 Revealed by Infrared Spectroscopy and Nano-Imaging. *Science* **2007**, 318, 1750–1753.
- [4] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.* **1996**, 68, 13–125.
- [5] H. Terletska, J.Vucicevic, D.Tanaskovic, V.Dobrosavljevic. Quantum Critical Transport Near the Mott Transition. *Phys. Rev. Lett* **2011**, 84, 125120–125128.
- [6] T. F. Rosenbaum, R. F. Milligan, M. A. Paalanen, G. A. Thomas, R. N. Bhatt, W. Lin. Metal-insulator transition in a doped semiconductor. *Phys. Rev. B* **1983**, 27, 7509–7523.
- [7] M. A. Paalanen, R. N. Bhatt. Transport and thermodynamic properties across the metal-insulator transition. *Physica B* **1991**, 169, 223–230.
- [8] S. Anissimova, S. V. Kravchenko, A. Punnoose, A.M. Finkel'stein, T.M. Klapwijk. Flow diagram of the metal insulator transition in two dimensions. *Nature Phys* **2007**, 3, 707–710.

- [9] Y. Hanein, U. Meirav, D. Shahar, C.C. Li, D.C. Tsui, Hadas Shtrikman. The Metalliclike Conductivity of a Two-Dimensional Hole System. *Phys. Rev. Lett.* **1998**, *80*, 1288–1292.
- [10] M. P. Lilly, J. L. Reno, J. A. Simmons, I. B. Spielman, J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, K. W. West, E. H. Hwang, S. Das Sarma. Resistivity of Dilute 2D Electrons in an Undoped GaAs Heterostructure. *Phys. Rev. Lett.* **2003**, *90*, 056806.
- [11] J. Mazzaferro, H. Ceva, B. Alascio. Intermediate-valence effects on the phase diagram of $NiS_2 - xSe_x$. *Phys. Rev. B.* **1980**, *22*, 353.
- [12] P. Lederer, H. Launois, J. P. Pouget, A. Casalot, G. Villeneuve. Contribution to the study of the metal-insulator transition in the $V1 - xNb_xO_2$ system-II magnetic properties. *Journal of Physics and Chemical of Solid* **1972**, *33*, 1961–1967.
- [13] P. Limelette, P. Wzietek, S. Florens, A. Georges, T. A. Costi, C. Pasquier, D. Jerome, C. Meziere, P. Batail. Mott Transition and Transport Crossovers in the Organic Compound $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu[N(CN)_2]Cl$. *Phys. Rev. Lett.* **2003**, *91*, 016401.
- [14] P. W. Anderson. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Phys. Rev.* **1958**, *109*, 1492.
- [15] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, T. V. Ramakrishnan. Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **1979**, *42*, 673.
- [16] N. F. Mott, *Metal-Insulator transition*, Taylor & Francis, London, **1990**.
- [17] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. R. Soc. (London) A* **1963**, *276*, 238.
- [18] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands - II - The degenerate band case. *Proc. Roy. Soc. (London) A* **1964**, *277*, 237.
- [19] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands - III - An improved solution. *Proc. Roy. Soc. (London) A* **1964**, *281*, 401.

- [20] C. Castellani, C. D. Castro, P. A. Lee, M. Ma. Interaction-driven metal-insulator transitions in disordered fermion systems. *Phys. Rev. B* **1984**, *30*, 527.
- [21] C. Castellani, B. G. Kotliar, P. A. Lee. Fermi-liquid theory of interacting disordered systems and the scaling theory of the metal-insulator transition. *Phys. Rev. Lett.* **1987**, *56*, 1179.
- [22] P. A. Lee, T. V. Ramakrishnan. Disordered electronic systems. *Rev. Mod. Phys.* **1985**, *57*, 287.
- [23] B. L. Altshuler, A. G. Aronov. Zero bias anomaly in tunnel resistance and electron-electron interaction. *Solid State Commun.* **1979**, *30*, 115.
- [24] W. F. Brinkman, T. M. Rice. Application of Gutzwiller's Variational Method to the Metal-Insulator Transition. *Phys. Rev. B* **1970**, *2*, 4302.
- [25] M. C. Gutzwiller. Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals. *Phys. Rev. Lett.* **1963**, *10*, 159–162.
- [26] M. C. Gutzwiller. Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals. *Phys. Rev.* **1964**, *134*, A923–A941.
- [27] M. C. Gutzwiller. Correlation of Electrons in a Narrow s Band. *Phys. Rev.* **1965**, *137*, A1726–A1735.
- [28] W. Metzner, D. Vollhardt. Correlated Lattice Fermions in $d = \infty$ Dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **1989**, *62*, 324–327.
- [29] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.* **1996**, *68*, 13.
- [30] V. Dobrosavljević, G. Kotliar. Mean Field Theory of the Mott-Anderson Transition. *Phys. Rev. Lett.* **1997**, *78*, 3943.
- [31] V. Dobrosavljević, G. Kotliar. Dynamical mean-field studies of metal-insulator transitions. *Philos. Trans. R. Soc. London A* **1998**, *356*, 57.

