

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Instituto de Física “Gleb Wataghin” - IFGW

Maria Carolina de Oliveira Aguiar

**Efeitos de temperatura e de interação
finita em sistemas desordenados
correlacionados**

Tese de Doutorado

Orientador: Eduardo Miranda

Tese apresentada ao Instituto de Física
“Gleb Wataghin” da Universidade Estadual
de Campinas como requisito para a obtenção
do título de Doutora em Ciências.

Campinas, 16 de maio de 2003.

Dedicatória

Meus amigos estão entre o que eu tenho de mais precioso na vida. E eu sei que, se eu fui capaz de chegar até aqui e apresentar este trabalho de tese, foi, em grande parte, pelo imenso apoio que eu recebi deles. Por isso, quero dedicar esta tese aos meus queridos amigos, em especial ao Alysson.

E eu não poderia deixar de dedicar o fruto do meu trabalho nos últimos quatro anos aos meus pais, Geraldo e Giselda, que dividiram comigo, durante anos, meu sonho de fazer pesquisa em Física.

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Eduardo Miranda, pela oportunidade de trabalhar com alguém de sua competência na área de sistemas fortemente correlacionados.

Ao Prof. Dr. Vladimir Dobrosavljević, por ter me recebido no Laboratório de Altos Campos Magnéticos, em Tallahassee, na Flórida, para um estágio de seis meses e, principalmente, pela sua capacidade em me deixar motivada com o trabalho.

Ao Prof. Dr. Marcelo Rozenberg, da Universidade de Buenos Aires, pela disposição em responder, em diferentes momentos, a dúvidas que surgiram e também por ter-me disponibilizado vários dos seus códigos numéricos.

Aos meus pais, Geraldo e Giselda, às minhas irmãs, Virgínia e Janaína, ao Glauco, meu querido cunhado, à tia Zete e à tia Jerusa, pelo acompanhamento e apoio constantes, sempre muito importantes.

Ao Alysson, por estar disponível sempre que eu precisei de ajuda (e foram inúmeras vezes), pelas conversas e discussões que me ajudaram a crescer como ser humano, pelas agradáveis aulas de dança de salão na hora do almoço, pelas dicas com o violão, enfim, por ter estado muito presente na minha vida nos últimos três anos.

À Ana Luiza e ao Fabinho, por se preocuparem comigo e me fazerem sentir querida.

Ao Caetano e à Patrícia, pela intensa e agradável convivência durante boa parte do meu Doutorado.

Ao Darko, por ter tornado possível que eu estivesse completamente instalada em Tallahassee em menos de uma semana e pela paciência em me dar carona para o supermercado, praticamente todas as semanas, durante seis meses.

Ao Fábio César, por ter sido um “ombro amigo” em momentos nada fáceis.

À Liliana e ao Augusto, pela alegria de acompanhar tão de perto o crescimento da minha afilhada-xará.

Aos colegas e amigos da sala de estudos do DFMC, Alexandre, Hugo, Fernando, Frederico, Heloisa, Jereson, Luís, Márcio, Marina, Michel e Rodrigo, por contribuírem para um ótimo ambiente de trabalho e pelas nossas festinhas de fim de ano e outras comemorações. À Ana Melva, ao Gaston e à Luciana, que também participavam das nossas reuniões.

Aos amigos de diferentes lugares do mundo, que eu fiz em Tallahassee, Alexandre, Daniel, Débora, Marcelo e Paulo, com quem eu dividia as saudades do Brasil, Aysin e Ilker, da Turquia, Kerwin e Steve, americanos, Mohammad, iraniano sempre muito bem informado a respeito das notícias do Brasil, Wilfredo, cubano bem brasileiro, Marco, da Itália, e Anuvrat, da Índia, sem os quais meu estágio nos Estados Unidos não teria sido tão bom.

À Maria Aparecida, ao Rogério e à Sandra, pelas amizades de mais de dez anos.

Aos meus alunos de Física 1, a sua maioria da turma de 2002 da Engenharia Mecânica, por terem sido uma fonte de motivação num semestre tão difícil como o segundo de 2002.

À CAPES e à FAPESP, pelo suporte financeiro.

A todos que, de uma forma ou de outra, colaboraram para a realização deste trabalho.

Resumo

O objetivo central do trabalho aqui apresentado é o estudo do papel da desordem em sistemas fortemente correlacionados, em que a energia de interação elétron-elétron é comparável a ou domina sobre a energia cinética dos elétrons. Com esse intuito, trabalhamos com os modelos de Hubbard e da rede de Anderson na presença de desordem. A teoria principal na qual nosso trabalho se baseia é a Teoria Dinâmica de Campo Médio, usada no tratamento da interação elétron-elétron presente nesses modelos. Por essa teoria, na ausência de desordem, o problema de uma rede é mapeado no problema de uma impureza embebida num meio que é determinado autoconsistentemente. Portanto, a solução de cada um dos modelos acima recai na solução do problema de uma impureza, que, no nosso trabalho, é obtida usando teoria de perturbação no potencial de interação elétron-elétron, num cálculo a temperatura finita. Uma extensão da Teoria Dinâmica de Campo Médio é ainda empregada para que efeitos de localização de Anderson sejam incluídos.

A motivação para esse estudo vem de resultados experimentais observados em dois tipos de sistemas físicos: sistemas de elétrons bidimensionais, fracamente desordenados e diluídos, e ligas de férmions pesados. No primeiro caso, os resultados experimentais apontam para a existência de uma fase metálica, e consequente transição metal-isolante, em duas dimensões. No segundo caso, um comportamento distinto do previsto pela teoria do líquido de Fermi de Landau para as propriedades termodinâmicas e de transporte é observado.

Nossos resultados para o modelo de Hubbard desordenado, que pode ser usado para descrever a transição metal-isolante de Mott, mostram a importância de se levar em consideração a presença de efeitos de espalhamento inelástico nas teorias que buscam um melhor entendimento dos resultados experimentais. No caso do modelo da rede de Anderson, chegamos a uma dependência das propriedades de transporte com a temperatura que pode ser indentificada com as correlações de Mooij observadas em muitos sistemas de metais desordenados.

Abstract

The main goal of this work is to study the role of disorder in strongly correlated systems, where the electron-electron interaction is comparable to or dominates over the electron kinetic energy. Keeping this in mind, we solve the Hubbard model and the Anderson lattice model in the presence of disorder. The main theory in which our work is based is the Dynamical Mean Field Theory, which is used to describe the electron-electron interaction present in these models. According to this theory, in the absence of disorder, the lattice problem is mapped onto a single impurity problem embedded in a self-consistently calculated bath. Thus, the solution of the models referred to above is obtained by solving a single impurity problem, which is done in our work through perturbation theory in the electron-electron interaction at finite temperature. An extension of the Dynamical Mean Field Theory is used to account for Anderson localization effects.

The motivation for this study comes from the experimental results observed in two types of systems: weakly disordered and dilute two dimensional electron systems and heavy fermion alloys. In the former, the experimental results point to the existence of a metallic phase and also of a metal-insulator transition in two dimensions. In the latter, a behavior different from that predicted by the Landau Fermi liquid theory for the thermodynamics and transport properties is observed.

Our results for the disordered Hubbard model, which can be used to describe the Mott metal-insulator transition, show the importance of taking into account inelastic scattering effects in theories trying to explain the experimental results. For the Anderson lattice model, the dependence with temperature we find for the transport properties can be identified with the Mooij correlations, which are observed in many disordered metals.

Lista de Figuras

1.1	Resistividade em função da temperatura em amostras de MOSFET's de Si, para diferentes densidades de elétrons, medidas por S. V. Kravchenko <i>et al.</i> [23] e M. P. Sarachik <i>et al.</i> [24].	10
1.2	Resistividade em função de T/T_0 , onde T_0 é o parâmetro de escala, obtida por S. V. Kravchenko <i>et al.</i> [23].	11
1.3	Resistividade em função da temperatura para diferentes valores do campo magnético externo medida por D. Simonian <i>et al.</i> [25].	12
1.4	Massa efetiva e fator g de Landé em função da densidade de elétrons obtidos por A. A. Shashkin <i>et al.</i> [30, 31].	14
1.5	Magnetoresistência em função do campo magnético perpendicular medida por M. Rahimi <i>et al.</i> [34].	16
1.6	Magnetocondutância em função do campo magnético perpendicular medida por M. Rahimi <i>et al.</i> [34].	17
2.1	Espectro de NMR em amostras de $UCu_{5-x}Pd_x$ medido por D. E. MacLaughlin <i>et al.</i> [53].	21
2.2	Resposta magnética de um único spin.	22
2.3	Susceptibilidade magnética em função da temperatura medida por D. E. MacLaughlin <i>et al.</i> [53].	23
2.4	Distribuição de temperatura Kondo obtida dentro do modelo de desordem Kondo por D. E. MacLaughlin <i>et al.</i> [53].	24
2.5	Resistividade em função da temperatura medida por B. Andracka e G. R. Stewart [56].	25
2.6	Calor específico em função da temperatura medido por M. C. de Andrade <i>et al.</i> [57].	25
2.7	Distribuição de temperatura Kondo calculada por E. Miranda e V. Dobrosavljević [62].	27

3.1	Rede de Bethe com conectividade $z = 3$	32
3.2	Vértice a partir do qual são construídos os diagramas de Feynman para o problema de uma impureza.	38
3.3	Diagramas de Feynman até quarta ordem que têm contribuição não-nula na expansão perturbativa para a autoenergia no problema de uma impureza simétrico.	39
3.4	Representação esquemática do cálculo autoconsistente.	54
3.5	Fluxograma utilizado no cálculo numérico.	55
4.1	Energia renormalizada dos elétrons de condução em função da energia despida no modelo de Hubbard desordenado para $U = W = 2$ e diferentes valores da temperatura.	59
4.2	Energia renormalizada em função da temperatura para <i>o problema de uma impureza</i> com diferentes valores da energia despida, obtida usando TP e MCQ.	60
4.3	Partes real e imaginária da função de Green em função da frequência para <i>o problema de uma impureza</i> , obtidas usando TP e MCQ.	61
4.4	Partes real e imaginária da autoenergia em função da frequência para <i>o problema de uma impureza</i> , obtidas usando TP e MCQ.	61
4.5	Partes real e imaginária da autoenergia em função da frequência, correspondentes à impureza com $\epsilon = W/2$, para <i>o modelo de Hubbard com desordem binária</i> , obtidas usando TP e MCQ.	62
4.6	Partes imaginárias da função de Green e da autoenergia dos elétrons de condução em função da frequência para <i>o modelo de Hubbard com desordem binária</i> , obtidas usando TP e MCQ.	63
4.7	Taxa total de espalhamento em função da temperatura no modelo de Hubbard desordenado para diferentes valores de U e $W = U$, usando HF e TP até segunda ordem em U	64
4.8	Taxa de espalhamento em função da temperatura para $W = 2$ e dois valores distintos do potencial de interação, $U = 0.5$ e $U = 2.0$	65
4.9	Diagrama de fase para o modelo de Hubbard na presença de desordem uniforme, dentro da TDCM.	66
4.10	Densidade de estados em função da frequência para o modelo de Hubbard, no limite atômico, dentro da TDCM.	66

4.11	Taxa total de espalhamento em função da temperatura para diferentes valores de U e $W/U = 0.7$	67
4.12	Taxa total de espalhamento em função da temperatura para diferentes valores de W e $U = 2.5$	68
4.13	Taxa de espalhamento inelástico em função de $1/U$ para $W = U$ e $T = 0.05$	69
4.14	(a) Resíduo de quasi-partícula em função da energia despida para diferentes valores de U e (b) massa efetiva em função de $1/U$, ambos para $W = U$	70
5.1	DE típica dos elétrons de condução em função da desordem no modelo da rede de Anderson desordenada para diferentes valores de V e U a $T = 0.003$	72
5.2	Distribuição da desordem efetiva em relação à desordem despida, ambas vistas pelos elétrons de condução, para $V = 0.3$ e $W = 1/\sqrt{2}$. . .	73
5.3	Distribuição da desordem efetiva em relação à desordem despida, ambas vistas pelos elétrons de condução, para $V = 0.5$ e $W = 1/\sqrt{2}$. . .	73
5.4	Distribuição da desordem efetiva em relação à desordem despida, ambas vistas pelos elétrons de condução, para $V = 0.3$ e $W = 10/\sqrt{2}$. . .	74
5.5	Distribuição da desordem efetiva em relação à desordem despida, ambas vistas pelos elétrons de condução, para $V = 0.5$ e $W = 10/\sqrt{2}$. . .	74
5.6	Distribuição da autoenergia dos elétrons tipo f em relação à desordem despida para $V = 0.3$ e $W = 1/\sqrt{2}$	77
5.7	Distribuição da autoenergia dos elétrons tipo f em relação à desordem despida para $V = 0.5$ e $W = 1/\sqrt{2}$	77
5.8	Distribuição da autoenergia dos elétrons tipo f em relação à desordem despida para $V = 0.3$ e $W = 10/\sqrt{2}$	78
5.9	Distribuição da autoenergia dos elétrons tipo f em relação à desordem despida para $V = 0.5$ e $W = 10/\sqrt{2}$	78
5.10	DE típica dos elétrons de condução em função da desordem para $U = 4$, $V = 0.3$ e diferentes valores da temperatura.	81
5.11	Inverso da DE típica dos elétrons de condução em função da temperatura para $U = 4$, $V = 0.3$ e diferentes valores da desordem.	82
5.12	Distribuição da desordem efetiva em relação à desordem despida, ambas vistas pelos elétrons de condução, para $T = 0.0005$ e $W = 1/\sqrt{2}$. . .	83

5.13	Distribuição da desordem efetiva em relação à desordem despida, ambas vistas pelos elétrons de condução, para $T = 0.0001$ e $W = 1/\sqrt{2}$.	83
5.14	Distribuição da autoenergia dos elétrons tipo f em relação à desordem despida para $T = 0.0005$ e $W = 1/\sqrt{2}$.	84
5.15	Distribuição da autoenergia dos elétrons tipo f em relação à desordem despida para $T = 0.0001$ e $W = 1/\sqrt{2}$.	84
5.16	Resistividade magnética em função da temperatura para amostras de $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{Pb}_3$, medida por C. L. Lin <i>et al.</i> [94].	86
A.1	Resultados obtidos para a autoenergia e a função de Green em função da frequência no modelo de Hubbard nas fases metálica e isolante a $T = 0.01$.	98
A.2	Resultados obtidos para a DE em função da frequência no <i>modelo de Hubbard</i> para diferentes valores do potencial de interação.	100
A.3	Resultados obtidos para a DE dos elétrons de condução e dos elétrons tipo f no <i>modelo da rede de Anderson</i> para $U = 2$ e $V = 0.4$.	101
A.4	Resultados obtidos para a DE dos elétrons de condução e dos elétrons tipo f no <i>modelo da rede de Anderson</i> para $U = 3$ e $V = 0.4$.	102

Lista de Tabelas

- 2.1 Exemplos de ligas desordenadas de férmions pesados que exibem comportamento NLF. Tabela construída a partir da referência [17]. 20

Lista de Siglas

AF	Antiferromagnética
CPA	Aproximação do Potencial Coerente (do inglês “Coherent Potential Approximation”)
DE	Densidade de estados
FP	Férmions pesados
HF	Hartree-Fock
MCQ	Monte Carlo quântico
MOSFET	“metal-oxide-semiconductor field effect transistors”
NLF	Não-líquido de Fermi
NMR	Ressonância Magnética Nuclear (do inglês “Nuclear Magnetic Resonance”)
PAM	Modelo Periódico de Anderson (do inglês “Periodic Anderson Model”)
TDCM	Teoria Dinâmica de Campo Médio
TDCME	Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística
TP	Teoria de perturbação

Sumário

Introdução	1
1 Transição metal-isolante	7
2 Férmions pesados	19
3 Método de resolução dos modelos	29
3.1 Caso limpo	29
3.1.1 Teoria Dinâmica de Campo Médio	29
3.1.2 Problema de uma impureza	36
3.2 Caso desordenado	42
3.2.1 Aproximação do Potencial Coerente	42
3.2.2 TDCM na presença de desordem	44
3.2.3 Problema de uma impureza assimétrico	46
3.3 Incluindo efeitos de localização de Anderson	49
3.3.1 Localização de Anderson	49
3.3.2 Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística	53
4 Modelo de Hubbard: resultados	57
4.1 Energia renormalizada	58
4.1.1 Comparação com resultados de Monte Carlo quântico	59
4.2 Taxa de espalhamento	64
4.3 Massa efetiva dos elétrons de condução	69
5 Férmions pesados: resultados	71
5.1 Resultados para uma temperatura fixa	71
5.2 Dependência com a temperatura	81

<i>SUMÁRIO</i>	xiii
Conclusões	88
Referências bibliográficas	91
A Alguns resultados no caso limpo	97

Introdução

A área de investigação em que o assunto desta tese se insere é a de sistemas fortemente correlacionados, ou seja, sistemas em que a energia referente à interação elétron-elétron é comparável a ou domina sobre a energia cinética. O interesse por essa classe de sistemas teve início nos anos 1960, motivado por resultados experimentais em amostras de óxidos de metais de transição. Nesses compostos, ocorre uma competição entre o caráter localizado e o caráter itinerante dos elétrons que ocupam camadas d ou f incompletas, o que pode levar a uma transição metal-isolante de Mott [1].

Os tratamentos teóricos capazes de incorporar a interação elétron-elétron na descrição dos sistemas de muitos corpos não são nada fáceis. Por mais simples que seja o modelo, como o de Hubbard, a obtenção de sua solução para o estudo das propriedades físicas do sistema não é trivial. Apenas em uma dimensão, os procedimentos teóricos disponíveis permitem um estudo exato e sistemático dos modelos. Em duas ou três dimensões, torna-se complicado saber com certeza total se um modelo é capaz de descrever um dado fenômeno físico ou se, por outro lado, uma predição teórica é verdadeira ou apenas reflete um artefato introduzido pela aproximação usada no método de resolução. Essas dificuldades têm origem na natureza não-perturbativa do problema, uma vez que, em geral, o termo de interação não é pequeno e não pode ser usado como um parâmetro (pequeno) numa expansão perturbativa.

Nesse contexto, várias aproximações têm sido discutidas na literatura. A idéia central dessas aproximações é considerar um limite em que o problema se torne mais simples e possa ser resolvido de maneira controlada. Efeitos que não estejam presentes nesse estágio da aproximação podem ser incluídos a partir de expansões em torno desse limite. Soluções numéricas dos modelos, usando, por exemplo, o método de diagonalização exata ou Monte Carlo quântico, podem também ser realizadas.

No entanto, limitações são encontradas em ambos os métodos: um crescimento exponencial do esforço computacional com o tamanho do sistema, no caso da diagonalização exata, e a restrição a temperaturas altas, no caso do método de Monte Carlo quântico.

O limite que é considerado nesta tese para a solução dos sistemas correlacionados é o de dimensão infinita, considerado nos trabalhos de W. Metzner e D. Vollhardt [2] e de A. Georges e G. Kotliar [3]. A formulação do problema de muitos corpos nesse limite deu origem a uma teoria de campo médio, conhecida como Teoria Dinâmica de Campo Médio (TDCM) e que é similar à teoria de campo médio de Weiss, para sistemas de spin. A idéia central da teoria é o mapeamento do problema da rede num problema de uma única impureza, localizada num dos sítios da rede e embebida num meio efetivo determinado autoconsistentemente. Dessa maneira, o problema recai na solução do problema de uma impureza, que pode ser obtida usando diferentes métodos, todos bastante discutidos na literatura.

Os sistemas de nosso interesse são, além de fortemente correlacionados, desordenados. A solução, usando a TDCM, de um modelo teórico que inclui desordem em um dos seus parâmetros corresponde a tratar a desordem no mesmo nível da Aproximação do Potencial Coerente (CPA, do inglês “Coherent Potential Approximation”). Isso porque ambas se tornam exatas em dimensão infinita. A presença de desordem num sistema pode levá-lo a uma transição de localização de Anderson [4]. A TDCM, no entanto, por ser uma teoria de campo médio, em que as flutuações espaciais estão congeladas, não permite a descrição dos efeitos de localização. A Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística (TDCME) [5] é uma extensão da TDCM para coordenação finita, que permite considerar, na solução de modelos para sistemas desordenados correlacionados, tanto a interação elétron-elétron como efeitos de localização de Anderson. Na presença de desordem, a solução do problema da rede, dentro da TDCM ou da TDCME, é mapeada não mais num único problema de uma impureza, mas em vários desses problemas. O próximo passo então é definir como resolver esses problemas de uma impureza.

De acordo com o título desta tese, nosso objetivo é incluir e analisar os efeitos de interação e temperatura finitas nos modelos de nosso interesse. Para isso, os problemas de uma impureza são resolvidos usando teoria de perturbação até segunda ordem no potencial de interação elétron-elétron, U . Além disso, o cálculo é feito a temperatura finita, no eixo de Matsubara. A solução para o problema de uma

impureza usando teoria de perturbação em U , para o caso em que existe simetria partícula-buraco, foi bastante explorada por K. Yamada e K. Yosida [6, 7, 8]. Na presença de desordem, no entanto, muitos dos problemas de uma impureza são assimétricos. Uma proposta de solução para o problema de uma impureza assimétrico, restrita a temperatura nula, foi feita por H. Kajueter e G. Kotliar [9]. Algumas alternativas para a solução do problema a temperatura finita foram consideradas por M. Potthoff *et al.* [10]. Apesar da existência desses trabalhos na literatura, chegar à conclusão de qual ou quais são os melhores métodos de solução do problema assimétrico a temperatura finita foi uma das etapas mais difíceis deste trabalho de tese. Por fim, utilizamos duas alternativas um pouco diferentes, como discutido num dos capítulos que se seguem.

Dada uma introdução de como tratamos a interação e a desordem presentes nos sistemas de nosso interesse, discutamos com mais detalhes quais são esses sistemas. Trabalhamos com dois tipos de sistemas físicos diferentes: sistemas que apresentam uma transição metal-isolante e sistemas de férmions pesados. Para descrever cada um deles, usamos modelos diferentes: o modelo de Hubbard, no primeiro caso, e o modelo da rede de Anderson, no segundo. Dessa maneira, esta tese pode ser dividida em duas partes, o elo comum entre elas sendo o método de resolução dos modelos (embora efeitos de localização estejam presentes apenas na solução do modelo da rede de Anderson).

Os resultados experimentais que motivaram nosso estudo dos sistemas que apresentam uma transição metal-isolante foram medidas realizadas em sistemas de elétrons bidimensionais, fracamente desordenados e diluídos, em particular MOSFET's (do inglês “metal-oxide-semiconductor field effect transistors”) e semicondutores dopados. Quando esses resultados começaram a aparecer, acreditava-se, com base na Teoria de Escala da Localização [11], que a existência de fase metálica em sistemas bidimensionais não era possível. Nos anos 1990, estudos sistemáticos da dependência da resistividade com a temperatura, nos sistemas bidimensionais citados acima, mostraram que um comportamento metálico é observado até as temperaturas mais baixas acessíveis experimentalmente [12]. Além disso, uma transição metal-isolante é observada à medida que a densidade de elétrons do sistema diminui. Além da transição metal-isolante induzida pela desordem (transição de localização de Anderson [4]), mencionada anteriormente, a interação elétron-elétron também pode levar o sistema a passar por uma transição metal-isolante. Nesse

caso, a transição é dita de Mott [1], que foi quem deu os primeiros passos no entendimento de como a interação elétron-elétron poderia explicar a fase isolante, ou Mott-Hubbard [13, 14, 15]. Medidas experimentais recentes realizadas em MOSFET's de silício e heterojunções de GaAs/AlGaAs dopadas com buracos confirmam a idéia de que é a interação elétron-elétron a responsável pela transição metal-isolante nesses sistemas. Do ponto de vista teórico, a transição metal-isolante de Mott pode ser descrita pelo modelo de Hubbard, cujo Hamiltoniano possui dois termos, um que descreve a energia cinética dos elétrons (de condução) e outro que descreve a interação entre dois elétrons quando estes ocupam o mesmo sítio da rede. Na ausência de desordem, a temperatura nula, a transição metal-isolante se dá à medida que o potencial de interação, U , aumenta. Para U pequeno, a densidade de estados do sistema apresenta uma única banda de energia em torno de zero. Para U acima de um valor crítico, a densidade de estados passa a apresentar um “gap” entre duas bandas de energia, localizadas em torno de $-U/2$ e $U/2$ e chamadas de bandas de Hubbard inferior e superior, respectivamente. Tendo como motivação os resultados experimentais de observação de uma fase metálica em sistemas bidimensionais, uma das partes desta tese constitui-se da resolução do modelo de Hubbard na presença de desordem, na fase metálica, usando a TDCM.

O outro sistema de nosso interesse são os férmions pesados, compostos formados por íons de terras raras ou actínídeos e que são assim chamados por terem, na descrição da teoria do líquido de Fermi de Landau [16], massas efetivas da ordem de cem vezes, ou mais, a massa do elétron. Embora muitos dos compostos de férmions pesados possam ser descritos dentro dessa teoria, vários deles apresentam um comportamento que difere do previsto por ela. Segundo a teoria do líquido de Fermi, a susceptibilidade magnética, $\chi(T)$, e o calor específico dividido pela temperatura, $C(T)/T$, tendem a uma constante no limite em que $T \rightarrow 0$. Com relação ao transporte, o comportamento previsto para a resistividade em função da temperatura é dado por $\rho(T) = \rho_0 + AT^2$, onde ρ_0 é uma resistividade residual extrínseca e $A > 0$. No caso dos compostos que apresentam um comportamento designado como não-líquido de Fermi, $\chi(T)$ e $C(T)/T$ divergem de forma logarítmica ou como lei de potência quando $T \rightarrow 0$ e $\rho(T)$ varia linearmente com T [17]. No caso de *ligas* de férmions pesados, a origem do comportamento não-líquido de Fermi pode estar na presença de desordem substitucional. Nesse sentido, um modelo fenomenológico foi proposto por O. O. Bernal *et al.* [18] para explicar as medidas realizadas em amos-

tras de $\text{UCu}_{5-x}\text{Pd}_x$. Por terem em sua composição íons de terras raras ou actinídeos, a estrutura eletrônica dos férmions pesados apresenta camadas f incompletas, que dão origem a momentos magnéticos localizados. Um modelo microscópico capaz de descrever os férmions pesados é então o modelo da rede de Anderson. Nesse modelo, dois tipos de elétrons estão presentes, elétrons de condução e elétrons localizados ou tipo f . Além dos termos de energia cinética dos elétrons de condução e de energia local dos elétrons tipo f , o modelo tem ainda um termo de hibridização entre estados estendidos e estados localizados e outro devido à interação elétron-elétron. Este último é do mesmo tipo do considerado no modelo de Hubbard, mas está presente apenas para elétrons tipo f . No caso do $\text{UCu}_{5-x}\text{Pd}_x$, por exemplo, os elétrons tipo f correspondem aos íons de U, que é um actinídeo, e os elétrons de condução representam os íons de Cu e Pd. O composto limpo é o UCu_5 e a substituição de íons de Cu por íons de Pd introduz desordem no sistema. No modelo microscópico, essa desordem pode ser descrita, por exemplo, por uma distribuição do potencial de hibridização entre estados estendidos e estados localizados e/ou por uma distribuição da energia diagonal dos elétrons de condução. No cálculo microscópico que é parte desta tese, resolvemos o modelo da rede de Anderson na presença de desordem, usando a TDCME, capaz de incorporar efeitos de localização de Anderson.

Como dissemos anteriormente, excetuando-se o método de resolução dos modelos, esta tese pode ser dividida em duas partes, uma que se refere a sistemas que podem ser descritos pelo modelo de Hubbard e outra em que é o modelo da rede de Anderson que deve ser usado. Assim, a tese possui cinco capítulos, dois introdutórios, um para cada sistema de interesse, o capítulo central, sobre o método de resolução dos dois modelos, e mais dois capítulos de discussão dos resultados, novamente, um para cada modelo. Mais detalhadamente, a organização da tese é a seguinte.

- No Capítulo 1, apresentamos e discutimos alguns resultados experimentais que evidenciam a transição metal-isolante e outros obtidos particularmente na região de densidades de elétrons correspondente à fase metálica, todos eles observados em sistemas bidimensionais, fracamente desordenados e diluídos.
- O Capítulo 2 é dedicado ao comportamento não-líquido de Fermi observado em férmions pesados. Apresentamos e discutimos medidas experimentais características desse comportamento, bem como discutimos o modelo de desordem Kondo, que é o modelo fenomenológico citado acima.

- O Capítulo 3 contém a descrição dos métodos de resolução utilizados tanto para o modelo de Hubbard como para o modelo da rede de Anderson. Neste capítulo, discutimos a Teoria Dinâmica de Campo Médio, o problema de uma impureza assimétrico a temperatura finita, o problema da localização de Anderson e a Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística.
- No Capítulo 4, são discutidos os resultados obtidos por nós pela resolução do modelo de Hubbard, usando a TDCM, no que corresponde à fase metálica anterior (ou seguinte) à transição de Mott. Nossos resultados são analisados à luz dos resultados experimentais do Capítulo 1, levando-nos a importantes conclusões.
- O Capítulo 5 refere-se aos resultados obtidos resolvendo o modelo da rede de Anderson, usando a TDCME, capaz de incorporar efeitos de localização de Anderson.

Para finalizar, são apresentadas as conclusões gerais deste trabalho de tese.

Capítulo 1

Transição metal-isolante

Discutimos, neste capítulo, o comportamento metálico e a transição metal-isolante observados experimentalmente em sistemas de elétrons ou buracos bidimensionais, fracamente desordenados e diluídos, a campo magnético nulo. Apresentamos o contexto teórico no momento em que esses resultados experimentais começaram a ser observados, bem como alguns desses resultados, que serviram de motivação para nosso trabalho.

Em 1958, P. W. Anderson considerou a presença de desordem *forte* num sistema de elétrons não-interagentes e mostrou que, nesse caso, a função de onda dos elétrons pode se tornar localizada [4]. Quando a localização ocorre, o envelope da função de onda dos elétrons decai exponencialmente a partir de algum ponto do espaço, ou seja,

$$|\Psi(\vec{r})| \approx \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_0|/\xi), \quad (1.1)$$

onde ξ é o comprimento de localização. Detalhes de como a presença de desordem leva à localização da função de onda são discutidos no Capítulo 3, na subseção *Localização de Anderson*.

Consideremos um sistema limpo, cuja densidade de estados forma uma banda de energia que corresponde a estados estendidos. Pelo mecanismo de localização de Anderson, ao introduzir desordem, os estados das bordas da banda são os que primeiro se localizam (uma vez que correspondem a “armadilhas” mais profundas no espectro de energia). A região central da banda continua sendo de estados estendidos e encontra-se separada das regiões de estados localizados pelas chamadas bordas de mobilidade. À medida que a desordem aumenta, as bordas de mobilidade se movem

para o centro da banda, até que todos os estados estendidos desapareçam. Por outro lado, para uma desordem fixa, se o potencial químico é variado, o sistema pode também apresentar uma transição metal-isolante.

Em uma dimensão, pode-se mostrar rigorosamente que todos os estados são localizados, por menor que seja a desordem [19, 20]. Por outro lado, a existência ou não de estados estendidos em duas dimensões tem sido objeto de estudo de muitos trabalhos. Num artigo de 1979, E. Abrahams *et al.* mostraram que, no caso de sistemas de elétrons *não-interagentes*, em *duas dimensões*, qualquer desordem, por menor que seja, também é suficiente para localizar os elétrons [11]. A teoria de E. Abrahams *et al.*, conhecida como Teoria de Escala da Localização, foi desenvolvida após as formulações iniciais de Thouless e colaboradores para a descrição do problema da localização usando teoria de escala e baseia-se no comportamento da condutância em função do “tamanho do sistema”, como revisado na referência [21]. Com relação a sistemas bidimensionais, a principal conclusão do trabalho é que um comportamento verdadeiramente metálico não pode ocorrer a temperatura e campo magnético nulos.

No entanto, de acordo com o recente artigo de revisão de E. Abrahams *et al.* [12], tanto resultados experimentais como teóricos vêm apontando para a presença de uma fase metálica, em que a resistividade decresce com a diminuição da temperatura, e a possibilidade de uma transição metal-isolante em sistemas bidimensionais. Nos anos 1990, estudos sistemáticos da dependência da resistividade com a temperatura em sistemas bidimensionais, fracamente desordenados e diluídos, mostraram que um comportamento metálico é observado até as temperaturas mais baixas acessíveis experimentalmente. Isso ocorre para densidades de elétrons ou buracos acima de uma densidade crítica, n_c . Abaixo de n_c , o comportamento é característico de um isolante, sugerindo que uma transição metal-isolante ocorre em duas dimensões. Além disso, a aplicação de um campo magnético de poucos teslas, em qualquer direção, suprime o comportamento metálico.

O comportamento metálico descrito acima é observado em amostras de MOS-FET's (do inglês “metal-oxide-semiconductor field effect transistors”) de silício e em diversos tipos de heterojunções de semicondutores dopadas, como p -SiGe, p -GaAs/AlGaAs, n -AlAs e n -GaAs/AlGaAs, onde p significa sistemas bidimensionais de buracos e n , de elétrons. Uma revisão desses resultados experimentais pode ser encontrada na referência [12]. A seguir, restringimo-nos aos resultados para os

MOSFET's de Si, em que o comportamento metálico é mais pronunciado.

O crescimento de amostras de MOSFET's de Si de alta qualidade, em que a mobilidade dos elétrons é alta, permite o estudo de sistemas bidimensionais diluídos, com densidades de elétrons, n_s , abaixo de 10^{11} cm^{-2} . Para esses valores de densidade, a interação elétron-elétron é dominante quando comparada à energia de Fermi. Estimativas para MOSFET's de Si com $n_s = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ dão [12]

$$E_{e-e} \approx \frac{e^2}{2\epsilon}(\pi n_s)^{1/2} \approx 5 \text{ meV}, \quad (1.2)$$

enquanto

$$E_F = \frac{\pi \hbar^2 n_s}{2m_b} \approx 0.58 \text{ meV}, \quad (1.3)$$

onde e é a carga do elétron, ϵ é a constante dielétrica, E_{e-e} é a energia de interação elétron-elétron, E_F é a energia de Fermi e m_b é a massa efetiva do elétron na banda. Ou seja, para essas amostras, a razão adimensional $r_s = E_{e-e}/E_F$ é da ordem de 10. Espera-se que um sistema de elétrons bidimensional forme um cristal de Wigner num regime muito diluído, em que r_s é da ordem de 37 [22]. Assim, sistemas bidimensionais com $r_s \approx 10$ podem ser considerados líquidos fortemente correlacionados e a Teoria de Escala da Localização [11], desenvolvida, como vimos, para sistemas de elétrons não-interagentes, não deve ter validade nesses casos.

A Figura 1.1 mostra a dependência da resistividade com a temperatura, T , para amostras de MOSFET's de Si [23, 24]. Na figura principal, a linha tracejada corresponde à separatriz, em que a densidade de elétrons é igual a n_c . A extrapolação dessa linha para temperaturas baixas dá um valor de $3h/e^2$ para a resistividade. Para densidades abaixo de n_c , o comportamento é isolante e a resistividade aumenta à medida que T diminui, divergindo no limite em que $T \rightarrow 0$. Para densidades acima de n_c , o comportamento é metálico, a resistividade diminui à medida que T decresce e nenhuma mudança nessa tendência pode ser observada até a temperatura mais baixa medida. Além disso, para densidades apenas um pouco maiores que n_c , o comportamento é não-monotônico: a resistividade aumenta lentamente à medida que T diminui, para T acima de $T^* \approx 2 \text{ K}$, e então decresce à medida que T continua a diminuir, para $T < T^*$. O “inset” mostra os resultados para uma outra amostra, na região próxima à separatriz. Para a densidade de elétrons crítica, $n_c = 9.02 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, a resistividade é praticamente independente da temperatura. Uma mudança de apenas 3% na densidade de elétrons faz com que a resistividade se

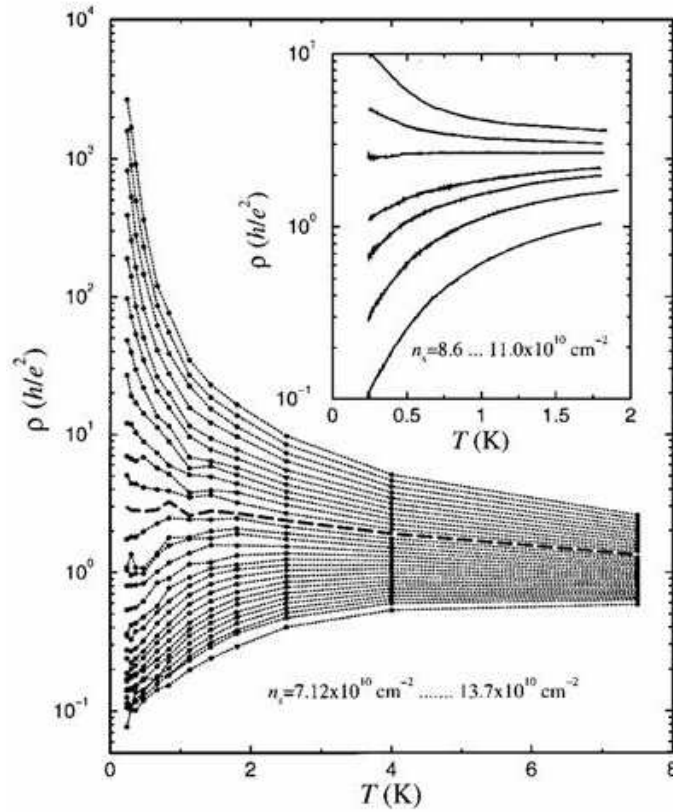


Figura 1.1: Resistividade em função da temperatura para um sistema bidimensional de elétrons, fracamente desordenado e diluído, formado num MOSFET de Si, para diferentes densidades de elétrons, n_s . Resultado reproduzido da referência [23]. O “inset” mostra os resultados para uma outra amostra, próximo à região da separatriz, e foi reproduzido da referência [24].

torne fortemente metálica ou isolante. Além disso, um decréscimo de aproximadamente uma ordem de grandeza na resistividade pode ser observado na fase metálica. Outra observação é que o valor da resistividade na separatriz é aproximadamente o mesmo medido, no limite de baixas temperaturas, na figura principal.

A Figura 1.2 mostra que as curvas de resistividade para diferentes amostras de MOSFET's de Si podem ser escaladas com a temperatura [23]. O parâmetro de escala T_0 , que depende de n_s , é determinado de tal maneira que as diferentes curvas de resistividade caiam umas sobre as outras, após serem escaladas. A resistividade segue então uma função do tipo

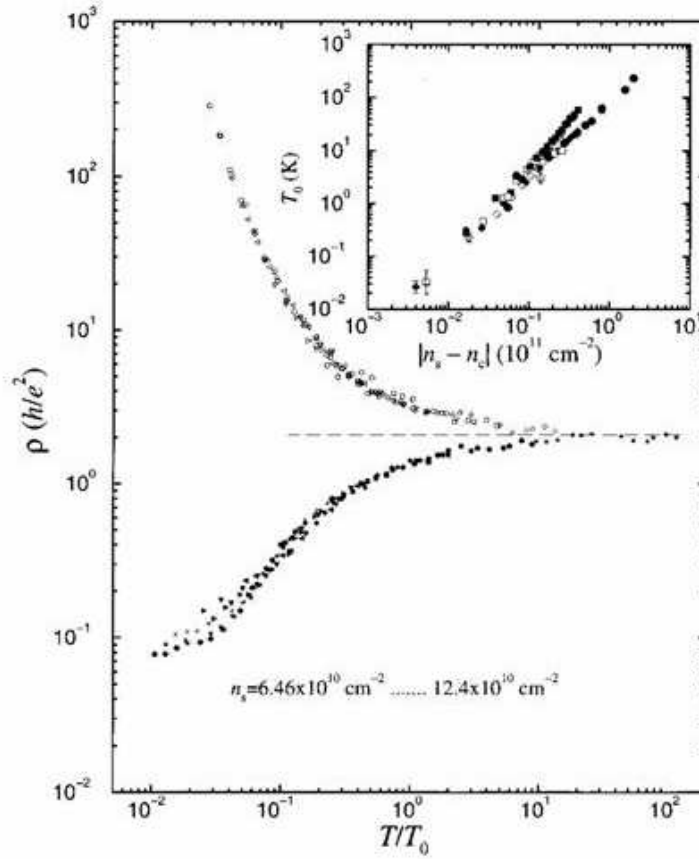


Figura 1.2: Resistividade em função de T/T_0 , com T_0 sendo determinado de maneira que as curvas caiam umas sobre as outras. O “inset” mostra o parâmetro de escala, T_0 , em função do desvio da densidade de elétrons em relação a n_c , $|n_s - n_c|$. Resultados obtidos para três amostras de MOSFET’s de Si diferentes. Símbolos sem preenchimento correspondem à fase isolante, enquanto símbolos preenchidos correspondem à fase metálica. Resultados reproduzidos da referência [23].

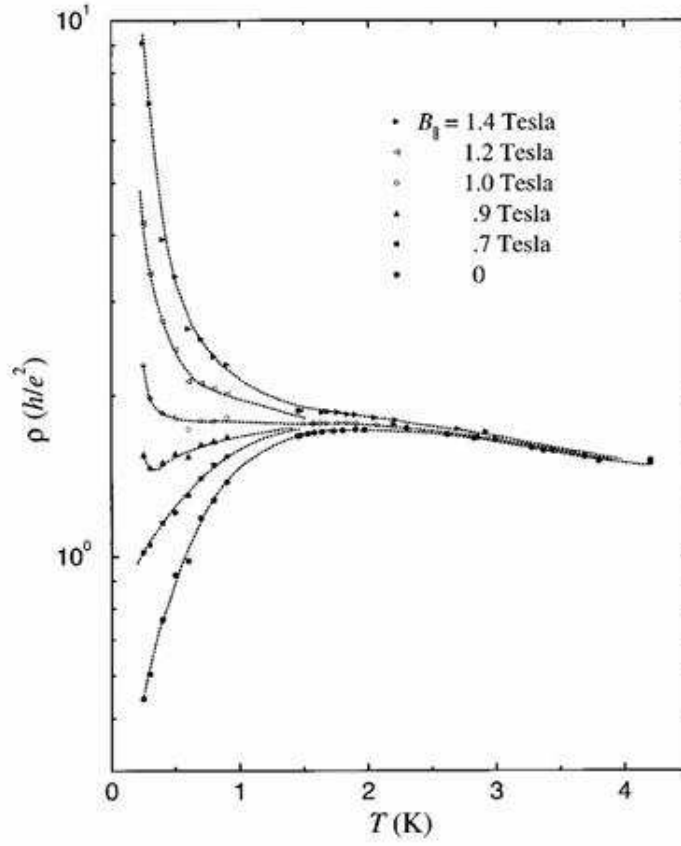


Figura 1.3: Resistividade em função da temperatura para diferentes valores do campo magnético externo aplicado paralelamente ao plano do MOSFET de Si. A densidade de elétrons é $n_s = 8.83 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Resultado reproduzido da referência [25].

$$\rho(T, n_s) = \rho_c f_1[T/T_0(n_s)], \quad (1.4)$$

onde ρ_c é o valor da resistividade quando $T \rightarrow 0$, na densidade crítica. Como podemos observar na figura, as curvas caem sobre dois “ramos” distintos, um para a fase metálica e outro para a fase isolante. O “inset” apresenta T_0 em função de $|n_s - n_c|$ para os resultados nas duas fases. É interessante notar que a dependência de T_0 com $\delta_n = (n_s - n_c)$ segue uma lei de potência, $T_0 \propto |\delta_n|^b$, e um mesmo valor de $b = 1.6 \pm 0.1$ é encontrado para três amostras diferentes, nas duas fases. Além disso, após escalada, a resistividade num dos lados da transição é simétrica em relação ao inverso da resistividade no outro lado, ou seja, $\rho^*(n_s - n_c, T) = 1/\rho^*(n_c - n_s, T)$,

onde $\rho^* = \rho/\rho_c$.

A Figura 1.3 mostra a dependência da resistividade com a temperatura para um valor fixo da densidade de elétrons e diferentes valores do campo magnético externo, aplicado paralelamente ao sistema de elétrons bidimensional [25]. A campo magnético nulo, para a densidade de elétrons em questão, a resistividade apresenta um fraco comportamento isolante para $T > T^* \approx 2$ K, mas decresce rapidamente à medida que T diminui para $T < T^*$. Um campo magnético pequeno, de apenas 1.4 tesla, suprime o comportamento metálico e faz com que a resistividade apresente um comportamento típico de um isolante, para todo o intervalo de temperatura considerado. O efeito do campo magnético, no entanto, é praticamente nulo para $T > T^*$.

Sistemas de elétrons interagentes podem ser tratados dentro da teoria do líquido de Fermi de Landau, em que as excitações de um sistema interagente são mapeadas naquelas de um gás de elétrons [16]. Nesse processo, os parâmetros do sistema, incluindo a massa efetiva, m , e o fator g de Landé, são renormalizados. Medidas da magnetoresistência realizadas em amostras de MOSFET's de Si, na presença de um campo magnético aplicado paralelamente ao plano do MOSFET, mostram que o produto gm apresenta um forte aumento à medida que a densidade de elétrons diminui, na fase metálica [26]. Esses resultados são confirmados pela análise das oscilações de Shubnikov-de Hass em MOSFET's de Si [27, 28] e também por medidas da susceptibilidade de spin em heterojunções de n -GaAs/AlGaAs [29].

Recentemente, resultados para a massa efetiva e o fator g de Landé em função da densidade de elétrons num MOSFET de Si foram obtidos por A. A. Shashkin *et al.* [30, 31] de duas maneiras diferentes e estão apresentados na Figura 1.4. A figura principal mostra os resultados obtidos a partir de medidas da magnetoresistência na presença de um campo magnético paralelo ao plano do MOSFET, a temperatura baixa, de medidas da dependência da resistividade com a temperatura a campo magnético nulo e da aplicação da teoria da referência [32]. O “inset” compara os resultados para a massa efetiva obtidos dessa primeira maneira com aqueles obtidos a partir da análise de medidas das oscilações de Shubnikov-de Haas. A concordância entre eles dá confiabilidade aos resultados, uma vez que ambos foram obtidos de maneira indireta. Tanto a figura principal quanto o “inset” mostram que é a massa efetiva que apresenta um forte aumento à medida que se se aproxima da transição metal-isolante, a partir da fase metálica. O fator g se mantém pratica-

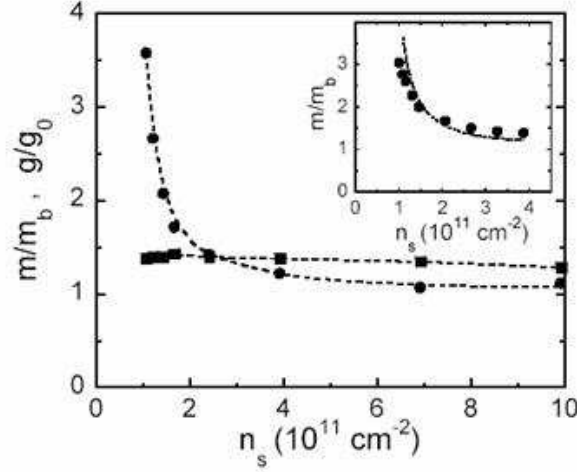


Figura 1.4: Massa efetiva (círculos) e fator g de Landé (quadrados) em função da densidade de elétrons para uma amostra de MOSFET de Si de alta mobilidade. A figura principal mostra os resultados determinados a partir de medidas da magnetoresistência na presença de um campo magnético paralelo ao sistema de elétrons bidimensional, a temperatura baixa, e de medidas da dependência da resistividade com a temperatura a campo magnético nulo. As linhas tracejadas são guias para os olhos. Resultado reproduzido da referência [30]. O “inset” mostra os resultados obtidos para a massa efetiva a partir da análise das oscilações de Shubnikov-de Haas (círculos) e também os resultados da figura principal (linha pontilhada). Resultado reproduzido da referência [31]. m_b é a massa efetiva da banda de condução, igual a $0.19m_e$, onde m_e é a massa do elétron livre, e $g_0 = 2$ é o fator g num material de silício “bulk”.

mente constante. Do ponto de vista teórico, uma proposta baseada num método de função de onda tentativa mostrou dar resultados em muito bom acordo com os experimentos [33].

Para sistemas de elétrons não-interagentes, no limite de desordem baixa, a teoria de localização fraca [21] dá as primeiras correções perturbativas para a condutividade prevista pela teoria de transporte de Boltzmann, usada na análise da Teoria de Escala da Localização [11]. Ao incorporar essas correções, à medida que o “tamanho do sistema” aumenta, a condutividade cresce mais lentamente do que o previsto pela lei de Ohm. Esse comportamento é resultado da interferência construtiva entre caminhos percorridos pelos elétrons em sentidos opostos (“backscattering” coerente). Porém, na presença de um campo magnético, fases opostas correspondem a esses caminhos percorridos em sentidos contrários, o que dá origem a uma interferência destrutiva. Dessa maneira, a teoria de localização fraca prevê uma magnetoresistência negativa para sistemas não-interagentes.

Um trabalho experimental recente concluiu que, próximo à transição metal-isolante, as correções da teoria de localização fraca se tornam menores, chegando a desaparecer completamente na vizinhança da densidade crítica [34]. A Figura 1.5 mostra os resultados para a magnetoresistência em função do campo magnético perpendicular ao plano do sistema de elétrons, para diferentes densidades de elétrons, a $T = 42$ mK. As medidas foram realizadas numa amostra de MOSFET de Si, em que a densidade crítica é $n_c = 0.82 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Para densidades mais altas, $n_s = 0.9$ a $1.22 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (seis curvas inferiores na figura), a magnetoresistência negativa, prevista pela teoria de localização fraca, é observada para campos magnéticos abaixo de aproximadamente 0.15 tesla. À medida que a transição metal-isolante se aproxima, a magnetoresistência negativa se torna gradativamente menor e, para $n_s < 0.84 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, ela não é mais observada. Resultados experimentais semelhantes foram obtidos anteriormente em heterojunções de p -GaAs/AlGaAs [35]. A supressão da localização fraca próximo à transição metal-isolante sugere que a transição é uma propriedade de um sistema bidimensional limpo [33].

A Figura 1.6 mostra a magnetocondutância em função do campo magnético perpendicular para dois dos valores da densidade de elétrons da figura anterior, (a) $n_s = 1.22 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e (b) $n_s = 0.853 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ [34]. Como na Figura 1.5, notamos que a magnetocondutividade positiva, prevista pela teoria de localização fraca, é suprimida na proximidade da transição metal-isolante [Figura 1.6 (b)]. Den-

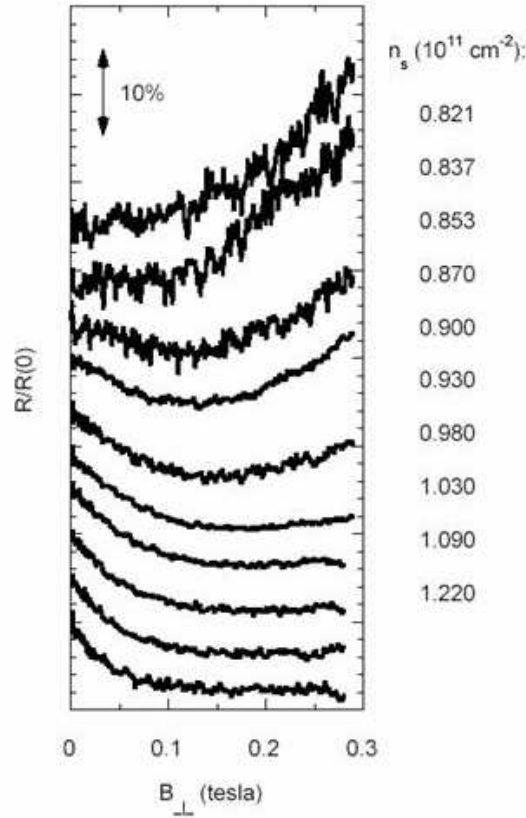


Figura 1.5: Magnetoresistência normalizada, $R(B_{\perp})/R(0)$, em função do campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano do sistema de elétrons numa amostra de MOSFET de Si, para diferentes densidades de elétrons, a $T = 42$ mK. As curvas foram deslocadas verticalmente para clareza na observação dos resultados. Resultado reproduzido da referência [34].