- [32] M. C. O. Aguiar, V. Dobrosavljević, E. Abrahams, G. Kotliar. Effects of Disorder on the Non-Zero Temperature Mott Transition. *Phys. Rev. B* **2005**, *71*, 205115.
- [33] M. C. O. Aguiar, E. Miranda, V. Dobrosavljević, E. Abrahams, G. Kotliar. Temperature dependent transport of correlated disordered electrons: elastic vs. inelastic scattering. *Europhys. Lett.* **2004**, *67*, 226.
- [34] M. C. O. Aguiar, E. Miranda, V. Dobrosavljević. Localization effects and inelastic scattering in disordered heavy electrons. *Phys. Rev. B* **2003**, *68*, 125104.
- [35] E. C. Andrade, E. Miranda, V. Dobrosavljević. Electronic Griffiths phase of the $d=2$ Mott transition. *Phys. Rev. Lett.* **2009**, *102*, 206403.
- [36] E. Andrade, E. Miranda, V. Dobrosavljević. Energy-resolved spatial inhomogeneity of disordered Mott systems. *Physica B: Condensed Matter* **2009**, *404*, 3167.
- [37] G. Kotliar, E. Lange, M. J. Rozenberg. Landau Theory of the Finite Temperature Mott Transition. *Phys. Rev. Lett.* **2000**, *84*, 5180.
- [38] Y. Imry, S. K. Ma. Random-Field Instability of the Ordered State of Continuous Symmetry. *Phys. Rev. Lett.* **1975**, *35*, 1399.
- [39] M. Aizenman, J. Wehr. Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder. *Phys. Rev. Lett* **1989**, *62*, 2503.
- [40] Shigeeki Miyasaka, Hidenori Takagi, Yoshiaki Sekine, Hiroki Takahashi, Nobuo Mori, Robert J. Cava. Metal-Insulator Transition and Itinerant Antiferromagnetism in $NiS_{2-x}Sex$ Pyrite. *J. Phys. Japan* **2000**, *69*, 3166–3169.
- [41] N. T. Vladimir Dobrosavljevic, J. James M. Valles, *Conductor-insulator Quantum Phase Transitions*, Oxford University, USA, **2012**.
- [42] E. Miranda, D. García, K. Hallberg, M. Rozenberg. The metal-insulator transition in the paramagnetic Hubbard Model. *Physica B: Condensed Matter* **2008**, *403*, 1465.
- [43] G. Kotliar, S. Murthy, M. J. Rozenberg. Compressibility Divergence and the Finite Temperature Mott Transition. *Phys. Rev. Lett.* **2002**, *89*, 046401.

- [44] M. C. O. Aguiar, E. Miranda, V. Dobrosavljević, E. Abrahams, G. Kotliar. Temperature dependent transport of correlated disordered electrons: elastic vs. inelastic scattering. *Europhys. Lett.* **2004**, *67*, 226.
- [45] J. Hubbard. *Proc. R. Soc. (London) A* **1957**, *240*, 539.
- [46] D. M. Edwards, A. C. HEWSON. Comment on Hubbard's Theory of the Mott Transition. *Rev. Mod. Phys.* **1968**, *40*, 810–811.
- [47] E. H. Lieb, F. Y. Wu. Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension. *Phys. Rev. Lett.* **1968**, *20*, 1445.
- [48] W. Metzner. Linked-cluster expansion around the atomic limit of the Hubbard model. *Phys. Rev. B* **1991**, *43*, 8549.
- [49] W. K. A. Georges. Numerical solution of the $d \rightarrow \infty$ Hubbard model: evidence for a Mott transition. *Phys. Rev. Lett.* **1992**, *69*, 1240.
- [50] J. W. Negele, H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems*, PERSEUS, Massachusetts, **2001**.
- [51] P. W. Anderson. Local moments and localized states. *Rev. Mod. Phys.* **1978**, *50*, 191.
- [52] A. Georges, G. Kotliar. Hubbard model in infinite dimensions. *Phys. Rev. B* **1992**, *45*, 6479.
- [53] J. E. Hirsch, R. M. Fye. Monte Carlo method for magnetic impurities in metals. *Phys. Rev. Lett.* **1986**, *56*, 2521.
- [54] H. Kajueter, G. Kotliar. New Iterative Perturbation Scheme for Lattice Models with Arbitrary Filling. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, *77*, 131.
- [55] G. Kotliar, E. Lange, M. J. Rozenberg. Landau Theory of the Finite Temperature Mott Transition. *Phys. Rev. Lett* **2000**, *84*, 5180–5183.
- [56] R. Landauer. *Philos. Mag.* **1970**, *21*, 863.

- [57] A. Fetter, J. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, Mc Graw Hill, Boston, **1971**.
- [58] Stefanos Papanikolaou, Rafael M. Fernandes, Eduardo Fradkin, Philip W. Phillips, Joerg Schmalian, Rastko Sknepnek. Universality of Liquid-Gas Mott Transitions at Finite Temperatures. *Phys. Rev. Letter.* **2008**, *100*, 026408.
- [59] A. Georges, G. Kotliar. Hubbard model in infinite dimensions. *Phys. Rev. B* **1992**, *45*, 6479.
- [60] H. Kajueter, G. Kotliar. New Iterative Perturbation Scheme for Lattice Models with Arbitrary Filling. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, *77*, 131.