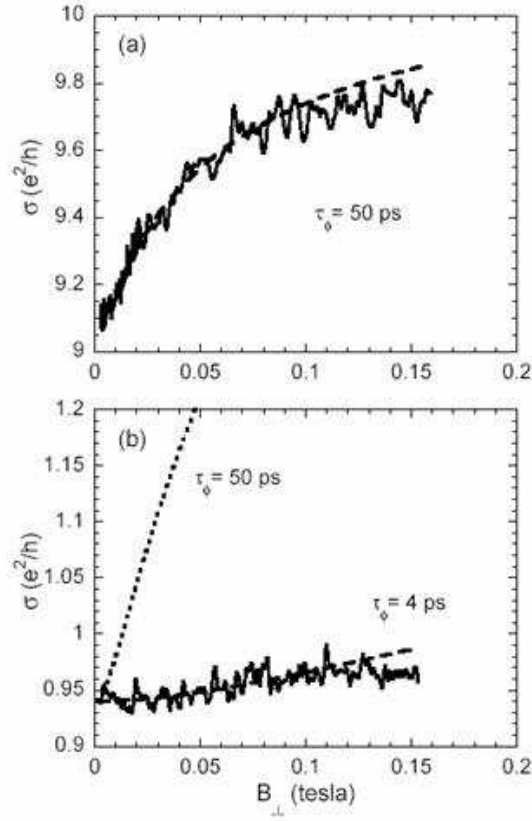


Figura 1.6: Magnetocondutância em função do campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano do sistema de elétrons numa amostra de MOSFET de Si, para (a) $n_s = 1.22 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e (b) $n_s = 0.853 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, a $T = 42 \text{ mK}$. As linhas tracejadas são ajustes à fórmula de Hikami-Larkin, que permite a determinação dos valores de τ_{ϕ} indicados. Em (b), a linha pontilhada mostra a magnetocondutância calculada para $\tau_{\phi} = 50 \text{ ps}$. Resultado reproduzido da referência [34].

tro dessa mesma teoria, considerando que o “tamanho do sistema” é proporcional ao tempo de vida inelástico dos elétrons, τ_ϕ , a fórmula de Hikami-Larkin dá a dependência da magnetocondutância com τ_ϕ e com o campo magnético. O ajuste dessa fórmula aos resultados experimentais determinou os seguintes valores para τ_ϕ : $\tau_\phi = 50$ ps, para a densidade de elétrons em (a), e $\tau_\phi = 4$ ps, para (b). Portanto, à medida que a densidade de elétrons diminui em direção à transição metal-isolante, o tempo de vida inelástico também diminui ¹.

Do ponto de vista teórico, a primeira proposta de existência possível da fase metálica em duas dimensões foi feita por A. M. Finkelstein [37]. Nesse trabalho, os efeitos de interação e desordem são estudados por um método de grupo de renormalização perturbativo, que tem como base a teoria do líquido de Fermi. Os resultados são válidos no limite difusivo, $T \ll \tau^{-1}$, onde τ^{-1} é a taxa de espalhamento elástica clássica. A região balística, em que $T \gg \tau^{-1}$, foi objeto de estudo dos trabalhos de A. Gold e V. T. Dolgoplov [38] e S. Das Sarma e E. H. Hwang [39]. Num trabalho mais recente, G. Zala *et al.* [32] consideram a região intermediária de temperaturas e apontam uma mesma razão física para o comportamento da condutividade nas três regiões: o espalhamento elástico dos elétrons pelo potencial autoconsistente gerado pelos demais elétrons. Nenhuma dessas teorias leva em consideração efeitos inelásticos.

¹Embora essa análise esteja presente na primeira versão do artigo [34], única disponível quando esta tese foi defendida, na versão publicada do trabalho [36], os autores apresentam um outro modo de ajuste dos resultados experimentais, que leva a conclusões distintas das discutidas aqui.

Capítulo 2

Férmions pesados

Neste capítulo, discutimos o comportamento não-líquido de Fermi observado experimentalmente em várias ligas de férmions pesados (FP) e que serviu como motivação para nosso trabalho. Apresentamos medidas características desse comportamento, bem como discutimos possíveis explicações para ele.

Muitos dos compostos de FP são descritos dentro da teoria do líquido de Fermi de Landau [16]. Segundo essa teoria, a susceptibilidade magnética, $\chi(T)$, e o calor específico dividido pela temperatura, $C(T)/T$, tendem a uma constante no limite em que $T \rightarrow 0$. Com relação ao transporte, o comportamento previsto para a resistividade em função da temperatura é dado por $\rho(T) = \rho_0 + AT^2$, onde ρ_0 é uma resistividade residual extrínseca e $A > 0$. Vários compostos de FP, no entanto, apresentam um comportamento diferente do descrito acima e que é designado por comportamento não-líquido de Fermi (NLF). Nesse caso, $\chi(T)$ e $C(T)/T$ divergem de forma logarítmica ou como lei de potência quando $T \rightarrow 0$ e $\rho(T)$ varia linearmente com T [17]. O comportamento NLF é observado para determinadas concentrações dos elementos químicos que constituem os compostos ou para determinados valores dos parâmetros externos, como pressão ou campo magnético.

Diferentes teorias foram propostas como explicações para o comportamento NLF, sendo cada uma delas válida para tipos diferentes de FP. De acordo com o recente artigo de revisão de G. R. Stewart [17], essas teorias podem ser divididas em três categorias gerais: (1) modelos Kondo multicanais [40, 41], (2) modelos baseados na proximidade de uma transição magnética, que tem uma temperatura de ordenamento próxima de 0 K (ponto crítico quântico) [42, 43, 44, 45, 46], e (3) modelos baseados na presença de desordem [18, 47, 48]. No primeiro caso, o desafio é estender

Composto	$\rho(T)$	$C(T)/T$	$\chi(T)$
UCu _{5-x} Pd _x *	$\rho_0 - AT$	$a \ln(T_0/T)$ ou $aT^{-1+\lambda}$	$a \ln(T_0/T)$ ou $aT^{-1+\lambda}$
La _{0.9} Ce _{0.1} Cu ₂ Si ₂	$\rho_0 - AT$	$a \ln(T_0/T)$	$a \ln(T_0/T)$
Ce _{1-x} Th _x RhSb **	—	$a \ln(T_0/T)$ ou $aT^{-1+\lambda}$	—
U _{0.07} Th _{0.93} Ru ₂ Si ₂	$\rho_0 + A \ln T$	$a \ln(T_0/T)$	$a \ln(T_0/T)$ ou $aT^{-1+\lambda}$

Tabela 2.1: Exemplos de ligas desordenadas de férmions pesados que exibem comportamento NLF. $A, a > 0$ e $\lambda < 1$; * $x = 1$ e $x = 1.5$; ** $x = 0.2 - 0.4$.

Tabela construída a partir da referência [17].

o tratamento válido no limite diluído para o problema de uma rede. Um exemplo de composto descrito dentro dessa teoria é o UBe₁₃ [41]. Exemplos de compostos que se encaixam no segundo caso são:

1. CeCu_{6-x}Au_x, que apresenta-se numa fase antiferromagnética (AF) para $x > 0.1$. Para $x = 0.1$, a temperatura de Néel, T_N , anula-se, o comportamento do sistema passa a ser dominado pelo ponto crítico quântico e a resistividade se comporta como $\rho(T) \approx \rho_0 + AT$, $A > 0$ [49].
2. CePd₂Si₂, que apresenta-se numa fase AF quando a pressão externa aplicada, P , é inferior a 28 kbar. Para $P = 28$ kbar, T_N se anula e a resistividade se comporta como $\rho(T) \approx \rho_0 + BT^{1.2}$, $B > 0$ [50].
3. CeIn₃, que apresenta-se numa fase AF a pressão ambiente para $T < 10.1$ K. Para $P = 26$ kbar, a fase AF é destruída e, para $P = 29$ kbar, a resistividade se comporta como $\rho = \rho_0 + AT^\alpha$, onde $\alpha = 1.6$ a $T = 3$ K e $\alpha = 0.8$ a $T = 25$ K. O comportamento passa a ser o característico de um líquido de Fermi quando a pressão externa é superior a $P_c = 30$ kbar [51].
4. YbRh₂Si₂, que apresenta um comportamento NLF (a resistividade varia linearmente com T , enquanto $C(T)/T$ tem uma dependência logarítmica) a pressão ambiente para $T < 10$ K, com evidências de uma fase AF a uma temperatura da ordem de 65 mK [52].

Exemplos de compostos em que a desordem desempenha um papel dominante no aparecimento do comportamento NLF, juntamente com o comportamento obser-

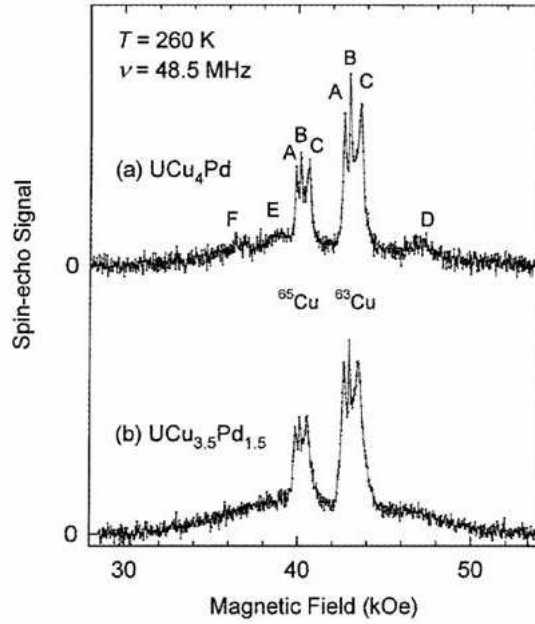


Figura 2.1: Espectro de NMR do cobre em amostras de $\text{UCu}_{5-x}\text{Pd}_x$, com (a) $x = 1.0$ e (b) $x = 1.5$, a $T = 260$ K. Os picos mais proeminentes representam as transições centrais dos isótopos mais abundantes do cobre, ^{63}Cu e ^{65}Cu . A e C são satélites presentes devido à amostra apresentar-se na forma de pó; B representa a contaminação por CuPd e D-F representam satélites de quadrupólo. Resultado reproduzido da referência [53].

vado, estão presentes na Tabela 2.1. Como nosso interesse está voltado para este último caso, restringimo-nos a ele a partir daqui.

A Figura 2.1 apresenta um espectro de Ressonância Magnética Nuclear (NMR, do inglês “Nuclear Magnetic Resonance”) do cobre para o primeiro composto da Tabela 2.1, $\text{UCu}_{5-x}\text{Pd}_x$, com $x = 1.0$ e $x = 1.5$ [53]. O cálculo dos deslocamentos Knight, a partir dos espectros de NMR para diferentes temperaturas, permite concluir que o alargamento não-homogêneo da linha de NMR é grande e depende fortemente da temperatura [18, 53]. Isso reflete a presença de uma distribuição larga da susceptibilidade local vista pelos íons de U ou, dito de outra maneira, isso sugere a presença de desordem nesses sistemas. Com base nesses resultados, O. O. Bernal *et al.* [18, 53] propuseram o modelo de desordem Kondo, em que a desordem desempenha um papel importante no aparecimento do comportamento NLF.

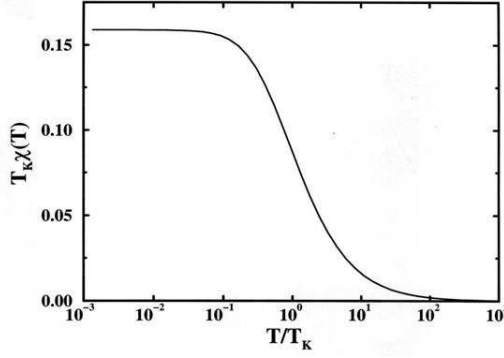


Figura 2.2: Susceptibilidade magnética em função da temperatura para o problema Kondo de uma única impureza (obtida exatamente usando o “Ansatz” de Bethe).

Segundo o modelo de desordem Kondo, as ligas de FP são descritas em termos de uma coleção de spins independentes acoplados a um banho de elétrons de condução. Os spins independentes representam os íons de U, enquanto os elétrons de condução correspondem aos íons de Cu e Pd. O Hamiltoniano da rede de Kondo desordenada pode ser usado para descrever o sistema e é dado por

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{i\alpha\beta} J_i \vec{S}_i \cdot \left(c_{i\alpha}^{\dagger} \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta} \right), \quad (2.1)$$

onde $c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger}$ ($c_{\vec{k}\sigma}$) cria (destrói) um elétron de condução com energia $\epsilon_{\vec{k}}$ e spin σ , $c_{i\sigma}^{\dagger}$ e $c_{i\sigma}$ são os operadores correspondentes aos anteriores no espaço direto, $\vec{S}_i$ representa um spin no sítio i , $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli e J_i é a constante de acoplamento entre um spin e o banho de elétrons de condução.

A larga distribuição da susceptibilidade local associada ao íon de U, que foi observada experimentalmente, sugere que a constante de acoplamento J_i siga uma distribuição $P(J)$. Por outro lado, cada problema de um único spin tem como temperatura característica a temperatura Kondo, dada por

$$T_K \cong E_F \exp \left(-\frac{1}{\rho_0 J} \right), \quad (2.2)$$

onde E_F é a energia de Fermi e ρ_0 é a densidade de estados dos elétrons de condução na superfície de Fermi. Dessa maneira, uma distribuição do parâmetro local J_i leva a uma distribuição da temperatura Kondo, $P(T_K)$. A susceptibilidade magnética do sistema, por exemplo, é então obtida pela média sobre $P(T_K)$ da resposta de

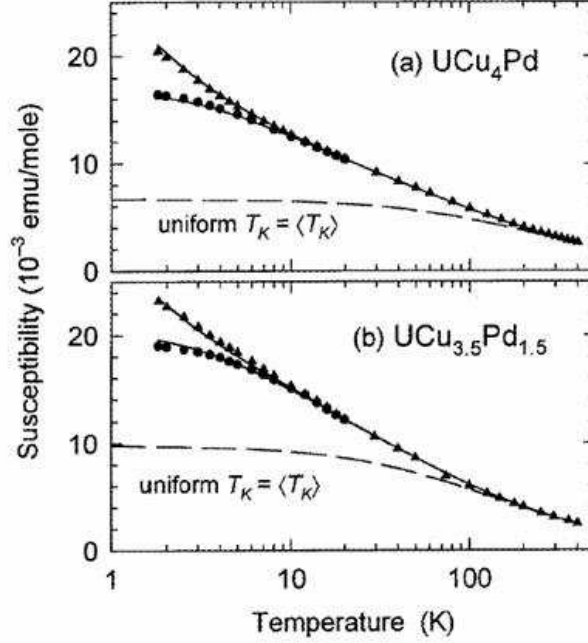


Figura 2.3: Susceptibilidade magnética em função da temperatura para o composto $\text{UCu}_{5-x}\text{Pd}_x$, com (a) $x = 1.0$ e (b) $x = 1.5$. Os símbolos correspondem aos resultados experimentais: triângulos para $H = 5\text{kOe}$ e círculos para $H = 50\text{kOe}$. As linhas contínuas correspondem aos ajustes para o modelo de desordem Kondo e as linhas tracejadas, a um único valor para $T_K = \langle T_K \rangle$. Resultado reproduzido da referência [53].

um único spin, uma vez que os spins são considerados independentes. A Figura 2.2 mostra a dependência com a temperatura da susceptibilidade magnética para um único spin. O comportamento é dado pela lei de Curie, $\chi(T) \approx 1/T$, para $T \gg T_K$ e tende a uma constante, $\chi(T) \approx 1/T_K$, quando $T \rightarrow 0$ e um estado singleto é formado entre o spin e os elétrons de condução, pelo efeito Kondo [54]. Assim, a susceptibilidade para cada spin é dada aproximadamente por [55]

$$\chi(T; T_K) = \frac{C}{T + aT_K}, \quad (2.3)$$

onde C e a são constantes e $a \approx 1$, e a resposta do sistema como um todo, dentro do modelo de desordem Kondo, é dada por

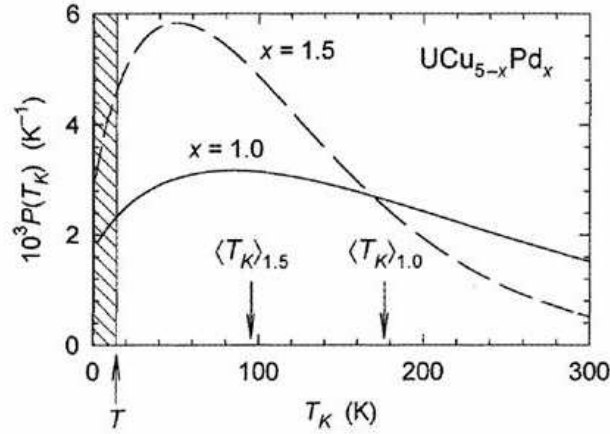


Figura 2.4: Distribuições de temperatura Kondo obtidas a partir dos ajustes da proposição do modelo de desordem Kondo aos resultados experimentais para a susceptibilidade magnética em função da temperatura e do campo magnético (Figura 2.3). Resultado reproduzido da referência [53].

$$\chi(T) = \int dT_K P(T_K) \frac{C}{T + aT_K}. \quad (2.4)$$

Nos trabalhos de O. O. Bernal *et al.* [18, 53], os resultados experimentais para a susceptibilidade magnética foram ajustados a uma função como a da eq. (2.4), supondo uma distribuição gaussiana para $P(J)$. Os resultados experimentais, bem como os ajustes realizados, são apresentados na Figura 2.3 para dois valores diferentes do campo magnético. A concordância é muito boa. A Figura 2.4 mostra as distribuições $P(T_K)$ obtidas com os ajustes aos resultados experimentais. O comportamento NLF é entendido a partir da seguinte análise. Dada a temperatura T em que se encontra a amostra, existem spins que possuem $T_K > T$, formando um singlete com o banho dos elétrons de condução, e outros que têm $T_K < T$, comportando-se como se fossem aproximadamente livres. Estes últimos têm uma contribuição dada pela lei de Curie e dominam a susceptibilidade do sistema no limite de baixas temperaturas, uma vez que a contribuição de cada um deles é divergente nesse limite. É essencial que a distribuição $P(T_K)$ não tenda a zero quando $T_K \rightarrow 0$, de tal forma que sempre existam spins que se comportem como praticamente livres. Nesse sentido, é importante notar a dependência exponencial de T_K

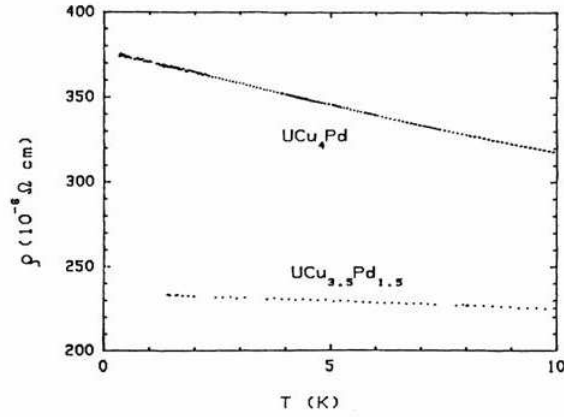


Figura 2.5: Resistividade em função da temperatura para os compostos UCu_4Pd e $\text{UCu}_{3.5}\text{Pd}_{1.5}$. Resultado reproduzido da referência [56].

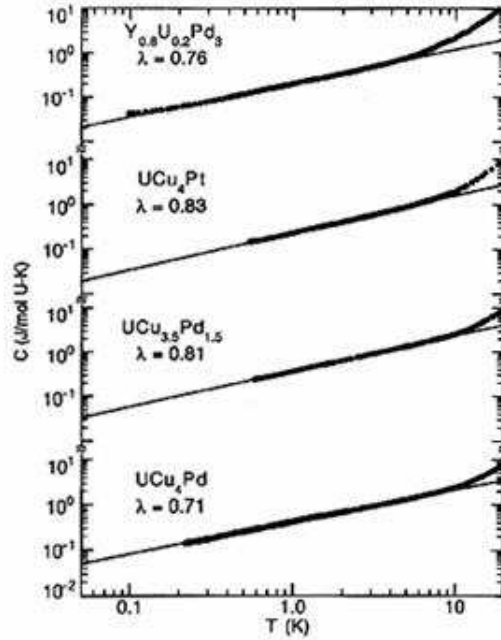


Figura 2.6: Calor específico em função da temperatura para os compostos UCu_4Pd e $\text{UCu}_{3.5}\text{Pd}_{1.5}$, entre outros. Os símbolos representam os resultados experimentais, enquanto as linhas contínuas representam ajustes à lei de potência $C(T)/T \propto T^{-1+\lambda}$. Resultado reproduzido da referência [57].

com J , conforme a eq. (2.2). Ela significa que, mesmo para uma distribuição estreita de J_i , a distribuição $P(T_K)$ correspondente é larga, podendo se estender por um longo intervalo de T_K e permitindo que $P(T_K) \neq 0$ quando $T_K \rightarrow 0$.

Medidas da resistividade e do calor específico em função da temperatura para o composto $\text{UCu}_{5-x}\text{Pd}_x$ são apresentadas nas Figuras 2.5 e 2.6, respectivamente. A resistividade apresenta a dependência linear listada na Tabela 2.1. O calor específico, por sua vez, obedece a uma lei de potência, conforme a Tabela 2.1 e os ajustes aos dados experimentais apresentados na Figura 2.6. Chamamos a atenção para o fato de que $\lambda < 1$, implicando numa divergência da razão $C(T)/T$ quando $T \rightarrow 0$.

Uma questão pertinente com relação ao UCu_4Pd é o fato de que ele poderia ser um composto estequiométrico. Sua estrutura é a mesma do AuBe_5 , onde existem, por célula unitária, 4 sítios equivalentes, que poderiam ser ocupados pelos átomos de Cu, e um diferente, que poderia ser ocupado pelo átomo de Pd [17]. No entanto, medidas de absorção de raio X (EXAFS, do inglês “extended X-ray-absorption fine structure”) mostraram que átomos de Pd também ocupam os sítios equivalentes [58]. Isso confirma que o sistema é desordenado, sendo cabível tratá-lo dentro do modelo de desordem Kondo.

O papel da desordem e da interação elétron-elétron no aparecimento do comportamento NLF foi considerado no cálculo microscópico realizado por E. Miranda *et al.* [47, 59], após a proposição do modelo de desordem Kondo. O cálculo baseia-se na resolução do modelo da rede de Anderson, que também descreve elétrons localizados acoplados a um banho de elétrons de condução, como o modelo da rede de Kondo. Num primeiro momento, o modelo foi resolvido dentro da Teoria Dinâmica de Campo Médio [60], que não permite a inclusão de efeitos de localização de Anderson [4]. Esses efeitos foram incorporados num segundo momento [61, 62].¹ Além disso, os cálculos foram realizados a temperatura nula e considerando o limite de interação infinita entre os elétrons localizados.² A Figura 2.7 apresenta os resultados obtidos para a distribuição de temperatura Kondo e alguns valores do parâmetro de desordem, W/t .³ A distribuição de temperatura Kondo segue uma função do tipo

¹Detalhes sobre o modelo e o método de resolução utilizados nesses trabalhos são discutidos no Capítulo 3, uma vez que realizamos o mesmo tipo de abordagem no desenvolvimento desta tese.

²Diferentemente, os cálculos desta tese foram realizados a temperatura e interação finitas.

³ W é a largura da distribuição da energia diagonal dos elétrons de condução e t é a amplitude do “hopping”, como explicitado no Capítulo 3.

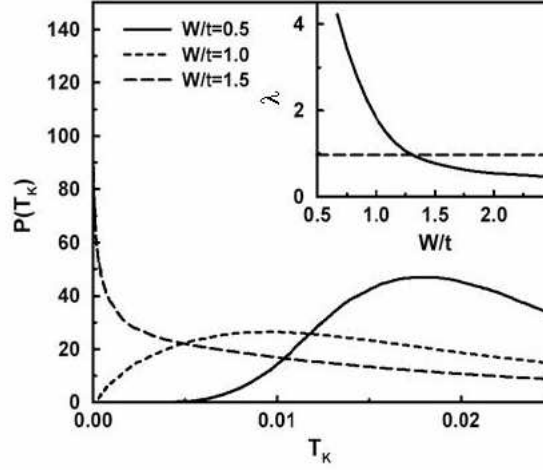


Figura 2.7: Distribuição de temperatura Kondo para diferentes valores do parâmetro de desordem, W/t , obtido no cálculo microscópico discutido no texto. O “inset” mostra o expoente λ , de $P(T_K) \propto (T_K)^{\lambda-1}$, em função de W/t . Resultado reproduzido da referência [62].

$$P(T_K) \propto (T_K)^{\lambda-1}, \quad (2.5)$$

implicando que as propriedades termodinâmicas tenham a seguinte dependência com a temperatura

$$\chi(T) \propto \frac{1}{T^{1-\lambda}} \quad \text{e} \quad \frac{C(T)}{T} \propto \frac{1}{T^{1-\lambda}}. \quad (2.6)$$

A variação do expoente λ em função do parâmetro de desordem é mostrada no “inset” da Figura 2.7. Para valores de λ inferiores a 1, de acordo com a eq. (2.6), a susceptibilidade magnética e o calor específico dividido pela temperatura divergem quando $T \rightarrow 0$, o que é característico do comportamento NLF. Isso significa que a fase metálica NLF tem início quando $\lambda = 1$, ou $W/t \approx 1.2$ para os dados da Figura 2.7. A fase NLF se estende por um longo intervalo de desordem, até $W/t \approx 12$, quando o sistema passa por uma transição metal-isolante induzida pela desordem (efeito de localização de Anderson) [61, 62].

Ainda com relação ao aparecimento do comportamento NLF devido à presença de desordem, um outro tratamento foi apresentado por A. H. Castro Neto *et al.* [48].

Esse tratamento leva em consideração o papel da desordem e também de uma competição entre o efeito Kondo e a interação RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) presente entre os spins. Se a escala da interação RKKY for muito maior que a temperatura Kondo, que é a escala do efeito Kondo, no caso de um problema de dois spins, eles tendem a estar fortemente correlacionados. Isso leva à formação de um estado singleto entre eles, não permitindo a ocorrência do efeito Kondo entre os spins e os elétrons de condução. No tratamento da referência [48], devido à interação RKKY, são formados no sistema grandes e raros aglomerados de spins, que, efetivamente, agem como spins livres, podendo sofrer processos de “spin-flip”. Dessa maneira, os aglomerados podem ser descritos como um sistema de dois níveis, com energia de tunelamento E , que se distribui segundo $P(E)$, devido à presença de desordem. Assim, a susceptibilidade magnética, por exemplo, pode ser calculada pela eq. (2.4) substituindo-se $P(T_K)$ por $P(E)$, o que resulta num bom acordo entre essa teoria e os resultados experimentais [63]. No entanto, considerações de entropia [64] e de dissipação [65] apontam para dificuldades na aplicação desse tratamento aos sistemas experimentais reais.

Capítulo 3

Método de resolução dos modelos

Como discutido na Introdução, estamos interessados em sistemas desordenados correlacionados, descritos, em particular, pelos modelos de Hubbard e da rede de Anderson na presença de desordem. Neste capítulo, discutimos os métodos de resolução desses modelos. Primeiramente, apresentamos o tratamento da interação elétron-elétron para o caso em que a desordem não está presente (primeira seção) e, em seguida, para o caso desordenado (segunda seção). O método usado é a Teoria Dinâmica de Campo Médio. Um segundo método de resolução, discutido na terceira seção, vai além do primeiro e permite a inclusão de efeitos de localização de Anderson. Nesse caso, utilizamos a chamada Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística.

3.1 Caso limpo

3.1.1 Teoria Dinâmica de Campo Médio

A Teoria Dinâmica de Campo Médio (TDCM) tem como base o trabalho de W. Metzner e D. Vollhardt [2], de 1989, que mostrou que a solução do modelo de Hubbard, ainda que em *dimensão infinita*, é capaz de descrever propriedades não-triviais dos sistemas de muitos corpos. Em 1982, A. Georges e G. Kotliar [3] reconheceram que o trabalho de W. Metzner e D. Vollhardt [2] corresponde a uma teoria de campo médio para o modelo de Hubbard, que se torna exata em dimensão infinita e que faz uma conexão do problema da rede com o problema de uma impureza. Dentro da TDCM, que vale não apenas no caso do modelo de Hubbard, o

problema de uma rede é mapeado no problema de uma única impureza embebida num banho de elétrons de condução, que é determinado de maneira autoconsistente. A derivação das equações da TDCM pode ser encontrada na referência [60] e não é apresentada aqui. A seguir, restringimo-nos a apresentar essas equações para o caso do modelo Hubbard e do modelo da rede de Anderson.

Modelo de Hubbard

Consideremos o Hamiltoniano do modelo de Hubbard, dado por

$$H = - \sum_{ij\sigma} (t_{ij} + \mu\delta_{ij}) (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (3.1)$$

O primeiro termo representa o “hopping” dos elétrons de um sítio para outro: $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação de um elétron com spin σ no sítio i ; t_{ij} é a amplitude do “hopping”, restrito aos primeiros vizinhos, e μ é o potencial químico. O segundo termo representa a interação entre dois elétrons no mesmo sítio: $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador número e U é o potencial de interação Coulombiana entre os dois elétrons.

No limite de dimensão infinita, para que os termos cinético e de interação continuem a ter a mesma ordem de grandeza, a amplitude do “hopping” deve ser reescalada [2]. No caso de uma rede hiper-cúbica simples de dimensão d (e número de coordenação $z = 2d$), com parâmetro de rede unitário, a transformada de Fourier de t_{ij} é dada por

$$\epsilon_{\vec{k}} = -2t \sum_{j=1}^d \cos(k_j), \quad (3.2)$$

onde $\vec{k} = (k_1, \dots, k_d)$ é o vetor de onda e $t = t_{ij}$. Desse modo, t deve ser reescalada como

$$t \rightarrow \frac{t}{\sqrt{2d}}, \quad (3.3)$$

o que assegura que a densidade de estados (DE) calculada a partir da eq. (3.2) seja finita no limite $d \rightarrow \infty$ e a solução do modelo de Hubbard nesse limite seja não-trivial.

A função de Green de um corpo, no espaço de momento e no eixo imaginário, é dada por

$$G(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n)}, \quad (3.4)$$

onde $\Sigma(\vec{k}, i\omega_n)$ é a autoenergia do problema e representa a presença de interação (termo proporcional a U) no modelo. No limite $d \rightarrow \infty$, a autoenergia depende apenas da frequência, $\Sigma(\vec{k}, i\omega_n) = \Sigma(i\omega_n)$, e é portanto uma grandeza local [2].

Pela TDCM, devemos escrever a ação correspondente ao Hamiltoniano da eq. (3.1) e então integrar sobre os graus de liberdade dos elétrons, com exceção daqueles relativos a um único sítio, designado por o . Dessa maneira, a descrição da TDCM associa ao Hamiltoniano em questão a seguinte ação em tempo imaginário [3, 60, 66], que corresponde à ação do problema auxiliar de uma impureza no sítio o

$$S = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{o\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{o\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{o\uparrow}(\tau) n_{o\downarrow}(\tau), \quad (3.5)$$

onde $\beta = 1/T$, T é a temperatura e $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ é a função de Green não-interagente do problema auxiliar de uma impureza (que é determinada de maneira autoconsistente, como explicado adiante) e não deve ser confundida com a função de Green local não-interagente do problema definido na eq. (3.1). Fisicamente, $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ representa a amplitude de ocorrência do processo em que um elétron é criado no sítio o no tempo τ (vindo do banho externo) e é destruído no tempo τ' (voltando para o banho externo). Desse modo, $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ contém informação sobre todos os outros sítios da rede.

A dependência temporal de $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ vem do fato de que a TDCM leva em conta as flutuações temporais locais, sendo por isso chamada de teoria dinâmica. Por outro lado, por estarmos tratando de uma teoria de campo médio, as flutuações espaciais estão congeladas.

A função de Green interagente do problema auxiliar é dada por

$$G(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau G(\tau) e^{i\omega_n \tau} = \frac{1}{\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - \Sigma_{imp}(i\omega_n)}, \quad (3.6)$$

onde

$$G(\tau - \tau') = - \langle T_\tau c(\tau) c^\dagger(\tau') \rangle_S, \quad (3.7)$$

$\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$, $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$ é a autoenergia do problema auxiliar, T_τ é o operador de ordenamento temporal e a função de Green da eq. (3.7) é calculada segundo a dinâmica ditada pela ação da eq. (3.5).

A teoria de campo médio é construída exigindo-se que a função de Green local interagente do modelo de Hubbard coincida com $G(i\omega_n)$, dada pela eq. (3.6), quando $\Sigma(i\omega_n) = \Sigma_{imp}(i\omega_n)$ [3, 60]. Usando a eq. (3.4), isso significa

$$G(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)}{i\omega_n + \mu - \Sigma_{imp}(i\omega_n) - \epsilon}, \quad (3.8)$$

onde $\rho(\epsilon)$ é a DE para o problema descrito pela eq. (3.1) quando $U = 0$.

As eqs. (3.5-3.8) são as equações de campo médio para o modelo de Hubbard e permitem determinar, não apenas as quantidades locais desse modelo, mas também aquelas que dependem do vetor de onda $\vec{k}$ [60].

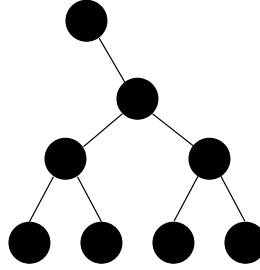


Figura 3.1: Rede de Bethe com conectividade $z = 3$.

Notemos que a natureza da rede aparece nas equações de campo médio apenas através da DE $\rho(\epsilon)$. Nos cálculos realizados, consideramos apenas o caso de uma *rede de Bethe*, em que cada sítio conecta-se a outros z sítios, como representado na Figura 3.1 para $z = 3$. Além disso, no limite em que a TDCM é exata, temos $z \rightarrow \infty$. Nesse caso, a DE é semicircular

$$\rho(\epsilon) = \begin{cases} \frac{2}{\pi D} \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon}{D}\right)^2} & |\epsilon| < D \\ 0 & |\epsilon| > D \end{cases}, \quad (3.9)$$

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

Resolvendo a integral da eq. (3.8) para a DE acima, ficamos com

$$G(i\omega_n) = \frac{2}{i\omega_n + \mu - \Sigma_{imp}(i\omega_n) + s\sqrt{[i\omega_n + \mu - \Sigma_{imp}(i\omega_n)]^2 - D^2}}, \quad (3.10)$$

onde

$$s = \text{sign}[\text{Re}(i\omega_n + \mu - \Sigma_{imp}(i\omega_n))]. \quad (3.11)$$

Ainda para a rede de Bethe, pelas eqs. (3.6) e (3.10), $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ pode ser escrita em função de $G(i\omega_n)$ como

$$\mathcal{G}_0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - t^2 G(i\omega_n)}. \quad (3.12)$$

O próximo passo é resolver o *problema auxiliar de uma impureza*, definido pela ação efetiva da eq. (3.5), o que, no nosso trabalho, é feito usando teoria de perturbação em U , como discutido na próxima subseção. No momento, basta-nos saber que, pela teoria de perturbação, $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$ é um funcional de $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$. A resolução do modelo de Hubbard dentro da TDCM consiste, então, num cálculo autoconsistente. Dada uma tentativa inicial para $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$, obtém-se $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$ pela teoria de perturbação. A partir dessas duas grandezas, calcula-se $G(i\omega_n)$ pela eq. (3.6) e, em seguida, uma nova $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ pela eq. (3.12). A sequência de operações aqui descrita é repetida até que a nova $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ coincida com a $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ inicial.

Portanto, pela TDCM, o modelo de Hubbard na rede de Bethe é mapeado no problema de uma impureza embebida num banho de elétrons de condução, dado por

$$\Delta(i\omega_n) = t^2 G(i\omega_n), \quad (3.13)$$

conforme a eq. (3.12), e que é determinado de forma autoconsistente.

Modelo da rede de Anderson

Consideremos agora uma rede de momentos localizados descrita pelo Modelo Periódico de Anderson (PAM, do inglês “Periodic Anderson Model”)

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\vec{k}\sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + V \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \\ &+ (E_f - \mu) \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + U \sum_i n_{fi\uparrow} n_{fi\downarrow}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Nesse caso, temos dois tipos distintos de elétrons: elétrons de condução (como os do modelo de Hubbard), que ocupam estados estendidos, e elétrons tipo f , que ocupam orbitais atômicos tipo f (ou seja, estados localizados) nos compostos de nosso interesse. O primeiro termo no Hamiltoniano acima equivale ao primeiro termo da eq. (3.1), sendo aqui escrito na base em que ele é diagonal, ou seja, no espaço $\vec{k}$. O terceiro termo representa a energia dos elétrons localizados: $f_{i\sigma}^\dagger$ e $f_{i\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação de um elétron tipo f , com spin σ e energia E_f . O segundo termo representa uma hibridização entre estados estendidos e localizados, sendo V o potencial de hibridização. O último termo representa a interação Coulombiana entre dois elétrons tipo f : $n_{fi\sigma} = f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$ é o operador número e U é o potencial de interação. Notemos que, nesse caso, a interação de Coulomb está presente entre elétrons tipo f e não entre elétrons de condução, como no modelo de Hubbard.

As funções de Green dos elétrons tipo f e dos elétrons de condução são dadas, respectivamente, por

$$\left[G_f(\vec{k}, i\omega_n)\right]^{-1} = i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_f(i\omega_n) - \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}}}, \quad (3.15)$$

$$\left[G_c(\vec{k}, i\omega_n)\right]^{-1} = i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}} - \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_f(i\omega_n)}, \quad (3.16)$$

onde $\Sigma_f(i\omega_n)$ é a autoenergia dos elétrons tipo f , que, como no caso do modelo de Hubbard, independe do vetor de onda $\vec{k}$, no limite $d \rightarrow \infty$.

Dentro da TDCM, devemos considerar um único elétron tipo f , num sítio designado por o , e realizar a integração sobre os graus de liberdade dos demais elétrons tipo f e dos elétrons de condução. Nesse caso, o problema da rede se reduz à seguinte ação efetiva [60], correspondente ao problema auxiliar de uma impureza

$$\begin{aligned} S = & - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\sigma} f_{o\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') f_{o\sigma}(\tau') \\ & + U \int_0^\beta d\tau n_{fo\uparrow}(\tau) n_{fo\downarrow}(\tau). \end{aligned} \quad (3.17)$$

As condições exigidas pela TDCM são que a função de Green local interagente dos elétrons tipo f coincida com a função de Green interagente do problema auxiliar,

$G_f(i\omega_n)$, e que a autoenergia do problema da rede, $\Sigma_f(i\omega_n)$, seja igual à autoenergia do problema auxiliar, $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$. Escrevendo na forma de equação, a primeira condição significa

$$G_f(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau G_f(\tau) e^{i\omega_n \tau} = \sum_{\vec{k}} G_f(\vec{k}, i\omega_n), \quad (3.18)$$

onde $G_f(\tau - \tau')$ é calculada sob a ação da eq. (3.17), ou seja,

$$G_f(\tau - \tau') = - \left\langle T_\tau f(\tau) f^\dagger(\tau') \right\rangle_S. \quad (3.19)$$

A equação acima para $G_f(i\omega_n)$ pode ser reescrita como

$$G_f(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_f(i\omega_n)} + \frac{V^2}{[i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_f(i\omega_n)]^2} G_c(i\omega), \quad (3.20)$$

em termos da função de Green local dos elétrons de condução, $G_c(i\omega_n)$, dada por

$$G_c(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)}{i\omega_n + \mu - \epsilon - V^2/[i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_f(i\omega_n)]}, \quad (3.21)$$

onde $\rho(\epsilon)$ é a DE dos elétrons de condução.

Para a rede de Bethe, cuja DE é dada pela eq. (3.9), a resolução da integral acima nos dá

$$G_c(i\omega_n) = \frac{2}{i\omega_n + \mu - \Phi(i\omega_n) + s\sqrt{[i\omega_n + \mu - \Phi(i\omega_n)]^2 - D^2}}, \quad (3.22)$$

onde

$$s = \text{sign} \{ \text{Re} [i\omega_n + \mu - \Phi(i\omega_n)] \}, \quad (3.23)$$

$$\Phi(i\omega_n) = \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_f(i\omega_n)}. \quad (3.24)$$

A eq. (3.22) pode ainda ser reescrita como

$$G_c(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - t^2 G_c(i\omega_n) - \Phi(i\omega_n)}. \quad (3.25)$$

Substituindo a equação acima e a equação de Dyson para o problema de uma impureza,

$$G_f(i\omega_n) = \frac{1}{[\mathcal{G}_0(i\omega_n)]^{-1} - \Sigma_f(i\omega_n)}, \quad (3.26)$$

na eq. (3.20), chegamos à seguinte equação de $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ em função de $G_c(i\omega_n)$

$$\mathcal{G}_0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - E_f - \Delta(i\omega_n)}, \quad (3.27)$$

onde

$$\Delta(i\omega_n) = \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - t^2 G_c(i\omega_n)}. \quad (3.28)$$

As eqs. (3.17) e (3.18) são as equações de campo médio para o PAM. No caso específico da rede de Bethe, essas equações se reduzem às eqs. (3.25) e (3.27) dadas acima. Além delas, o cálculo autoconsistente envolve ainda a equação que relaciona $\Sigma_f(i\omega_n)$ com $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ pela teoria de perturbação (que é apresentada na próxima subseção). Dada uma tentativa inicial para $G_c(i\omega_n)$, $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ é calculada pela eq. (3.27). A partir daí, a autoenergia é obtida por teoria de perturbação. Finalmente, uma nova $G_c(i\omega_n)$ é calculada pela eq. (3.25). O cálculo é repetido até que haja convergência, como na solução do modelo de Hubbard.

Como no caso do modelo de Hubbard, pela TDCM, o modelo da rede de Anderson é mapeado no problema de uma impureza mais uma condição de autoconsistência. Ainda como no modelo de Hubbard, $\Delta(i\omega_n)$ representa, do ponto de vista da impureza, o banho de elétrons de condução no qual ela está embebida. Por sua vez, conforme a eq. (3.25), os elétrons de condução “vêm” a impureza através de $\Phi(i\omega_n)$.

3.1.2 Problema de uma impureza

As ações efetivas das eqs. (3.5) e (3.17), obtidas dentro da TDCM para os modelos de Hubbard e da rede de Anderson, respectivamente, correspondem à ação de um problema de uma única impureza [60]. Esse problema pode ser descrito pelo modelo de Anderson de uma impureza, cujo Hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + V \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger f_\sigma + f_\sigma^\dagger c_{i\sigma} \right) + E_f \sum_{\sigma} f_\sigma^\dagger f_\sigma + U f_\uparrow^\dagger f_\uparrow f_\downarrow^\dagger f_\downarrow. \quad (3.29)$$

O Hamiltoniano acima é semelhante ao da eq. (3.14) para o PAM e, por isso, a notação utilizada é a mesma. Como os próprios nomes dizem, o Hamiltoniano da

eq. (3.14) descreve uma rede momentos localizados, apresentando somatórios sobre os sítios onde estão os elétrons tipo f , enquanto o Hamiltoniano acima descreve apenas um momento localizado, ou impureza, no sítio o . Por simplicidade, retiramos o subíndice o dos operadores de criação e aniquilação desse elétron. Além disso, no caso presente, $\mu = 0$.

O objetivo desta subseção é apresentar a solução do modelo de Anderson de uma impureza utilizando teoria de perturbação em U . Apresentamos as correções de segunda e quarta ordem para a autoenergia, escritas em termos de diagramas de Feynman e válidas no caso em que o sistema apresenta simetria partícula-buraco. Embora apresentemos aqui as correções até quarta ordem, os resultados numéricos que são discutidos nos capítulos seguintes foram obtidos utilizando teoria de perturbação apenas até segunda ordem em U .

Seguindo os trabalhos de K. Yamada e K. Yosida [6, 7, 8], consideramos o caso em que o Hamiltoniano acima apresenta simetria partícula-buraco. Se olharmos apenas para os dois últimos termos no Hamiltoniano da eq. (3.29), os níveis de energia possíveis são 0, E_f e $2E_f + U$. Portanto, para que haja simetria partícula-buraco, devemos ter

$$E_f = -\frac{U}{2}. \quad (3.30)$$

Nesse caso, H pode ser dividido da seguinte maneira, numa parte não-perturbada (H_0) e noutra proporcional a U (H_1), que é tratada por teoria de perturbação,

$$H = H_0 + H_1, \quad (3.31)$$

$$H_0 = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + V \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger f_\sigma + f_\sigma^\dagger c_{i\sigma} \right) - \frac{U}{4}, \quad (3.32)$$

$$H_1 = U \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - \frac{1}{2} \right) \left(f_\downarrow^\dagger f_\downarrow - \frac{1}{2} \right). \quad (3.33)$$

Escrevendo H_1 na representação de interação [67],

$$\begin{aligned} H_1(\tau) &= e^{H_0\tau} H_1 e^{-H_0\tau} \\ &= U \left[f_\uparrow^\dagger(\tau) f_\uparrow(\tau) - \frac{1}{2} \right] \left[f_\downarrow^\dagger(\tau) f_\downarrow(\tau) - \frac{1}{2} \right], \end{aligned} \quad (3.34)$$

onde

$$f_{\sigma}^{\dagger}(\tau) = e^{H_0\tau} f_{\sigma}^{\dagger} e^{-H_0\tau} \quad \text{e} \quad f_{\sigma}(\tau) = e^{H_0\tau} f_{\sigma} e^{-H_0\tau}, \quad (3.35)$$

temos que a expansão perturbativa para a função de Green de um corpo a *temperatura finita* é dada por [68]

$$G_f(\tau) = \quad (3.36)$$

$$= - \frac{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} \sum_{n=0}^{\infty} [(-1)^n / n!] \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n T_{\tau} [H_1(\tau_1) \dots H_1(\tau_n) f_{\sigma}(\tau) f_{\sigma}^{\dagger}(0)] \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} \sum_{n=0}^{\infty} [(-1)^n / n!] \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n T_{\tau} [H_1(\tau_1) \dots H_1(\tau_n)] \right\}}.$$

A expansão correspondente para a autoenergia é obtida a partir da equação acima usando que

$$G_f(i\omega_m) = \frac{1}{[G_f^{(0)}(i\omega_m)]^{-1} - \Sigma(i\omega_m)}, \quad (3.37)$$

onde $G_f(i\omega_m)$ é a transformada de Fourier de $G_f(\tau)$ e $G_f^{(0)}(i\omega_m)$ é a função de Green do problema definido pelo Hamiltoniano H_0 .

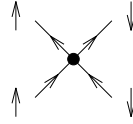


Figura 3.2: Vértice a partir do qual são construídos os diagramas de Feynman.

Para calcular as correções até quarta ordem, utilizamos a expansão diagramática associada à eq. (3.36). De acordo com a eq. (3.34), o Hamiltoniano $H_1(\tau)$ representa a destruição e também a criação no tempo τ de dois elétrons com spins opostos. Dessa forma, os diagramas de Feynman que dão a contribuição de ordem n para a autoenergia são construídos a partir de n vértices como o da Figura 3.2, onde o símbolo $\bullet$ representa a interação dada por U .

A Figura 3.3 mostra os diagramas que têm contribuição não-nula até a quarta ordem: (a) um de segunda ordem e (b) doze de quarta ordem. A correção de ordem n para a autoenergia no espaço de frequências é obtida pela leitura dos diagramas, seguindo as regras abaixo:

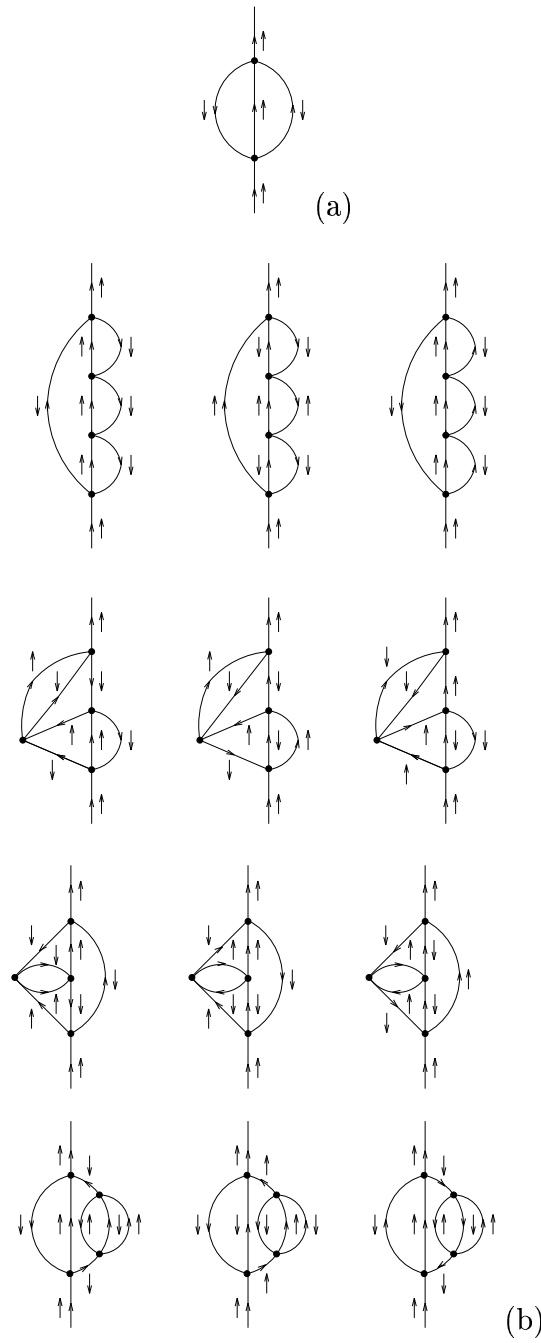


Figura 3.3: Diagramas de Feynman (a) de segunda e (b) de quarta ordens, que têm contribuição não-nula na expansão perturbativa para a autoenergia no problema de uma impureza simétrico.

1. associar uma frequência discreta ω_p a cada linha, observando que essa grandeza seja conservada em cada vértice;
2. associar a cada linha um fator $G_f^{(0)}(i\omega_p)$;
3. associar a cada interação um fator U ;
4. somar sobre as frequências internas;
5. multiplicar por $[-\beta]^{-n} (-1)^F$, onde F é o número de “loops” fermiônicos.

O fato dos diagramas de primeira e terceira ordens serem nulos reflete o resultado mais geral de que todos os diagramas de ordem ímpar são nulos [6, 7, 8]. Cada três diagramas que aparecem na mesma linha na Figura 3.3 (b) representam contribuições iguais para a correção de quarta ordem da autoenergia. Isso pode ser concluído a partir dos diagramas considerando que, no caso simétrico, $G_f^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) = -G_f^{(0)}(\tau_1 - \tau_2)$ e multiplicando corretamente cada diagrama pelo fator $(-1)^F$ correspondente. Os diagramas obtidos por nós são os mesmos apresentados no trabalho de J. K. Freericks e M. Jarrel [69].

Restringimo-nos, a partir daqui, ao resultado até segunda ordem, uma vez que o cálculo numérico realizado não foi além dessa ordem. Nesse caso, de acordo com a Figura 3.3 (a), a correção da autoenergia é dada por

$$\Sigma^{(2)}(i\omega_n) = -\frac{U^2}{\beta^2} \sum_{\omega_1 \omega_2} G_f^{(0)}(i\omega_1) G_f^{(0)}(i\omega_2) G_f^{(0)}(i\omega_n - i\omega_1 + i\omega_2), \quad (3.38)$$

e pode ser reescrita como

$$\Sigma^{(2)}(i\omega_n) = U^2 \int_0^\beta d\tau \left[G_f^{(0)}(\tau) \right]^3 e^{i\omega_n \tau}, \quad (3.39)$$

usando que

$$\sum_{\omega_n} e^{i\omega_n(\tau - \tau')} = \beta \delta(\tau - \tau') \quad (3.40)$$

e considerando o caso simétrico, em que $G_f^{(0)}(-\tau) = -G_f^{(0)}(\tau)$.

Pela eq. (3.39), notamos que a correção de segunda ordem para a autoenergia pode ser escrita como a transformada de Fourier de $\left[G_f^{(0)}(\tau) \right]^3$, multiplicada por U^2 . O método de “Fast Fourier Transform” [70] permite calcular uma transformada de Fourier discreta a partir de um número de operações da ordem de $N \log_2 N$, onde N

é o número de pontos considerados. Desse modo, do ponto de vista *numérico*, é mais vantajoso calcular $\Sigma^{(2)}(i\omega_n)$ pela eq. (3.39) do que pela eq. (3.38), que envolveria um número de operações da ordem de N^2 .

É importante salientar o sucesso da teoria de perturbação até segunda ordem como solução para o problema de uma única impureza. As razões para esse fato são explicitadas abaixo [71].

1. A teoria de perturbação é uma boa aproximação para acoplamentos fracos ($U \ll t$), por construção, já que a expansão é feita em torno de $U = 0$. K. Yamada e K. Yosida [6, 7, 8] mostraram que ela é capaz de descrever não apenas a ressonância de Abrikosov-Suhl (região de baixa energia), mas também as bandas incoerentes.
2. O limite atômico é exatamente capturado pela teoria de perturbação até segunda ordem. No limite $V \rightarrow 0$, $[G_f^{(0)}(i\omega_n)]^{-1} \sim i\omega_n + \mu$ e a função de Green é dada por [72]

$$G_f(i\omega_n) = \frac{1/2}{[G_f^{(0)}(i\omega_n)]^{-1} - U/2} + \frac{1/2}{[G_f^{(0)}(i\omega_n)]^{-1} + U/2}. \quad (3.41)$$

A autoenergia é então

$$\Sigma(i\omega_n) = \left(\frac{U}{2}\right)^2 G_f^{(0)}(i\omega_n) \quad (3.42)$$

e coincide com o resultado obtido substituindo-se $G_0(i\omega_n)$ na correção de segunda ordem da teoria de perturbação, dada pela eq. (3.39).

Portanto, a aproximação até segunda ordem pode ser interpretada como uma interpolação que se torna exata nos limites $U \rightarrow 0$ e $U \rightarrow \infty$. Isso justifica o fato de usarmos valores $U \approx 3$ nos gráficos que são apresentados ao longo desta tese.

A eq. (3.39) corresponde à equação mencionada anteriormente (p. 33) que relaciona, dentro da teoria de perturbação em U , a autoenergia do problema de uma impureza à função de Green não-interagente do mesmo problema. Para obtermos a correção da autoenergia no caso das ações efetivas das eqs. (3.5) e (3.17), devemos substituir $G_f^{(0)}(\tau)$ na eq. (3.39) por $\mathcal{G}_0(\tau)$.

Alguns exemplos dos resultados que podem ser obtidos da solução do modelo de Hubbard e do modelo da rede de Anderson usando a TDCM, na ausência de desordem, são apresentados no Apêndice A. Como os resultados dos cálculos numéricos realizados no eixo imaginário, de Matsubara, não têm uma interpretação física direta, utilizamos o método dos aproximantes de Padé [73, 74, 75], que também é discutido no apêndice, para obter os resultados no eixo real.

3.2 Caso desordenado

3.2.1 Aproximação do Potencial Coerente

O tratamento da desordem, dentro da TDCM, equivale ao da Aproximação do Potencial Coerente (CPA, do inglês “Coherent Potential Approximation”) [76, 77] no limite de dimensão infinita. Por esse motivo, revisamos essa aproximação nesta subseção.

Consideremos um gás de elétrons livres na presença de um potencial aleatório. O Hamiltoniano desse sistema é dado por

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1, \\ H_0 &= -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \\ H_1 &= \sum_{i\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde ϵ_i encontra-se distribuída segundo $P(\epsilon)$.

Dentro da CPA, assumimos que o efeito do Hamiltoniano H_1 na função de Green média do sistema é deslocar a frequência de uma quantidade $\Sigma(i\omega)$ [76, 77], ou seja,

$$\bar{G}(\vec{k}, i\omega) = G_0[\vec{k}, i\omega - \Sigma(i\omega)] = \frac{1}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}} - \Sigma(i\omega)}, \quad (3.44)$$

onde $G_0(\vec{k}, \omega)$ é a função de Green do sistema descrito pelo Hamiltoniano H_0 e $\epsilon_{\vec{k}}$ é a dispersão da banda, como na eq. (3.2).

Fisicamente, o sistema se comporta como se um “potencial coerente” $\Sigma(i\omega)$, dependente da frequência, estivesse presente em cada um dos sítios da rede. Desse modo, o potencial randômico no sítio i passa a ser dado por $\tilde{\epsilon}_i = \epsilon_i - \Sigma(i\omega)$ e representa uma perturbação no meio uniforme descrito por $\bar{G}(\vec{k}, i\omega)$.

A matriz de espalhamento correspondente ao potencial $\tilde{\epsilon}_i$ é

$$t_i(i\omega) = \frac{\epsilon_i - \Sigma(i\omega)}{1 - \bar{G}^l(i\omega) [\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]}, \quad (3.45)$$

onde $\bar{G}^l(i\omega)$ é a função de Green média local

$$\bar{G}^l(i\omega) = \sum_{\vec{k}} \bar{G}(\vec{k}, i\omega). \quad (3.46)$$

Como o efeito do potencial randômico já foi considerado na função de Green média, devemos, por autoconsistência, impor que a matriz de espalhamento média seja nula [76, 77]

$$\langle t_i(i\omega) \rangle = \left\langle \frac{\epsilon_i - \Sigma(i\omega)}{1 - \bar{G}^l(i\omega) [\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]} \right\rangle = 0. \quad (3.47)$$

A equação acima pode ser reescrita da seguinte maneira

$$\left\langle \frac{1}{1 - \bar{G}^l(i\omega) [\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]} \right\rangle = 1, \quad (3.48)$$

ou ainda como

$$\bar{G}^l(i\omega) = \left\langle \frac{1}{[\bar{G}^l(i\omega)]^{-1} - [\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]} \right\rangle, \quad (3.49)$$

e representa a equação a ser resolvida para determinar o potencial coerente $\Sigma(i\omega)$.

É importante salientar que o tratamento de desordem apresentado acima se torna exato no limite de dimensão infinita [78].

Vamos agora particularizar a eq. (3.49) para a rede de Bethe, no limite $d \rightarrow \infty$. Pela eq. (3.12), no caso em que $U = 0$, temos

$$G_0^l(i\omega) = \frac{1}{i\omega - t^2 G_0^l(i\omega)}. \quad (3.50)$$

Usando o resultado acima na eq. (3.44), ficamos com

$$\begin{aligned} [\bar{G}^l(i\omega)]^{-1} &= [G_0^l(i\omega - \Sigma(i\omega))]^{-1} \\ &= i\omega - \Sigma(i\omega) - t^2 G_0^l(i\omega - \Sigma(i\omega)) \\ &= i\omega - \Sigma(i\omega) - t^2 \bar{G}^l(i\omega), \end{aligned} \quad (3.51)$$

que, substituído na eq. (3.49), implica numa equação autoconsistente para a função de Green média local

$$\bar{G}^l(i\omega) = \left\langle \frac{1}{i\omega - t^2 \bar{G}^l(i\omega) - \epsilon_i} \right\rangle. \quad (3.52)$$

Portanto, a equação acima dá a solução, dentro da CPA, do problema de elétrons numa rede de Bethe na presença de um potencial randômico, descrito pelo Hamiltoniano da eq. (3.43).

3.2.2 TDCM na presença de desordem

Discutimos nesta subseção modelos que incluem não apenas desordem, mas também interação. A solução desses modelos é discutida dentro da TDCM. Na presença de desordem, o problema da rede tratado pela TDCM é mapeado num “ensemble” de problemas de uma impureza (e não em apenas um desses problemas, como no caso limpo).

Modelo de Hubbard

Consideremos o modelo de Hubbard na presença de desordem no termo diagonal da energia dos elétrons. Nesse caso, o Hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_{ij\sigma} [(\epsilon_i - \mu)\delta_{ij} - t] (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (3.53)$$

onde ϵ_i encontra-se distribuída segundo $P(\epsilon)$ e o “hopping” está restrito aos primeiros vizinhos.

Dentro da TDCM, o problema da rede na presença de desordem é mapeado num “ensemble” de problemas de uma impureza, cada um deles sendo definido pela seguinte ação efetiva

$$\begin{aligned} S(j) = & \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' c_{j\sigma}^\dagger(\tau) [\delta(\tau - \tau') (\partial_{\tau} + \epsilon_j - \mu) \\ & + \Delta(\tau - \tau')] c_{j\sigma}(\tau') + U \int_0^{\beta} d\tau n_{j\uparrow}(\tau) n_{j\downarrow}(\tau), \end{aligned} \quad (3.54)$$

onde

$$\Delta(i\omega_n) = t^2 \bar{G}(i\omega_n), \quad (3.55)$$

para a rede de Bethe, $\bar{G}(i\omega_n)$ é a função de Green local média dos elétrons de condução e j indica um dos problemas de uma impureza do “ensemble”. É interessante notar que cada problema de uma impureza não “enxerga” as flutuações da função de onda dos elétrons de condução, uma vez que apenas a *média* de $G(i\omega_n)$ aparece nas equações acima.

A função de Green local média dos elétrons de condução satisfaz a seguinte condição de autoconsistência

$$\bar{G}(i\omega_n) = \left\langle \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_j - \Delta(i\omega_n) - \Sigma_j(i\omega_n)} \right\rangle, \quad (3.56)$$

onde $\langle \dots \rangle$ representa a média sobre a distribuição $P(\epsilon)$ e $\Sigma_j(i\omega_n)$ é a autoenergia do problema de uma impureza definido pela ação efetiva da eq. (3.54). Notemos que a eq. (3.56) é a generalização da eq. (3.52) para o problema correlacionado, tratado dentro da TDCM.

A resolução do modelo de Hubbard na presença de desordem recai, como no caso limpo, num cálculo autoconsistente. No entanto, no caso desordenado, vários problemas de uma impureza, e não apenas um, devem ser resolvidos antes que a condição de autoconsistência seja imposta.

Modelo da rede de Anderson

Consideremos o modelo da rede de Anderson na presença de desordem no termo diagonal da energia dos elétrons de condução. Nesse caso, o Hamiltoniano é dado por

$$\begin{aligned} H = & \sum_{ij\sigma} [(\epsilon_i - \mu)\delta_{ij} - t] c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + (E_f - \mu) \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \\ & + V \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{fi\uparrow} n_{fi\downarrow}, \end{aligned} \quad (3.57)$$

onde ϵ_i encontra-se distribuída segundo $P(\epsilon)$, como no modelo de Hubbard, e o “hopping” está restrito aos primeiros vizinhos.

A ação efetiva de cada problema de uma impureza do “ensemble” é dada por

$$\begin{aligned}
S(j) = & \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' f_{j\sigma}^{\dagger}(\tau) [\delta(\tau - \tau') (\partial_{\tau} + E_f - \mu) \\
& + \Delta_j(\tau - \tau')] f_{j\sigma}(\tau') + U \int_0^{\beta} d\tau n_{fj\uparrow}(\tau) n_{fj\downarrow}(\tau),
\end{aligned} \tag{3.58}$$

onde

$$\Delta_j(i\omega_n) = \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - \epsilon_j - t^2 \bar{G}_c(i\omega_n)} \tag{3.59}$$

é a extensão da eq. (3.28) para o caso desordenado e $\bar{G}_c(i\omega_n)$ é a função de Green local média dos elétrons de condução. Como no caso do modelo de Hubbard, apenas a *média* de $G_c(i\omega)$ está presente nas equações de campo médio.

Para o modelo da rede de Anderson, $\bar{G}_c(i\omega_n)$ satisfaz a seguinte condição de autoconsistência

$$\bar{G}_c(i\omega_n) = \left\langle \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_j - t^2 \bar{G}_c(i\omega_n) - \Phi_j(i\omega_n)} \right\rangle, \tag{3.60}$$

onde

$$\Phi_j(i\omega_n) = \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_{fj}(i\omega_n)} \tag{3.61}$$

é a extensão da eq. (3.24) para o caso desordenado e $\Sigma_{fj}(i\omega_n)$ é a autoenergia correspondente ao problema de uma impureza definido pela eq. (3.58). Pela eq. (3.60), do ponto de vista dos elétrons de condução, ϵ_j representa a desordem despida [aquela que aparece no Hamiltoniano da eq. (3.57)], enquanto $\Phi_j(i\omega_n)$ representa uma desordem efetiva, gerada pelos vários problemas de uma impureza.

Na presença de desordem, os problemas de uma impureza com $\epsilon_i \neq 0$ não apresentam simetria partícula-buraco. Portanto, a teoria de perturbação apresentada anteriormente não pode ser utilizada na solução dos problemas de uma impureza. Discutimos na próxima subseção a extensão da teoria de perturbação em U para o caso assimétrico.

3.2.3 Problema de uma impureza assimétrico

Como vimos anteriormente, no tratamento perturbativo do problema de Anderson de uma impureza com simetria partícula-buraco, o diagrama de primeira ordem

tem contribuição nula. Isso, no entanto, não é válido quando a simetria é quebrada. Nesse caso, uma maneira de tratar o problema até segunda ordem em U foi proposta por H. Kajueter e G. Kotliar [9] e discutida posteriormente também por outros autores [10, 79, 80, 81].

Consideremos novamente o modelo de Anderson de uma impureza, descrito pela eq. (3.29), reproduzida abaixo

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + V \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger f_\sigma + f_\sigma^\dagger c_{i\sigma} \right) + E_f \sum_{\sigma} f_\sigma^\dagger f_\sigma + U f_\uparrow^\dagger f_\uparrow f_\downarrow^\dagger f_\downarrow.$$

A função de Green para o problema não-interagente pode ser escrita como

$$G_f^{(0)}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \tilde{\mu} - \Delta(i\omega_n)}, \quad (3.62)$$

onde $\Delta(i\omega_n) = V^2 \sum_{\vec{k}} [1/(i\omega_n - \epsilon_k)]$ e o parâmetro $\tilde{\mu}$, acrescentado à equação acima, é igual a zero no caso simétrico. A função de Green interagente é dada por

$$G_f(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_f - \Delta(i\omega_n) - \Sigma(i\omega_n)}. \quad (3.63)$$

A descrição proposta na referência [9] para o caso assimétrico baseia-se na modificação do parâmetro $\tilde{\mu}$ e da autoenergia $\Sigma(i\omega_n)$. A forma proposta para a autoenergia é a seguinte

$$\Sigma(i\omega_n) = Un + \frac{A\Sigma^{(2)}(i\omega_n)}{1 - B\Sigma^{(2)}(i\omega_n)}, \quad (3.64)$$

onde

$$n = T \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} G_f(i\omega_n) \quad \text{com } \tau \rightarrow -0, \quad (3.65)$$

e $\Sigma^{(2)}(i\omega_n)$ é a correção de segunda ordem para a autoenergia, dada pela eq. (3.39), com $G_f^{(0)}(\tau)$ sendo a transformada de Fourier da função de Green da eq. (3.62).

Os parâmetros A e B são determinados a partir do comportamento no limite de altas frequências e no limite atômico ($V \rightarrow 0$), respectivamente, e são dados por

$$A = \frac{n(1-n)}{n_0(1-n_0)} \quad \text{e} \quad B = \frac{(1-n)U + E_f + \tilde{\mu}}{n_0(1-n_0)U^2}, \quad (3.66)$$

onde

$$n_0 = T \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} G_f^{(0)}(i\omega_n) \quad \text{com } \tau \rightarrow -0. \quad (3.67)$$

No mapeamento do modelo de Hubbard e do modelo da rede de Anderson num “ensemble” de problemas de uma impureza, $\Delta(i\omega_n)$ que aparece nas eqs. (3.62) e (3.63) é dado, para cada problema de uma impureza, pelas eqs. (3.55) e (3.59), respectivamente. Além disso, $E_f \rightarrow \epsilon_i - \mu$, no modelo de Hubbard, enquanto $E_f \rightarrow E_f - \mu$, no modelo da rede de Anderson.

Resta-nos discutir como determinar o parâmetro $\tilde{\mu}$. Isso foi feito de duas maneiras distintas no nosso trabalho, uma no caso do modelo de Hubbard e outra no caso do modelo da rede de Anderson.

Para o *modelo de Hubbard*, baseamo-nos no trabalho original de H. Kajueter e G. Kotliar [9]. Nele, o parâmetro $\tilde{\mu}$ é determinado exigindo-se que a regra de soma de Friedel seja válida, uma vez que o cálculo é feito a temperatura nula. Fisicamente, a regra de soma de Friedel, aplicada, por exemplo, ao problema de uma impureza introduzida num gás de elétrons livres, garante que os estados que são deslocados para abaixo do nível de Fermi, pela introdução da impureza, sejam suficientes para acomodar a carga necessária para blindar a impureza [82]. No nosso trabalho, consideramos uma temperatura finita, porém pequena, de modo que a regra de soma deva ser aproximadamente válida. Assim, cada problema de uma impureza recai na resolução de um sistema de duas equações não-lineares para n e $\tilde{\mu}$, que é dado pela eq. (3.65) e pela regra de soma de Friedel [82, 83]

$$n = -i \sum_n G_f(i\omega_n) \frac{\partial}{\partial \omega_n} \Delta(i\omega_n) + i \sum_n \frac{\partial}{\partial \omega_n} \log G_f(i\omega_n). \quad (3.68)$$

No cálculo cujos resultados são apresentados no Capítulo 4, resolvemos primeiramente esse sistema de equações para $T = 0.003$ (em unidades de D), determinando as soluções para n e $\tilde{\mu}$ (em função de ϵ_i) para essa temperatura. Em seguida, resolvemos o problema para temperaturas mais elevadas considerando como valores para n e $\tilde{\mu}$ aqueles encontrados a $T = 0.003$. Para ganhar confiança no método, comparamos seus resultados com os obtidos usando o método de Monte Carlo quântico. Tal comparação também é apresentada no Capítulo 4. *Numericamente*, o sistema de duas equações não-lineares foi resolvido usando uma modificação do método híbrido de Powell.

Para o *modelo da rede de Anderson*, utilizamos uma das maneiras propostas no trabalho de M. Potthoff, T. Wegner e W. Nolting [10]. Nesse caso, a solução de

cada problema de uma impureza recai novamente num sistema de duas equações não-lineares para n e $\tilde{\mu}$, em que uma delas continua sendo dada pela eq. (3.65) e a outra é a seguinte

$$n = n_0. \quad (3.69)$$

Para cada temperatura diferente, o sistema de equações deve ser novamente resolvido. Comparações dos resultados desse método com aqueles obtidos a $T = 0$ usando diagonalização exata [10] e a temperatura finita usando Monte Carlo quântico [79] levam-nos a ter confiança na proposta acima. Aplicações específicas para o modelo da rede de Anderson na ausência de desordem [80, 81] também confirmam a confiabilidade do método. Como acima, uma modificação do método híbrido de Powell foi usada na solução numérica do sistema de equações não-lineares.

3.3 Incluindo efeitos de localização de Anderson

3.3.1 Localização de Anderson

Na seção anterior, discutimos o tratamento da TDCM na resolução do problema de um sistema desordenado. Dentro dessa aproximação, no caso da *rede de Anderson*, os elétrons tipo f não “vêm” as flutuações espaciais da função de onda dos elétrons de condução. Com o objetivo de ir além dessa aproximação, discutimos abaixo o modelo de Anderson [4, 84, 85], capaz de descrever a transição metal-isolante induzida pela desordem (localização de Anderson).

Consideremos novamente um gás de elétrons livres na presença de um potencial randômico, cujo Hamiltoniano é dado pela eq. (3.43) e está reproduzido abaixo

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

onde ϵ_i encontra-se distribuída segundo $P(\epsilon)$, que é caracterizada por uma largura W .

No limite em que $t \ll W$, podemos tratar H_1 como o Hamiltoniano não-perturbado e H_0 como uma perturbação. Dessa maneira, a expansão é feita em

torno dos estados com energias ϵ_i , localizados nos sítios da rede. A função de Green local é dada por

$$G_i(\omega^+) = \frac{1}{\omega^+ - \epsilon_i - \Sigma_i(\omega^+)}, \quad (3.70)$$

onde $\omega^+ = \omega + is$, com $s \rightarrow 0^+$, e $\Sigma_i(\omega^+)$ é a autoenergia. A parte real de $\Sigma_i(\omega^+)$ corresponde à correção na energia do estado não-perturbado localizado no sítio i , enquanto a parte imaginária dá a taxa de decaimento desse estado para sítios vizinhos, devido ao “hopping”.

Na *expansão perturbativa*, a primeira correção não-nula para a autoenergia é a de segunda ordem

$$\Sigma_i(\omega^+) = t^2 \sum_{j \neq i} \frac{1}{\omega^+ - \epsilon_j}. \quad (3.71)$$

Fisicamente, por essa correção, a função de onda do estado com energia ϵ_i se estende apenas nas direções em que $|\epsilon_i - \epsilon_j| \ll t$. Como a energia ϵ_j encontra-se distribuída, essa contribuição, em geral, não é significativa e existe a tendência da função de onda de se localizar numa determinada região do espaço.

Consideremos agora o decaimento do estado no sítio i devido ao “hopping”. Até segunda ordem, a parte imaginária da autoenergia é dada por

$$\text{Im}\Sigma_i(\omega^+) = -st \sum_{i \neq j} \frac{1}{(\omega - \epsilon_j)^2 + s^2}. \quad (3.72)$$

Olhando para o centro do espectro ($\omega = 0$) e fazendo a média sobre a distribuição $P(\epsilon)$, suposta uniforme, ficamos com

$$\begin{aligned} \langle \text{Im}\Sigma_i(0^+) \rangle &= -sz t^2 \int \frac{d\epsilon P(\epsilon)}{\epsilon^2 + s^2} \\ &= -2zt^2 \arctg\left(\frac{W}{2s}\right) \\ &\rightarrow -\pi z t^2 \quad (s \rightarrow 0^+), \end{aligned} \quad (3.73)$$

onde z é o número de coordenação da rede. O fato do valor médio de $\text{Im}\Sigma_i(0^+)$ ser finito, como calculado acima, deveria significar que o sistema encontra-se num estado estendido. No entanto, a probabilidade de que, para o sítio i , $\text{Im}\Sigma_i(0^+)$ assumo esse valor médio é muito pequena, pois a distribuição dessa grandeza é

singular. Portanto, o valor médio pode não ser um bom indicativo do estado do sistema.

Consideremos então uma outra grandeza, $X = \text{Im}\Sigma_i(0^+)/s$, cuja distribuição é dada por [85]

$$P(X) \propto \frac{e^{-s/X}}{X^{3/2}}. \quad (3.74)$$

Para estados estendidos, $\text{Im}\Sigma_i(0^+)$ é finita, ou seja, $X \sim 1/s$. Nesse caso, porém, a probabilidade $P(X \sim 1/s)$ é proporcional a $s^{3/2}$, que tende a zero no limite $s \rightarrow 0^+$. Por outro lado, o valor mais provável da distribuição (valor típico) é $\langle X \rangle_{\text{típico}} \sim s$, implicando que $\langle \text{Im}\Sigma_i(0^+) \rangle_{\text{típico}} \rightarrow 0$ e o sistema apresenta-se num estado localizado.

A principal conclusão é a de que devemos trabalhar com a distribuição de uma grandeza, pois seu valor médio pode não ser um bom indicativo do estado do sistema. Segundo Anderson [84],

... nenhum átomo real é um átomo médio, e nenhum experimento é realizado em um “ensemble” de amostras. (...) esse é o passo importante, e profundamente novo, dado aqui: a necessidade de se trabalhar com distribuições e não médias. [...no real atom is an average atom, nor is an experiment ever done on an ensemble of samples. (...) this is the important, and deeply new, step taken here: the willingness to deal with distributions, not averages.]

É por isso que, para incluir efeitos de localização de Anderson, temos que ir além do tratamento da TDCM, em que, no modelo da rede de Anderson, apenas a função de Green *média* dos elétrons de condução é vista pelos elétrons tipo f .

Um outro tratamento do problema da localização de Anderson foi apresentado por R. Abou-Chacra, P. W. Anderson e D. J. Thouless [86]. Esse método consiste num cálculo autoconsistente, que também incorpora correções na autoenergia até segunda ordem e que se torna exato para a rede de Bethe, que não contém “loops”.

Continuemos considerando um gás de elétrons livres na presença de um potencial randômico. A função de Green local no sítio i , no eixo imaginário, é

$$G_i(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_i - \Sigma_i(i\omega_n)}, \quad (3.75)$$

onde $\Sigma_i(i\omega_n)$ é a autoenergia no sítio i , que corrigida até segunda ordem, usando a *teoria de espalhamento*, é dada por [86]

$$\Sigma_i(i\omega_n) = t^2 \sum_{j=1}^z \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_j - \Sigma_j^{(i)}(i\omega_n)} \quad (j \neq i). \quad (3.76)$$

$\Sigma_j^{(i)}(i\omega_n)$ é a autoenergia no sítio j com o sítio i removido e satisfaz uma equação semelhante à eq. (3.76), mas com o sítio i removido de todas as autoenergias e do somatório, ou seja,

$$\Sigma_j^{(i)}(i\omega_n) = t^2 \sum_{k=1}^{z-1} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_k - \Sigma_k^{(ij)}(i\omega_n)} \quad (k \neq i, j). \quad (3.77)$$

Do mesmo modo, a função de Green local no sítio j com o sítio i removido fica

$$G_j^{(i)}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_j - \Sigma_j^{(i)}(i\omega_n)}. \quad (3.78)$$

As correções dadas pelas eqs. (3.76) e (3.77) para a autoenergia são as únicas não-nulas para o caso particular da rede de Bethe. Além disso, considerando o “hopping” apenas entre primeiros vizinhos, $\Sigma_k^{(ij)}(i\omega_n) \equiv \Sigma_k^{(j)}(i\omega_n)$, pois, ao remover o sítio j , os sítios k e i se tornam desconectados.

A partir das eqs. (3.77) e (3.78), usando que $\Sigma_k^{(ij)}(i\omega_n) \equiv \Sigma_k^{(j)}(i\omega_n)$, chegamos a uma equação estocástica para a função de Green com um sítio removido

$$G_j^{(i)}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_j - t^2 \sum_{k=1}^{z-1} G_k^{(j)}(i\omega_n)} \quad (k \neq i, j), \quad (3.79)$$

cujas solução é obtida quando a distribuição $P(g, h)$ de $G_j^{(i)}(i\omega_n) \equiv g + ih$ se torna igual à distribuição $P(r, s)$ de

$$\frac{1}{i\omega_n - \epsilon_j - t^2 \sum_{k=1}^{z-1} G_k^{(j)}(i\omega_n)} \equiv r + is \quad (k \neq i, j). \quad (3.80)$$

Vale ressaltar que esse tratamento de desordem recai na CPA no limite $z \rightarrow \infty$. De fato, notando que, nesse limite,

$$t^2 \sum_{k=1}^{z-1} G_k^{(j)}(i\omega_n) = z t^2 \left[\frac{1}{z} \sum_{k=1}^{z-1} G_k^{(j)}(i\omega_n) \right] \rightarrow t^2 \bar{G}(i\omega_n) \quad (3.81)$$

uma vez que o “hopping” deve ser reescalado como $t \rightarrow t/\sqrt{z}$ e, para a rede de Bethe, $G_k^{(j)}(i\omega_n) = G_k(i\omega_n)$, a eq. (3.79) se reduz à equação válida na CPA.

3.3.2 Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística

A teoria autoconsistente apresentada acima para o tratamento da desordem não incorpora efeitos de interação elétron-elétron. Como nosso objeto de estudo são sistemas desordenados correlacionados, utilizamos a Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística (TDCME) [5, 87], que é uma extensão da TDCM [60], discutida no início deste capítulo. A TDCME incorpora não apenas efeitos de correlação, como a TDCM, mas também efeitos de localização de Anderson, como a teoria autoconsistente de R. Abou-Chacra, P. W. Anderson e D. J. Thouless [86].

Como implementamos numericamente a TDCME apenas para o caso do *modelo da rede de Anderson*, não apresentamos aqui as equações válidas para o modelo de Hubbard. Consideremos então o Hamiltoniano de uma rede de Anderson com desordem na energia ϵ_i dos elétrons de condução, dado pela eq. (3.57) e reproduzido abaixo

$$\begin{aligned} H = & \sum_{i,j,\sigma} [(\epsilon_i - \mu)\delta_{ij} - t] c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + (E_f - \mu) \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \\ & + V \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{fi\uparrow} n_{fi\downarrow}, \end{aligned} \quad (3.82)$$

onde o “hopping” está restrito aos primeiros vizinhos.

Segundo a descrição da TDCM, devemos olhar para um único elétron tipo f e integrar sobre os graus de liberdade dos demais elétrons, ficando com a seguinte ação efetiva, que descreve o problema auxiliar de uma impureza no sítio j [88, 61, 62]

$$\begin{aligned} S^{(i)}(j) = & \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' f_{j\sigma}^\dagger(\tau) [\delta(\tau - \tau') (\partial_{\tau} + E_f - \mu) \\ & + \Delta_j(\tau - \tau')] f_{j\sigma}(\tau') + U \int_0^{\beta} d\tau n_{fj\uparrow}(\tau) n_{fj\downarrow}(\tau), \end{aligned} \quad (3.83)$$

onde o superescrito (i) significa que o sítio i foi removido da rede. $\Delta_j(\tau - \tau')$ corresponde à função de hibridização, que, no espaço de frequência, é dada por

$$\Delta_j(i\omega_n) = \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - \epsilon_j - t^2 \sum_{k=1}^{z-1} G_{ck}^{(j)}(i\omega_n)} \quad (k \neq i), \quad (3.84)$$

onde z é a conectividade da rede. A TDCME recai na TDCM no limite em que $z \rightarrow \infty$.

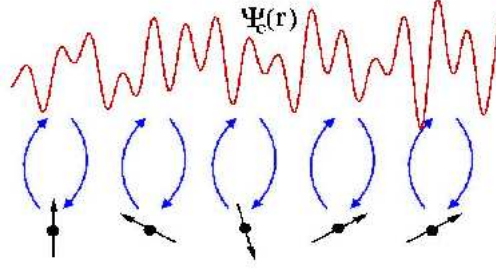


Figura 3.4: Representação esquemática do cálculo autoconsistente envolvendo elétrons de condução, cuja função de onda apresenta variações espaciais, e elétrons tipo f , que constituem spins localizados.

A função de Green dos elétrons de condução, que aparece na equação acima, é dada por

$$\left[G_{ck}^{(j)}(i\omega_n) \right]^{-1} = i\omega_n + \mu - \epsilon_k - t^2 \sum_{l=1}^{z-1} G_{cl}^{(k)}(i\omega_n) - \Phi_k(i\omega_n) \quad (l \neq j), \quad (3.85)$$

onde $\Phi_k(i\omega_n)$ corresponde à desordem efetiva vista pelos elétrons de condução

$$\Phi_k(i\omega_n) = \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_{fk}(i\omega_n)} \quad (3.86)$$

e $\Sigma_{fk}(i\omega_n)$ é a autoenergia do problema de uma impureza descrito pela ação da eq. (3.83). A eq. (3.85) acima é a equação correspondente, no caso correlacionado, à eq. (3.79), obtida na teoria de R. Abou-Chacra, P. W. Anderson e D. J. Thouless [86].

No cálculo em que usamos a TDCME, os problemas de uma impureza definidos pela eq. (3.83) também são resolvidos usando teoria de perturbação em U , como discutido na p. 48.

A solução das eqs. (3.83 - 3.86) é obtida através de um cálculo autoconsistente, que deve continuar até que as distribuições de $G_c(i\omega_n)$ nos dois lados da eq. (3.85) sejam iguais¹. A Figura 3.4 apresenta de forma esquemática essa autoconsistência, também presente no fluxograma da Figura 3.5, que foi utilizado no cálculo

¹Espera-se que o comportamento qualitativo das grandezas com um sítio retirado seja o mesmo do problema em que todos os sítios estão presentes na rede. Por isso, resolvemos apenas o problema com um sítio retirado.

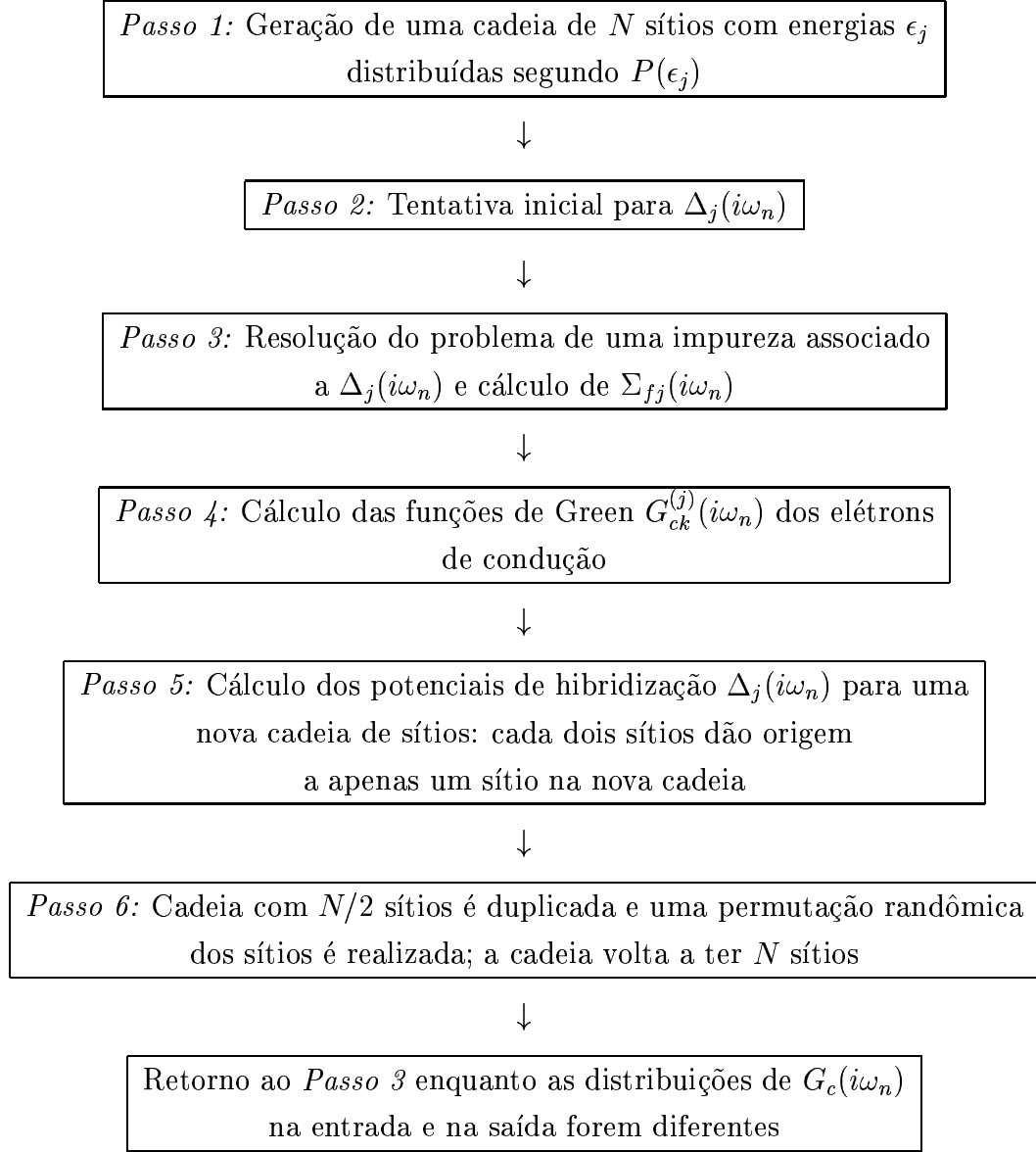


Figura 3.5: Fluxograma utilizado no cálculo numérico.

numérico. A impureza do sítio j , que é descrita pela ação efetiva da eq. (3.83), “vê” as flutuações da função de onda dos elétrons de condução através da função de hibridização $\Delta_j(i\omega_n)$. Por outro lado, os elétrons de condução “vêm” as várias impurezas através da função $\Phi_k(i\omega_n)$. Dessa forma, as diferentes impurezas também encontram-se correlacionadas, via elétrons de condução. Com relação ao cálculo numérico cujos resultados são apresentados no Capítulo 5, resolvemos as eqs. (3.83 - 3.86) seguindo o fluxograma da Figura 3.5, para uma rede de Bethe com número de coordenação $z = 3$, construída a partir de $N = 70 - 100$ sítios.

Capítulo 4

Modelo de Hubbard: resultados

Apresentamos, neste capítulo, os resultados para o *modelo de Hubbard* na presença de desordem na energia local dos elétrons de condução, obtidos usando a Teoria Dinâmica de Campo Médio, como discutido no Capítulo 3. Cada problema de uma impureza foi resolvido usando teoria de perturbação em U , impondo-se a regra de soma de Friedel, como detalhado na p. 48. Como vimos anteriormente, o modelo de Hubbard pode ser usado para descrever a transição metal-isolante de Mott. Os resultados que apresentamos a seguir se restringem à fase metálica. Na primeira seção, discutimos os resultados para a energia renormalizada dos elétrons de condução; na segunda, os resultados para a taxa de espalhamento, e, na terceira, para a massa efetiva. Os resultados aqui apresentados estão no artigo que submetemos para publicação na Phys. Rev. Lett. [89].

Antes de mais nada, definamos algumas das grandezas cujos resultados são apresentados neste capítulo. De acordo com o discutido no Capítulo 3, dentro da TDCM, na presença de desordem, o problema do modelo de Hubbard é mapeado num “ensemble” de problemas de uma impureza. A função de Green de cada problema de uma impureza é dada pela eq. (3.63), com $E_F \rightarrow \epsilon_i - \mu$, e pode ser reescrita como

$$G_{fi}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \{\epsilon_i - \mu + \text{Re}[\Sigma_i(i\omega_n)]\} - \Delta(i\omega_n) - i\text{Im}[\Sigma_i(i\omega_n)]}. \quad (4.1)$$

Assim, a presença de interação no sistema, representada pela autoenergia, faz com que a energia despida dos elétrons de condução seja renormalizada pela parte real de $\Sigma_i(i\omega_n)$ próximo à superfície de Fermi. Uma energia renormalizada para os elétrons

de condução pode então ser definida como $\epsilon_i - \mu + \text{Re}[\Sigma_i(\omega \approx 0)]$. Por outro lado, como os problemas de uma impureza são resolvidos, no nosso trabalho, usando teoria de perturbação (TP) até segunda ordem em U , $\text{Im}[\Sigma_i(i\omega_n)]$ na equação acima é diferente de zero. Isso significa que nosso cálculo inclui *efeitos de espalhamento inelástico*. Esses efeitos estão presentes, por exemplo, na taxa total de espalhamento próximo à superfície de Fermi, que é dada por $\tau^{-1} = -2\text{Im}[\Sigma_c(\omega \approx 0)]$. $\Sigma_c(i\omega_n)$ é a autoenergia dos elétrons de condução, definida a partir de

$$\bar{G}_c(i\omega_n) = \int_{-D}^D d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)}{i\omega_n + \mu - \epsilon - \Sigma_c(i\omega_n)}, \quad (4.2)$$

onde $\bar{G}_c(i\omega_n)$ é a solução encontrada resolvendo-se a eq. (3.56) e $\rho(\epsilon)$ é a densidade de estados (DE) dos elétrons de condução no caso limpo, que tem meia largura igual a D e é dada pela eq. (3.9). Podemos também calcular separadamente as taxas de espalhamento elástico e inelástico. A primeira envolve apenas a parte real de $\Sigma_i(\omega \approx 0)$ e é dada por $-2\text{Im}[\Sigma_c^{elast}(\omega \approx 0)]$, onde $\Sigma_c^{elast}(i\omega_n)$ é obtida num cálculo autoconsistente, também definido pela eq. (3.56), mas em que a função de Green de cada problema de uma impureza é dada por

$$G_{fi}^{elast}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \{\epsilon_i - \mu + \text{Re}[\Sigma_i(\omega \approx 0)]\} - \Delta(i\omega_n)}, \quad (4.3)$$

onde $\Delta(i\omega_n)$ continua sendo dada pela eq. (3.55). O cálculo da taxa de espalhamento inelástico é semelhante ao da taxa de espalhamento elástico, mas, nesse caso, apenas a parte imaginária de $\Sigma_i(\omega \approx 0)$ está presente, ou seja, a função de Green de cada problema de uma impureza é a seguinte

$$G_{fi}^{inelast}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \Delta(i\omega_n) - i\text{Im}[\Sigma_i(i\omega_n)]}. \quad (4.4)$$

Resultados para a energia renormalizada dos elétrons de condução e as taxas de espalhamento (total, elástica e inelástica) são apresentados nas duas primeiras seções a seguir.

4.1 Energia renormalizada

Os resultados para a energia renormalizada (eixo x) em função da energia despida (eixo y), para diferentes valores da temperatura, T , estão na Figura 4.1. Os valores numéricos das grandezas consideradas neste capítulo são dados em unidades

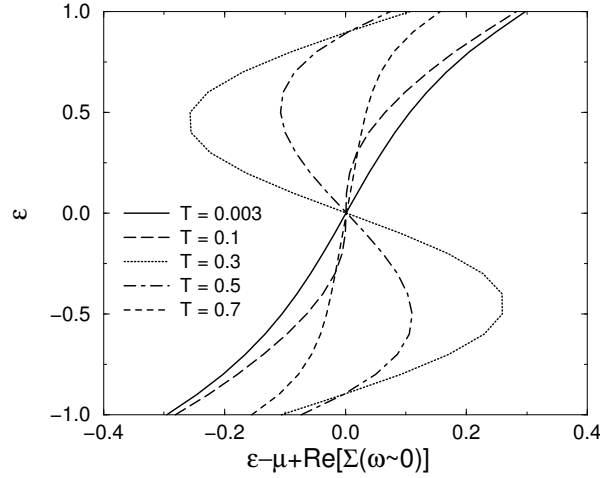


Figura 4.1: Energia renormalizada (eixo x) em função da energia despida (eixo y) para diferentes valores da temperatura. Os parâmetros utilizados no cálculo foram $U = W = 2$ e $\mu = 1$ (semi-preenchimento).

de D . Na figura em questão, $U = 2$ e ϵ segue uma distribuição uniforme de largura $W = 2$. Uma extrapolação polinomial foi usada para determinar o valor da autoenergia próximo à superfície de Fermi, a partir dos valores nas frequências de Matsubara. De acordo com a Figuras 4.1, para $T < 0.3$, a energia renormalizada para um determinado ϵ positivo (negativo) diminui (aumenta) à medida que T aumenta, trocando inclusive de sinal. Para temperaturas acima desse valor, a energia renormalizada passa a crescer (diminuir), voltando inclusive a apresentar o mesmo sinal que a energia despida, para temperaturas ainda maiores. Assim, para temperaturas intermediárias, em que a energia renormalizada é, em módulo, menor que a energia despida e ainda apresenta um sinal diferente desta, existe um efeito de *blindagem negativa*. Esse efeito, embora inesperado, só está presente para U grande, onde, como discutimos abaixo, a contribuição inelástica para a taxa de espalhamento domina sobre a contribuição elástica. Portanto, nesse caso, a blindagem negativa pouco afeta as propriedades de transporte do sistema.

4.1.1 Comparação com resultados de Monte Carlo quântico

Com o intuito de confirmar os efeitos de blindagem negativa presentes nos resultados da Figura 4.1, que foram obtidos usando teoria de perturbação em U , buscamos

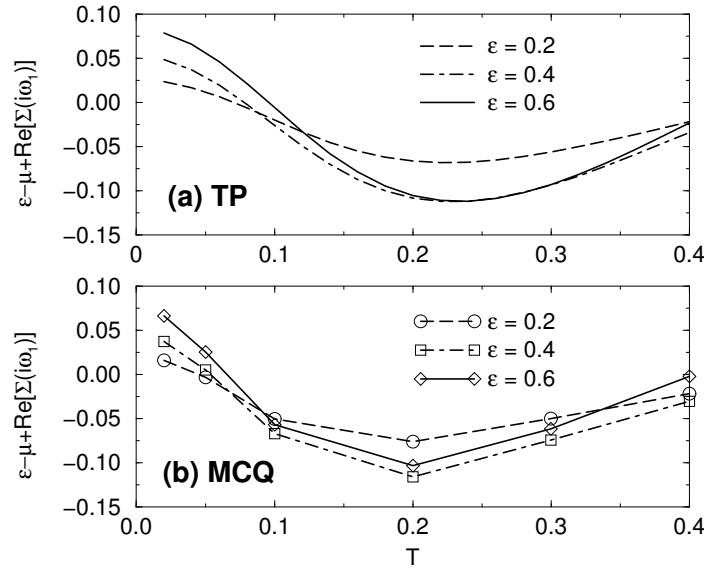


Figura 4.2: Energia renormalizada em função da temperatura para o problema de uma impureza com diferentes valores da energia despida, obtida usando (a) TP e (b) MCQ. ω_1 é a primeira frequência de Matsubara em cada temperatura. Os parâmetros usados no cálculo foram $U = 3$, $\mu = 1.5$ e $L = 128$, onde L é, no MCQ, o número de intervalos na discretização do tempo imaginário, ou seja, $\Delta\tau = \beta/L$, pois τ vai de 0 a $\beta = 1/T$.

compará-los com os resultados obtidos usando um outro método na resolução do problema de uma impureza. Em particular, comparamos nossos resultados com aqueles obtidos usando Monte Carlo quântico (MCQ) [90], que é um dos métodos disponíveis menos contestados como solução do problema de uma impureza. Modificando um código que usa o método de MCQ para resolver o modelo de Hubbard sem desordem, pudemos obter resultados para o problema de uma impureza e também para o modelo de Hubbard com desordem binária.

A Figura 4.2 mostra a energia renormalizada em função da temperatura para o problema de uma impureza com banho fixo, para diferentes valores da energia despida, ε . Nesse caso, não extrapolamos a autoenergia para $\omega \approx 0$, mas usamos seu valor na primeira frequência de Matsubara. A figura mostra os resultados obtidos usando tanto TP como MCQ. Para todos os valores de ε apresentados, a energia renormalizada primeiro decresce e então cresce com o aumento da temperatura.

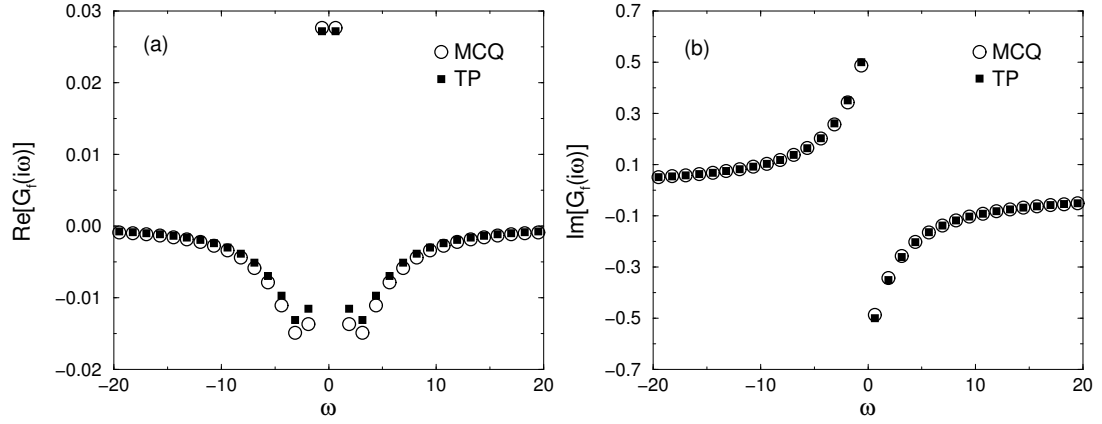


Figura 4.3: Partes (a) real e (b) imaginária da função de Green em função da frequência para *o problema de uma impureza*, obtidas usando TP e MCQ. Os parâmetros utilizados foram $U = 3$, $\epsilon = 0.4$, $T = 0.2$, $\mu = 1.5$ e $L = 128$ (no MCQ).

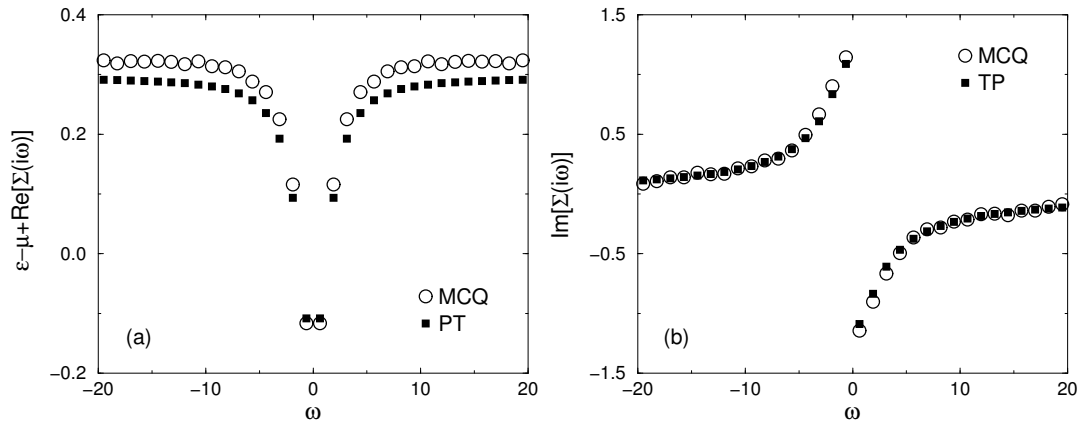


Figura 4.4: (a) Parte real ($+\epsilon - \mu$) e (b) parte imaginária da auto-energia em função da frequência para *o problema de uma impureza*, obtidas usando TP e MCQ. Mesmos parâmetros da Figura 4.3.

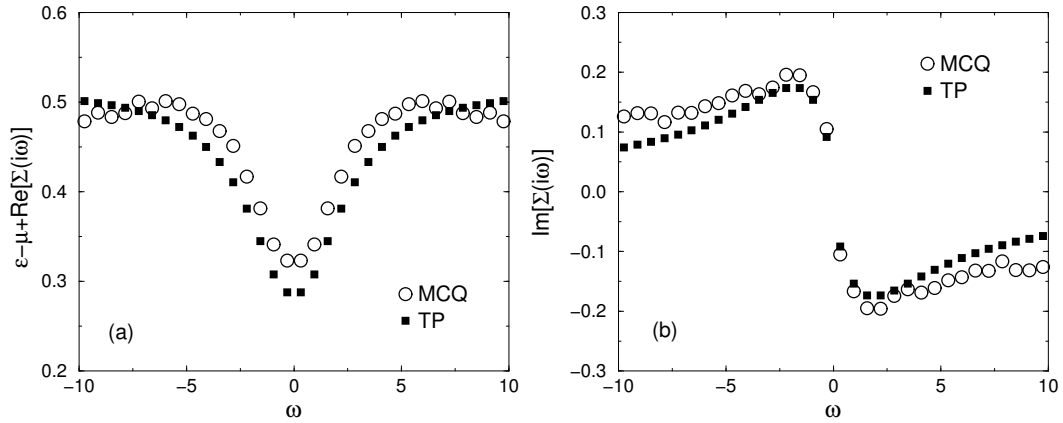


Figura 4.5: (a) Parte real ($+\epsilon - \mu$) e (b) parte imaginária da autoenergia em função da frequência, correspondentes à impureza com $\epsilon = W/2$, para o *modelo de Hubbard com desordem binária*. São apresentados os resultados obtidos usando TP e MCQ. Os parâmetros utilizados foram $U = W = 2$, $T = 0.1$, $\mu = 1$ e $L = 64$ (no MCQ).

Além disso, para temperaturas intermediárias, as energias despida e renormalizada apresentam sinais diferentes. Em outras palavras, o efeito de *blindagem negativa*, presente nos resultados da Figura 4.1, para o *modelo de Hubbard* usando TP, é confirmado pelos resultados para o *problema de uma impureza*. Esse comportamento está ainda em total acordo com os resultados de MCQ, como pode ser visto na Figura 4.2 (b).

A Figura 4.3 apresenta uma comparação dos resultados obtidos nos dois métodos para as partes real e imaginária da função de Green em função da frequência, ainda para o *problema de uma impureza*. A Figura 4.4 mostra a mesma comparação para a parte real ($+\epsilon - \mu$) e a parte imaginária da autoenergia. A concordância observada entre os dois métodos é muito boa, dando-nos confiança no método de resolução do problema de uma impureza assimétrico, a temperatura finita, que estamos utilizando (descrito na p. 48).

Os resultados para o *modelo de Hubbard com desordem binária* são apresentados nas Figuras 4.5 e 4.6. Nesse caso, os valores possíveis para ϵ são $-W/2$ e $W/2$. A Figura 4.5 mostra os resultados para a parte real ($+\epsilon - \mu$) e a parte imaginária da autoenergia em função da frequência, correspondentes ao problema de uma impureza

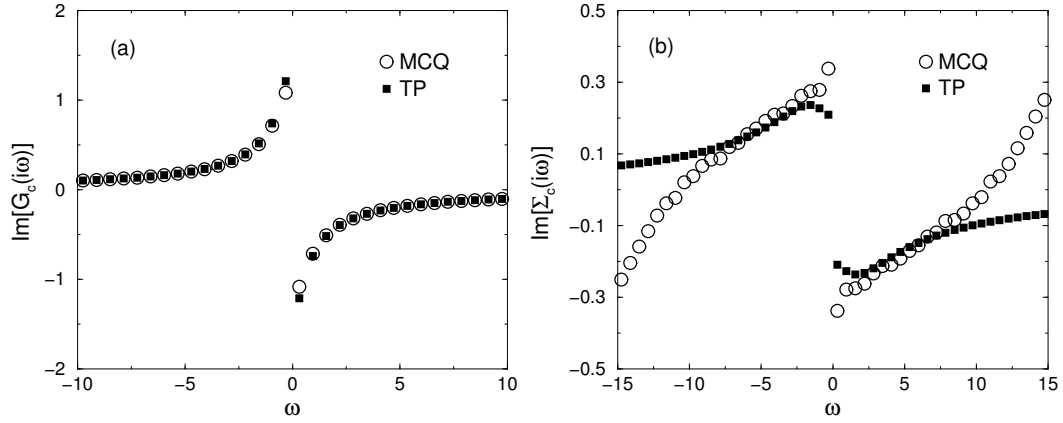


Figura 4.6: Partes imaginárias (a) da função de Green e (b) da autoenergia dos elétrons de condução em função da frequência para o modelo de Hubbard com desordem binária, obtidas usando TP e MCQ. Mesmos parâmetros da Figura 4.5.

com $\epsilon = W/2$. A Figura 4.6 apresenta os resultados para as partes imaginárias da função de Green e da autoenergia dos elétrons de condução em função da frequência. Como o problema da rede apresenta simetria partícula-buraco, pois estamos usando $\mu = U/2$, as partes reais dessas grandezas são nulas. A discordância entre os resultados de TP e MCQ para $\text{Im}[\Sigma_c(i\omega)]$ [Figura 4.6 (b)] para $\omega > 5$ reflete uma limitação do cálculo de MCQ na região de altas frequências. Essa limitação é mais crítica no caso da autoenergia, que é obtida de uma diferença entre duas funções, ou seja, ela é calculada a partir das funções de Green não-interagente e interagente, pela equação de Dyson. Ainda assim, de maneira geral, a concordância entre os dois métodos continua boa, embora não seja tão boa quanto no caso do problema de uma impureza. Uma explicação possível é que, no processo de convergência, presente no cálculo da rede, os dois métodos cheguem a resultados um pouco diferentes para a DE dos elétrons de condução. No caso do problema de uma impureza, nos dois métodos considerados, a impureza “vê” o mesmo banho e é o método de resolução do problema de uma impureza que é diferente. No problema da rede, além dos métodos serem diferentes, o banho é calculado de maneira autoconsistente e isso pode levar os resultados a diferirem quantitativamente, como ocorre. No entanto, as figuras apresentadas mostram claramente que os dois métodos concordam qualitativamente.

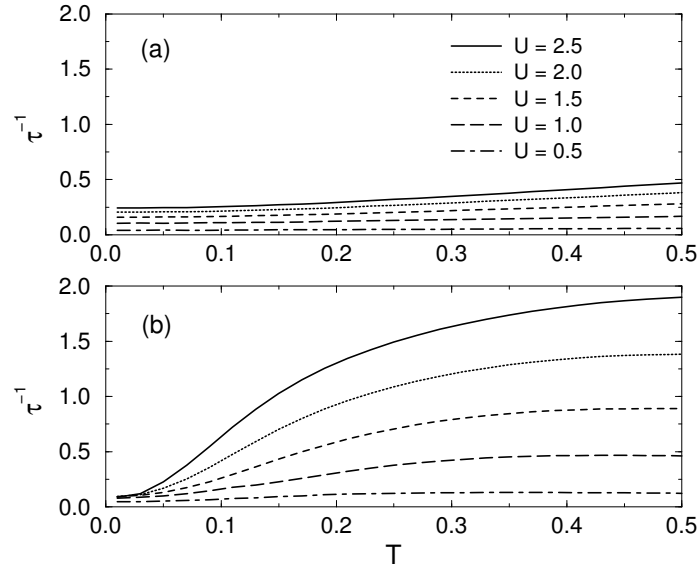


Figura 4.7: Taxa total de espalhamento em função da temperatura para diferentes valores de U e $W = U$. Os resultados foram obtidos usando (a) HF e (b) TP até segunda ordem em U . A legenda em (a) também se aplica a (b) e $\mu = U/2$.

4.2 Taxa de espalhamento

Os resultados para a taxa total de espalhamento próximo à superfície de Fermi em função da temperatura para diferentes valores de U são apresentados na Figura 4.7. A energia despida segue uma distribuição uniforme de largura W , com $W = U$ na figura em questão. Como na primeira seção deste capítulo, usamos uma extrapolação polinomial para obter a autoenergia próximo à superfície de Fermi, a partir dos valores nas frequências de Matsubara. Na Figura 4.7, os resultados usando TP até segunda ordem em U são comparados aos resultados na aproximação Hartree-Fock (HF), que equivale à primeira correção em TP. O mais marcante nessa comparação é que, à medida que U aumenta, enquanto o resultado de HF continua mostrando uma fraca dependência da taxa de espalhamento com a temperatura, o resultado de TP passa a apresentar uma dependência bem mais forte. Para $U = 2.5$, por exemplo, a queda na taxa de espalhamento à medida que a temperatura diminui é de aproximadamente uma ordem de grandeza. É interessante notar que uma queda comparável é observada experimentalmente em sistemas de elétrons bidimensionais [12], como

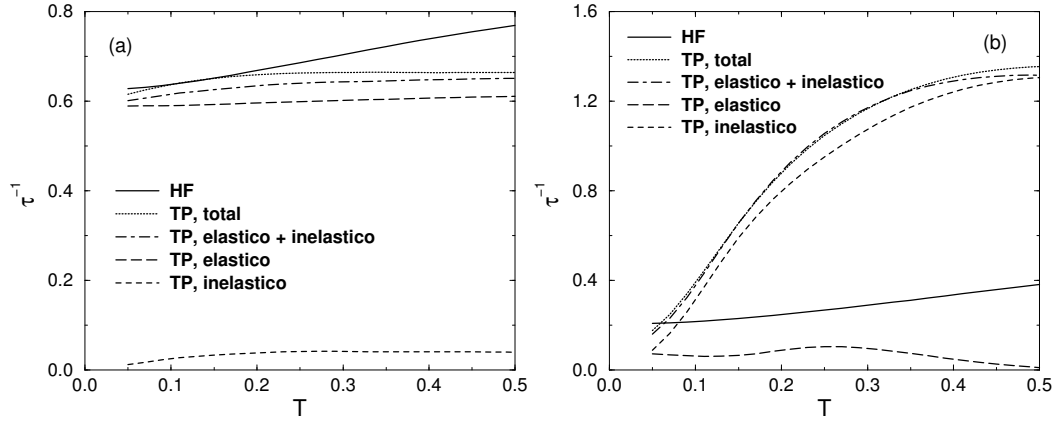


Figura 4.8: Taxa de espalhamento em função da temperatura em dois casos distintos: (a) $U = 0.5$ e (b) $U = 2.0$. Os outros parâmetros usados no cálculo foram $W = 2.0$ e $\mu = U/2$.

no resultado reproduzido na Figura 1.1 ¹.

Analisemos agora as contribuições dos processos elásticos e inelásticos à taxa total de espalhamento. A Figura 4.8 mostra a taxa de espalhamento em função da temperatura para $U = 0.5$ e $U = 2.0$. Em ambos os casos, ϵ segue uma distribuição uniforme de largura $W = 2.0$. Os resultados dentro da aproximação HF também são mostrados. Para o cálculo até segunda ordem em U , mostramos separadamente as contribuições dos processos elásticos e inelásticos. Para $U = 0.5$, a contribuição elástica para a taxa espalhamento domina sobre a contribuição inelástica. Como resultado, a taxa total de espalhamento apresenta uma fraca dependência com a temperatura e seu comportamento é similar tanto em TP como em HF. Para $U = 2.0$, no entanto, a taxa total de espalhamento dentro da TP tem uma forte dependência com a temperatura. Como já observado na Figura 4.7, ela diminui praticamente uma ordem de grandeza à medida que a temperatura diminui, o que está de acordo com os resultados experimentais. Olhando para as contribuições elástica e inelástica, vemos claramente que os efeitos inelásticos dominam a dependência com a temperatura da taxa de espalhamento. Por outro lado, o resultado na aproximação HF mostra uma dependência bem mais fraca. Enfatizamos que, tanto no cálculo HF como nas teorias da literatura citadas no Capítulo 1, efeitos inelásticos não estão

¹A questão de como mapear a descrição de elétrons numa rede com coordenação infinita para o problema real de elétrons bidimensionais, embora muito pertinente, é de difícil resposta.

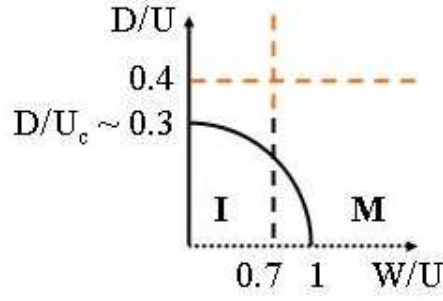


Figura 4.9: Diagrama de fase para o modelo de Hubbard na presença de desordem uniforme, dentro da TDCM. **I** indica a fase isolante e **M**, a metálica.

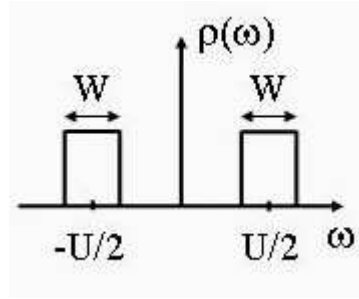


Figura 4.10: Densidade de estados em função da frequência para o modelo de Hubbard, no limite atômico, dentro da TDCM.

presentes. Nossa principal conclusão é, então, que os efeitos inelásticos têm que ser levados em consideração na busca de um entendimento dos resultados experimentais. Um último comentário a respeito dessa figura diz respeito à regra de Matthiessen, que considera os processos de espalhamento como independentes, de modo que a taxa total de espalhamento pode ser obtida somando-se as contribuições dos espalhamentos elástico e inelástico. Segundo a Figura 4.8, a regra de Matthiessen é bem satisfeita tanto para $U = 0.5$, quanto para $U = 2.0$.

Embora não possamos descrever a fase isolante, uma vez que impomos a regra de soma de Friedel, válida apenas na fase metálica, podemos analisar resultados em situações mais próximas à transição metal-isolante do que as analisadas até aqui. Com esse objetivo, olhemos para o diagrama de fase do modelo de Hubbard na presença de uma desordem uniforme de largura W , dentro da TDCM (que não inclui efeitos de localização de Anderson), que está na Figura 4.9. O eixo y corresponde

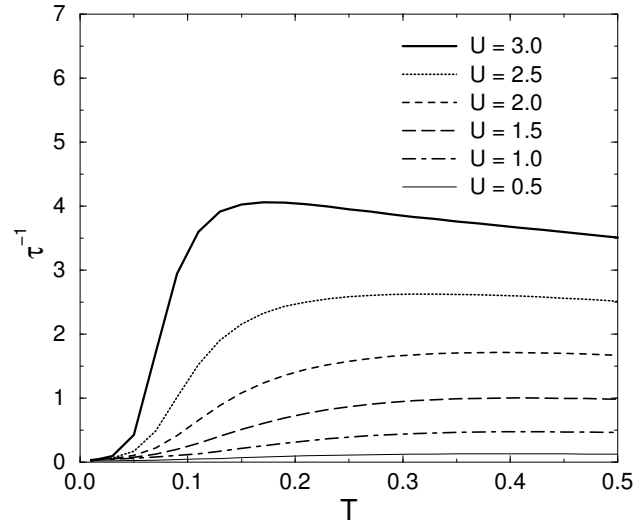


Figura 4.11: Taxa total de espalhamento em função da temperatura para diferentes valores de U e $W/U = 0.7$. O outro parâmetro utilizado foi $\mu = U/2$.

ao caso limpo. Nesse caso, à medida que U aumenta, atingindo um valor crítico, $U_c \approx 3$, o sistema passa pela transição metal-isolante de Mott. O eixo x, por sua vez, corresponde ao limite atômico, em que $t \rightarrow 0$. Na ausência de desordem ($W/U = 0$), a DE dos elétrons de condução apresenta duas funções delta de Dirac localizadas em $-U/2$ e $U/2$. Para uma desordem W diferente de zero, a DE apresenta duas bandas de largura W em torno desses mesmos valores, como na Figura 4.10. À medida que W aumenta, tornando-se igual a U , o sistema deixa de ter o comportamento de um isolante com “gap” para ser um isolante sem “gap” (no eixo, $t = 0$). Saindo do eixo y, para qualquer valor de t diferente de zero, essa transição corresponde a ir de um estado isolante para um estado metálico. Para finalizar o entendimento do diagrama de fase da Figura 4.9, entre um eixo e outro, uma linha contínua separa as fases metálica e isolante.

A taxa total de espalhamento em função da temperatura para diferentes valores de U e $W/U = 0.7$, que corresponde a “andar” sobre a linha vertical tracejada da Figura 4.9, sempre na região metálica, é apresentada na Figura 4.11. Como discutimos anteriormente, a dependência com a temperatura da taxa de espalhamento é pequena quando U é pequeno, mas se torna grande à medida que a interação aumenta. Além disso, para U grande, em comparação com a Figura 4.7, o cresci-

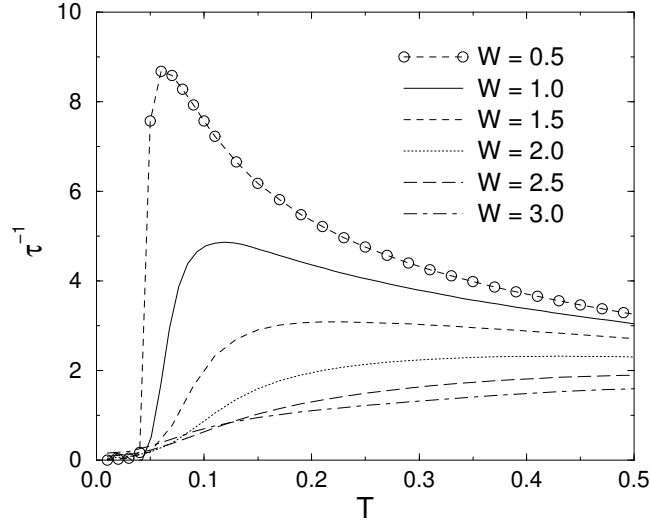


Figura 4.12: Taxa total de espalhamento em função da temperatura para diferentes valores de W e $U = 2.5$. O outro parâmetro utilizado foi $\mu = 1.25$.

mento da taxa de espalhamento à medida que a temperatura aumenta é mais brusco, dando-se num intervalo menor de temperatura. Para $U = 2.5$, um comportamento não-monotônico começa a aparecer. Esse comportamento é mais pronunciado no resultado para $W = 0.5$ da Figura 4.12. Essa figura mostra a taxa total de espalhamento em função da temperatura para $U = 2.5$ e diferentes valores de W , o que corresponde a “andar” sobre a linha horizontal tracejada da Figura 4.9. Para U fixo, a dependência da taxa de espalhamento com a temperatura é pequena para W grande e se torna grande à medida que a desordem diminui. Com relação ao comportamento não-monotônico apresentado nesses gráficos, notamos que ele aparece à medida que “andamos” em direção à região isolante no diagrama de fase da Figura 4.9 e sinaliza uma proximidade com a transição metal-isolante. Isso vale tanto para os resultados da Figura 4.11, em que “andamos” sobre a linha vertical tracejada de cima para baixo, como para os resultados da Figura 4.12, em que “andamos” sobre a linha horizontal tracejada da direita para a esquerda. Portanto, embora não sejamos capazes de descrever o sistema na fase isolante, reforçamos que a descrição na fase metálica está de bom acordo com o que é observado experimentalmente. As medidas de resistividade em sistemas de elétrons bidimensionais mostram não apenas uma queda brusca de uma ordem de grandeza à medida que a temperatura

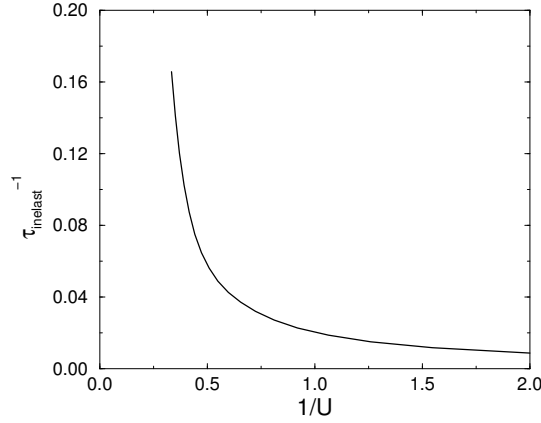


Figura 4.13: Taxa de espalhamento inelástico em função de $1/U$ para $W = U$. Os outros parâmetros utilizados foram $T = 0.05$ e $\mu = U/2$.

decrece, mas também um comportamento não-monotônico logo acima da densidade crítica [12]. (Veja novamente o resultado experimental reproduzido na Figura 1.1.)

O aumento da importância do espalhamento inelástico à medida que U cresce, presente nos resultados da Figura 4.8, pode também ser analisado na Figura 4.13, que mostra a taxa de espalhamento inelástico, $\tau_{inelast}^{-1}$, em função de $1/U$ a uma temperatura fixa, $T = 0.05$. À medida que $1/U$ diminui, em direção à transição metal-isolante, a taxa de espalhamento inelástico aumenta. Em outras palavras, o tempo de vida inelástico diminui à medida que se se aproxima da transição. Esse comportamento está de acordo com outro resultado experimental discutido no Capítulo 1 para sistemas de elétrons bidimensionais. Estamos nos referindo ao resultado da Figura 1.6, a partir do qual pode-se concluir que as correções da teoria de localização fraca são suprimidas próximo à transição metal-isolante [34].

4.3 Massa efetiva dos elétrons de condução

Outra grandeza que tem um comportamento particular na vizinhança da transição metal-isolante é a massa efetiva. Como discutido no Capítulo 1, um forte aumento da massa efetiva próximo à densidade crítica foi medido recentemente num sistema de elétrons bidimensional [30].

No nosso cálculo, para cada problema de uma impureza, o resíduo de quasi-

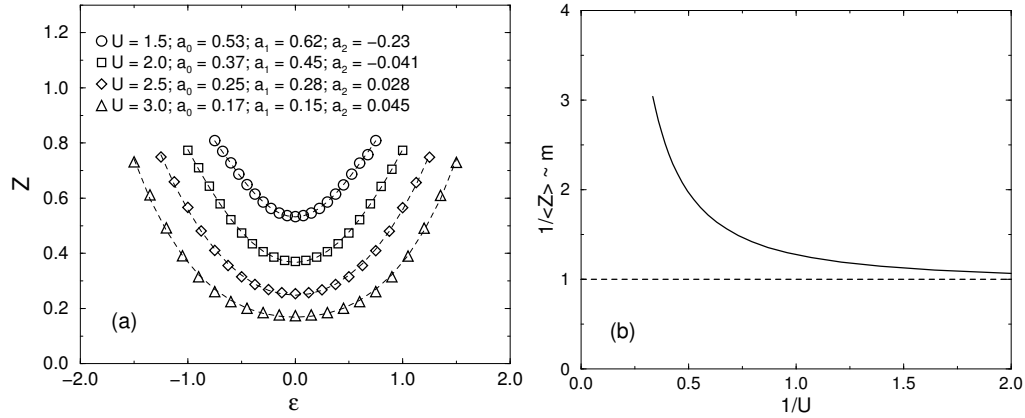


Figura 4.14: (a) Resíduo de quasi-partícula em função da energia despida para diferentes valores de U . Os símbolos representam os resultados numéricos obtidos usando a TDCM, enquanto as linhas representam ajustes à função $Z = a_0 + a_1\epsilon^2 + a_2\epsilon^4$. (b) Massa efetiva em função de $1/U$. Os parâmetros utilizados no cálculo foram $T = 0.003$, $W = U$ e $\mu = U/2$.

partícula é dado por

$$Z_i = \left(1 - \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Im} \Sigma_i(i\omega) \Big|_{\omega \rightarrow 0} \right)^{-1}. \quad (4.5)$$

A Figura 4.14 (a) mostra os resultados obtidos para o resíduo de quasi-partícula em função da energia despida para diferentes valores de U e $W = U$. De acordo com a figura, Z_i pode ser ajustado a uma função com potências pares de ϵ_i , $Z_i = a_0 + a_1\epsilon_i^2 + a_2\epsilon_i^4$. Para U fixo, a partir do ajuste, podemos calcular a média aritmética de Z_i , $\langle Z \rangle$. Considerando que as propriedades termodinâmicas do sistema podem ser obtidas como uma média das respostas dos problemas de uma impureza, $1/\langle Z \rangle$ dá aproximadamente a massa efetiva para o problema da rede. A Figura 4.14 (b) mostra $1/\langle Z \rangle \approx m$ em função de $1/U$ para $W = U$. Esse resultado deve ser comparado com o resultado experimental da Figura 1.4, que mostra a massa efetiva num sistema de elétrons bidimensional em função da densidade de elétrons. A escala no eixo y é a mesma nos dois gráficos. Lembrando que, no modelo de Hubbard, a transição metal-isolante de Mott ocorre à medida que aumentamos U , enquanto, na medida experimental, ela se dá à medida que a densidade de elétrons diminui, concluímos que nosso resultado está de bom acordo com o experimental.

Capítulo 5

Férmions pesados: resultados

Apresentamos neste capítulo os resultados para o *modelo da rede de Anderson* na presença de desordem na energia local dos elétrons de condução, obtidos usando a Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística, que inclui efeitos de localização de Anderson e foi discutida no Capítulo 3. Os problemas de uma impureza foram resolvidos impondo a condição $n = n_0$, como detalhado na p. 48. Na primeira seção deste capítulo, consideramos os resultados para uma temperatura fixa, enquanto, na segunda seção, discutimos a dependência desses resultados com a temperatura. Os resultados aqui apresentados encontram-se publicados na Phys. Rev. B [64].

5.1 Resultados para uma temperatura fixa

Primeiramente, é importante lembrar que, conforme foi discutido anteriormente, devemos olhar para a distribuição de uma grandeza, e não para seu valor médio, para que possamos ter uma boa descrição do sistema em estudo. Isso vale, em especial, se estamos interessados em efeitos que aparecem por causa das variações espaciais da função de onda dos elétrons, como é o caso dos efeitos de localização de Anderson. Uma outra alternativa é olhar para o *valor típico* ou *valor mais provável* dessa grandeza, que pode ser estimado pelo cálculo de sua média geométrica. Dessa maneira, a DE típica dos elétrons de condução próximo à superfície de Fermi, por exemplo, é dada por

$$\rho_{típ} = \exp \{ \langle \ln \rho_{cj} \rangle \} , \quad (5.1)$$

onde

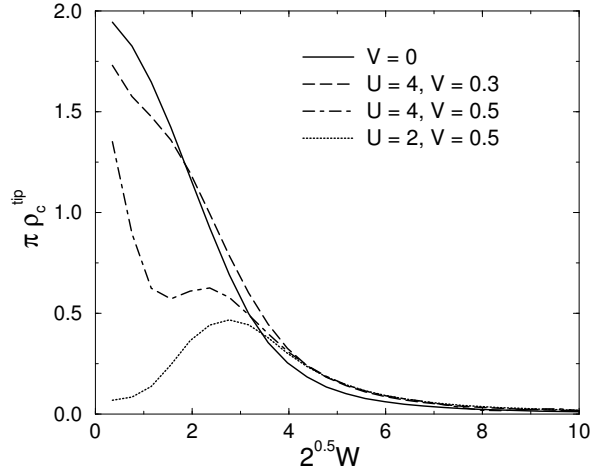


Figura 5.1: DE típica dos elétrons de condução próximo à superfície de Fermi em função da desordem para diferentes valores do potencial de hibridização e do potencial de interação. Os outros parâmetros usados no cálculo foram $T = 0.003$, $E_f = -1$ e $\mu = 0$.

$$\rho_{cj} = \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[G_{cj}^{(i)}(i\omega \rightarrow -i0) \right], \quad (5.2)$$

$G_{cj}^{(i)}(i\omega_n)$ é dada pela eq. (3.85) e $\langle \dots \rangle$ significa o valor médio. Nosso interesse no comportamento da DE típica dos elétrons de condução vem do fato de que ela vai a zero na transição de localização [5, 87], sendo, portanto, uma medida indireta da condutividade do sistema e servindo como um parâmetro de ordem da transição.

A Figura 5.1 mostra os resultados para a DE típica dos elétrons de condução próximo à superfície de Fermi em função da desordem, considerada uniforme e de largura W . Os resultados são apresentados para diferentes valores do potencial de interação, U , e do potencial de hibridização, V , a temperatura $T = 0.003$. Os valores numéricos das grandezas consideradas ao longo deste capítulo são dados em unidades de D , a meia largura da DE dos elétrons de condução no caso limpo, dada pela eq. (3.9). Com o objetivo de entender esses resultados, analisamos as distribuições da desordem efetiva [partes real e imaginária de $\Phi(\omega \approx 0)$, que é dada pela eq. (3.86)] em relação à desordem despida (ϵ) no mesmo sítio, ambas vistas pelos elétrons de condução. Esses resultados são apresentados para dois valores diferentes do potencial de hibridização, $V = 0.3$ e 0.5 , e dois valores diferentes do parâmetro

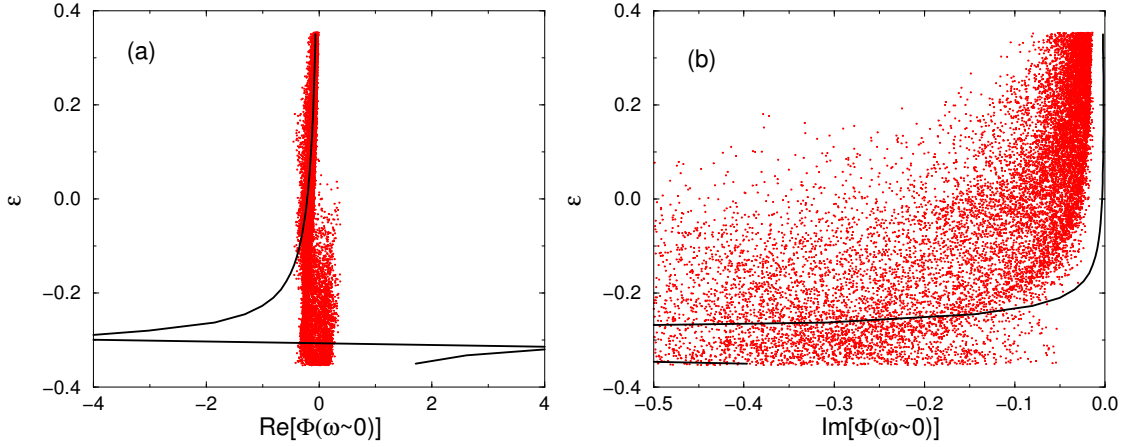


Figura 5.2: Distribuição da desordem efetiva, $\Phi(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $V = 0.3$ e $W = 1/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 0.7$. Os outros parâmetros usados foram $U = 4$, $E_f = -1$, $T = 0.003$ e $\mu = 0$.

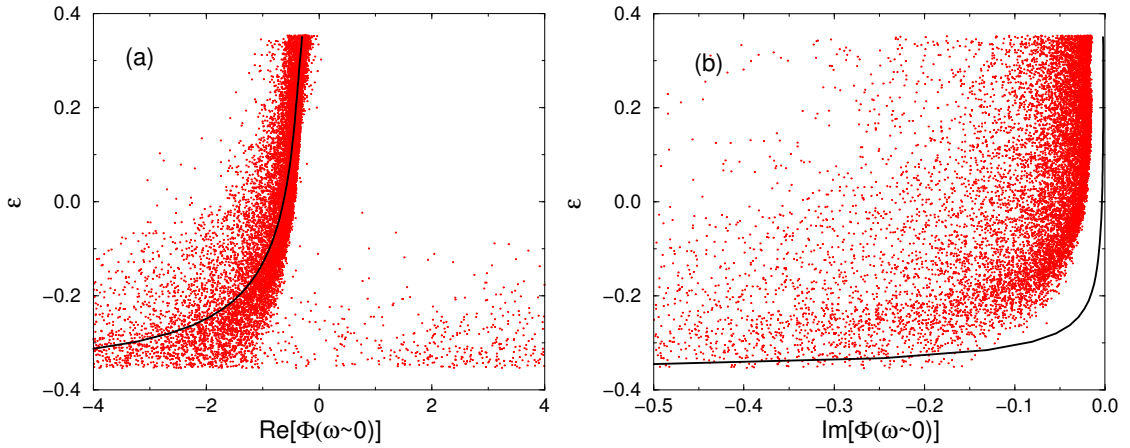


Figura 5.3: Distribuição da desordem efetiva, $\Phi(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $V = 0.5$ e $W = 1/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 0.7$. Outros parâmetros como na Figura 5.2.

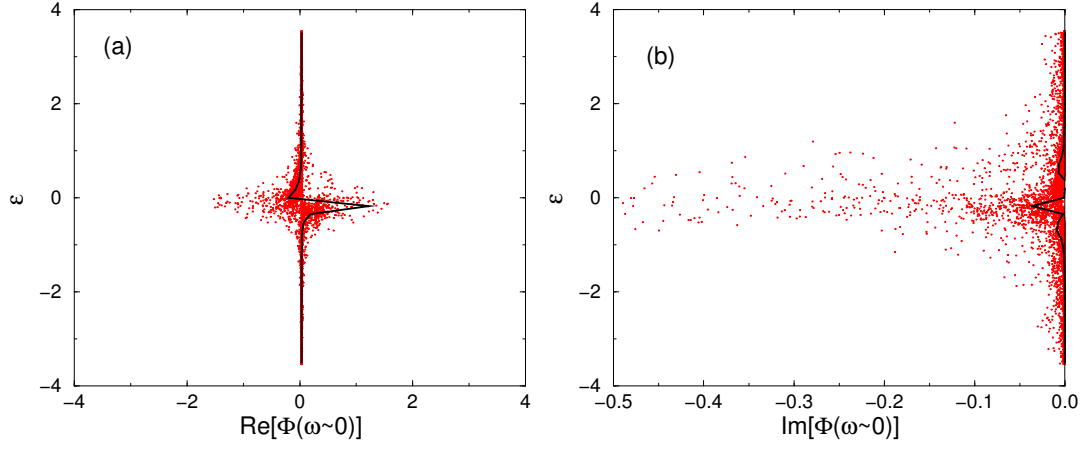


Figura 5.4: Distribuição da desordem efetiva, $\Phi(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $V = 0.3$ e $W = 10/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 7.0$. Outros parâmetros como na Figura 5.2.

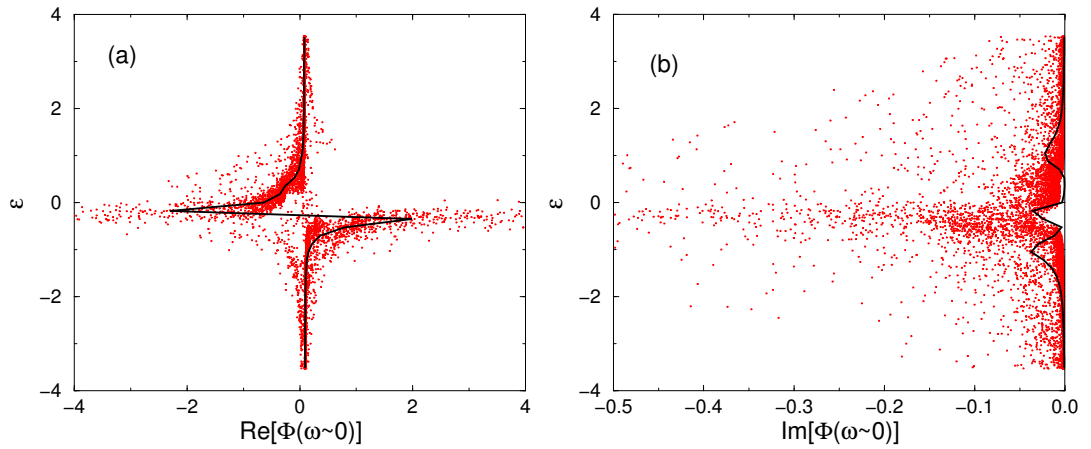


Figura 5.5: Distribuição da desordem efetiva, $\Phi(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $V = 0.5$ e $W = 10/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 7.0$. Outros parâmetros como na Figura 5.2.

de desordem, $W = 1/\sqrt{2}$ e $10/\sqrt{2}$ ¹, nas Figuras 5.2 a 5.5. Os outros parâmetros utilizados no cálculo foram $U = 4$, $T = 0.003$, $E_f = -1$ e $\mu = 0$. As figuras apresentam os resultados obtidos no cálculo usando a TDCME (representados por pontos) bem como aqueles obtidos usando a TDCM (linha contínua), no qual o tratamento da desordem se reduz à Aproximação do Potencial Coerente (CPA). É importante notar que $\text{Im}[\Phi(\omega \approx 0)] \neq 0$, pois $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)] \neq 0$ a T finita. $\Phi(\omega)$ pode ser interpretada como uma autoenergia *efetiva* dos elétrons de condução [conforme a eq. (3.86)], embora o modelo da rede de Anderson não inclua interação entre os elétrons de condução. Assim, o fato da parte imaginária de $\Phi(\omega)$ ser diferente de zero implica na presença de *espalhamento inelástico*, ausente no cálculo a $T = 0$. Além disso, $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$ contribui também para a parte real de $\Phi(\omega)$. Portanto, devemos estar cientes de que, embora na descrição efetiva dos elétrons de condução $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ e ϵ estejam associadas ao espalhamento elástico e $\text{Im}[\Phi(\omega \approx 0)]$ aos processos inelásticos, ambas as partes real e imaginária de $\Phi(\omega \approx 0)$ contêm informações sobre as colisões dos elétrons tipo f .

Comparemos os resultados obtidos para $W = 1/\sqrt{2}$ e $V = 0.3$ com aqueles para $V = 0.5$ (e mesma desordem), que estão nas Figuras 5.2 e 5.3. Para $V = 0.3$, os valores de $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ estão concentrados em torno de zero, enquanto, para $V = 0.5$, eles estão distribuídos num intervalo maior de valores. Por outro lado, os resultados para $\text{Im}[\Phi(\omega \approx 0)]$ mostram que o espalhamento inelástico é maior para $V = 0.3$ do que para $V = 0.5$. Quanto maior o espalhamento, elástico ou inelástico, menor a condutividade do sistema e menor a DE típica, que é uma medida da condutividade. Considerando os resultados para $V = 0.5$, a grande concentração de sítios com $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ grande explica a queda brusca na DE típica na região de desordem baixa, mostrada na Figura 5.1. Esses sítios agem como espalhadores quase unitários, tendo um deslocamento de fase próximo do máximo ($\delta = \pi/2$). Para $V = 0.3$, embora o espalhamento inelástico seja um pouco maior, ele não compensa o fato da distribuição de $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ ser muito estreita. Por isso, a DE não decresce tão rapidamente como ocorre para $V = 0.5$. Nos dois casos, o espalhamento causado pela parte real de $\Phi(\omega \approx 0)$ tem contribuição dominante sobre o causado pela parte imaginária.

À medida que a desordem aumenta, para valores intermediários ($W \approx 2.5/\sqrt{2}$),

¹Os valores de W são múltiplos de $1/\sqrt{2}$ pois, no código, esse parâmetro aparece em unidades de t , e não de D , e, para uma rede de Bethe com número de coordenação $z = 3$, $t = D/2\sqrt{2}$.

a distribuição de ϵ se torna mais larga, significando um aumento do espalhamento causado pela desordem despida, que dá origem a um decréscimo na DE típica para $V = 0.3$. Diferentemente, para $V = 0.5$, a DE típica apresenta um comportamento não-monotônico. Esse comportamento resulta do fato de que, à medida que a desordem aumenta, a concentração de espalhadores quase unitários, que vinha aumentando, satura, fazendo com que a desordem despida passe a dominar sobre a desordem efetiva. Esse comportamento também é observado no cálculo a $T = 0$ realizado por E. Miranda e V. Dobrosavljević [61, 62]. Na verdade, para $V = 0.3$, notamos a presença de um pequeno “ombro” na DE típica em torno de $W \approx 2/\sqrt{2}$, cuja origem é a mesma do comportamento não-monotônico para $V = 0.5$.

À medida que a desordem continua a aumentar e a distribuição de ϵ se torna mais larga, a DE típica, tanto para $V = 0.3$ como para $V = 0.5$, decresce. Esses resultados tendem ao não-interagente ($V = 0$), como é esperado se apenas a desordem despida tem uma contribuição significativa. De fato, comparando os resultados para $W = 10/\sqrt{2}$ (Figuras 5.4 e 5.5), notamos que as realizações para as quais a desordem despida é grande têm $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ em torno de zero, significando que a parte real da desordem efetiva não é importante. Além disso, os valores de $\text{Im}[\Phi(\omega \approx 0)]$ são pequenos para essas realizações.

A discussão acima foi feita do ponto de vista dos elétrons de condução. Consideremos agora como a presença da desordem em ϵ é vista pelos elétrons tipo f . Para o problema de uma impureza, a escala importante é a temperatura Kondo, T_K , que mede o acoplamento entre a impureza e o banho dos elétrons de condução. No Capítulo 2, vimos que uma distribuição do parâmetro local J leva a uma distribuição de T_K .² Da mesma maneira, uma distribuição de ρ_0 , que aparece na eq. (2.2), também leva a uma distribuição de T_K . Na notação utilizada na descrição do cálculo realizado, para cada problema de uma impureza, ρ_0 corresponde a ρ_{cj} dada pela eq. (5.2), que pode ser reescrita em termos da projeção da função de onda dos elétrons de condução no sítio j , $\langle j|\Psi_n\rangle$, como

$$\rho_{cj} = \sum_n \delta(E_n - \mu) |\langle j|\Psi_n\rangle|^2, \quad (5.3)$$

onde E_n é a autoenergia correspondente ao autoestado $|\Psi_n\rangle$. Portanto, ao incluirmos variações espaciais da função de onda dos elétrons de condução, no cálculo usando

²No limite Kondo, em que o modelo da rede de Anderson recai no modelo da rede de Kondo, J é dado por $J = 2V^2 \left[\frac{1}{|E_f|} + \frac{1}{|E_f + U|} \right]$.

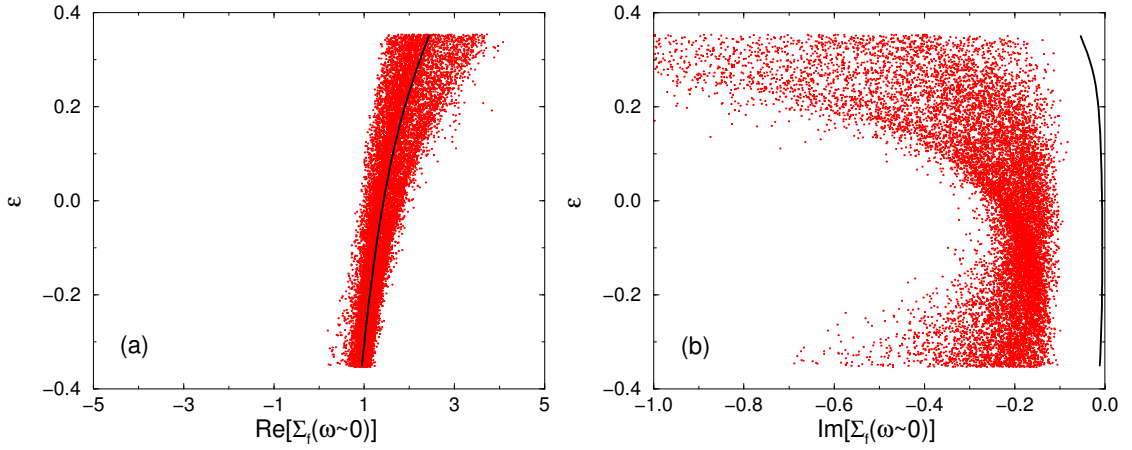


Figura 5.6: Distribuição da autoenergia, $\Sigma_f(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $V = 0.3$ e $W = 1/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 0.7$. Outros parâmetros como na Figura 5.2.

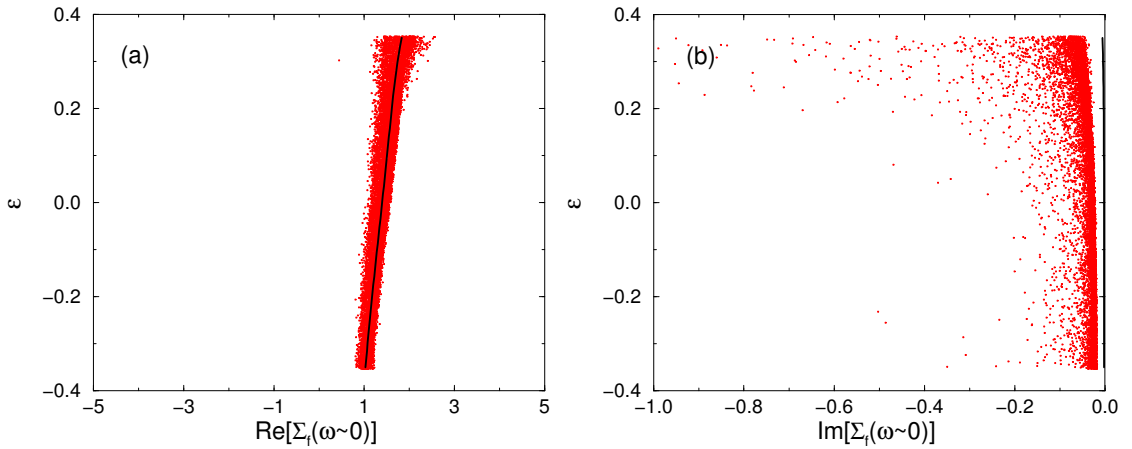


Figura 5.7: Distribuição da autoenergia, $\Sigma_f(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $V = 0.5$ e $W = 1/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 0.7$. Outros parâmetros como na Figura 5.2.

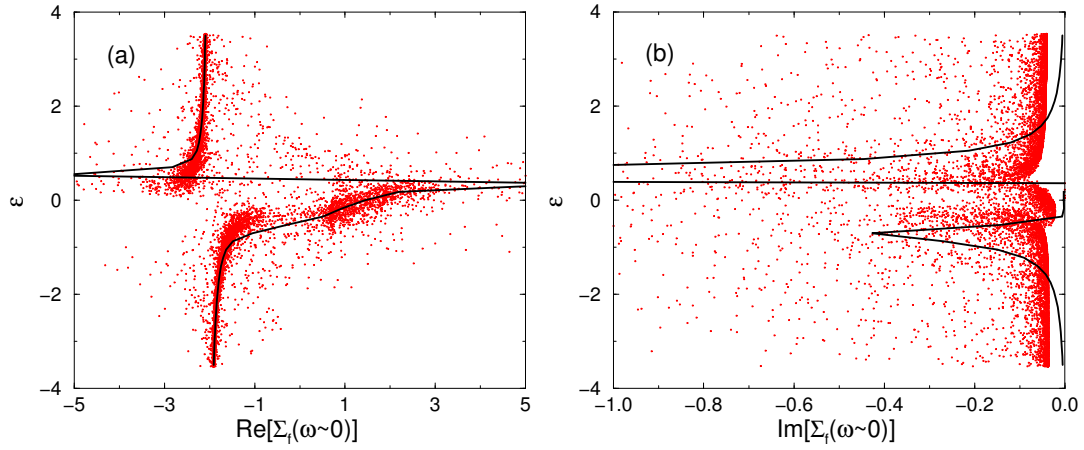


Figura 5.8: Distribuição da autoenergia, $\Sigma_f(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $V = 0.3$ e $W = 10/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 7.0$. Outros parâmetros como na Figura 5.2.

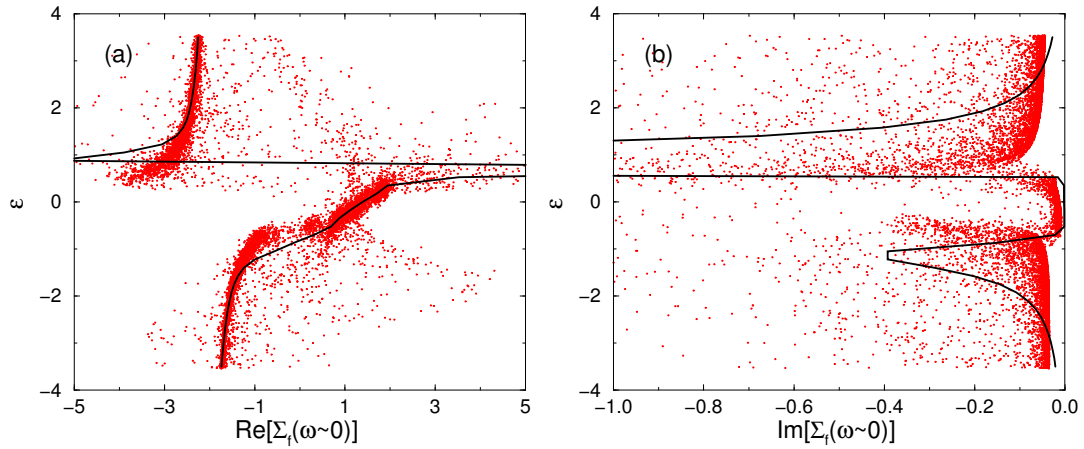


Figura 5.9: Distribuição da autoenergia, $\Sigma_f(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $V = 0.5$ e $W = 10/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 7.0$. Outros parâmetros como na Figura 5.2.

a TDCME, uma distribuição $P(\rho_0)$ é gerada, implicando numa distribuição $P(T_K)$. Assim, também no nosso cálculo, para uma temperatura finita, alguns dos sítios têm $T_K > T$, formando um estado singlete com o banho dos elétrons de condução, enquanto outros sítios, para os quais $T_K < T$, representam spins quase independentes, que espalham os elétrons de condução incoerentemente.

No caso dos spins que têm $T_K < T$, a presença de incoerência significa que a contribuição do espalhamento inelástico é grande, ou seja, que a parte imaginária da autoenergia dos elétrons tipo f é significativa. As Figuras 5.6 a 5.9 mostram a distribuição da autoenergia, partes real e imaginária de $\Sigma_f(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida. A desordem efetiva vista pelos elétrons de condução, que vínhamos discutindo, é calculada a partir de $\Sigma_f(\omega \approx 0)$ pela eq. (3.86), ou seja,

$$\text{Re}[\Phi_f(\omega \approx 0)] = V^2 \frac{-E_f + \mu - \text{Re}[\Sigma_{fj}(\omega \approx 0)]}{\{-E_f + \mu - \text{Re}[\Sigma_{fj}(\omega \approx 0)]\}^2 + \{\text{Im}[\Sigma_{fj}(\omega \approx 0)]\}^2}, \quad (5.4)$$

$$\text{Im}[\Phi_f(\omega \approx 0)] = V^2 \frac{\text{Im}[\Sigma_{fj}(\omega \approx 0)]}{\{-E_f + \mu - \text{Re}[\Sigma_{fj}(\omega \approx 0)]\}^2 + \{\text{Im}[\Sigma_{fj}(\omega \approx 0)]\}^2}, \quad (5.5)$$

onde $E_f = -1$ e $\mu = 0$, nos cálculos realizados. O entendimento de como os resultados numéricos para $\Sigma_f(\omega \approx 0)$ levam aos resultados numéricos para $\Phi(\omega \approx 0)$, no entanto, não é simples. A seguir, além de uma identificação dos spins em termos de T_K , fazemos algumas observações buscando estabelecer uma conexão entre o comportamento dessas duas grandezas.

Comparando os resultados para $W = 1/\sqrt{2}$ (Figuras 5.6 e 5.7), notamos que o espalhamento inelástico é maior para $V = 0.3$ do que para $V = 0.5$, refletindo um número maior de sítios incoerentes (com $T_K < T$) no primeiro caso. Isso concorda com o esperado, uma vez que, quanto menor o potencial de hibridização, menor a temperatura Kondo. O mesmo vale para a desordem efetiva vista pelos elétrons de condução, como pode ser visto nas Figuras 5.2 e 5.3: o espalhamento causado por $\text{Im}[\Phi(\omega \approx 0)]$ é maior para $V = 0.3$ do que para $V = 0.5$. Ou seja, $\text{Im}[\Phi(\omega \approx 0)]$ é proporcional a $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$, como na eq. (5.5). Por outro lado, tanto a distribuição de $\text{Re}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$ como a de $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$ se tornam mais estreitas quando V aumenta de 0.3 para 0.5. Mais do que isso, para $V = 0.5$, $\text{Re}[\Sigma_f(\omega \approx 0)] \approx 1$ e $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)] \approx 0$, o que faz com que o numerador e o denominador da eq. (5.4) se anulem, tornando a análise ainda menos trivial. Pelas Figuras 5.2 e 5.3, esses

resultados para $\Sigma_f(\omega \approx 0)$ levam $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ a apresentar uma distribuição mais larga para $V = 0.5$, além do fato de que o próprio V é maior e $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ é proporcional a V^2 , conforme a eq. (5.4). Assim, os sítios com $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ grande para $V = 0.5$, que são responsáveis pelo rápido decréscimo na DE típica dos elétrons de condução na região de desordem baixa (Figura 5.1), representam sítios com $T_K > T$ e pouco espalhamento inelástico.

Os resultados para $W = 10/\sqrt{2}$ (Figuras 5.8 e 5.9) mostram que o espalhamento inelástico dado por $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$ diminui, especialmente para $V = 0.3$, quando comparado aos resultados para $W = 1/\sqrt{2}$ (considerando os valores de ϵ comuns, ou seja, definidos pela menor largura de desordem). Novamente, o mesmo é observado para a desordem efetiva vista pelos elétrons de condução: o espalhamento causado por $\text{Im}[\Phi(\omega \approx 0)]$ para $W = 10/\sqrt{2}$ é menor do que o causado para $W = 1/\sqrt{2}$. Em termos de T_K , isso significa que o número de sítios formando um estado singlete com o banho dos elétrons de condução ($T_K > T$) aumenta. Porém, o que mais chama a atenção nas Figuras 5.8 e 5.9 é o aparecimento dos “ramos” com realizações em torno de $\text{Re}[\Sigma_f(\omega \approx 0)] \approx -2$, principalmente para valores de $|\epsilon|$ maiores do que os presentes para $W = 1/\sqrt{2}$. $\text{Re}[\Sigma_f(\omega \approx 0)] \approx -2$ corresponde, na verdade, ao limite atômico ($V \rightarrow 0$) do problema de uma impureza,³ em que a autoenergia é dada por [9]

$$\Sigma_{\text{atômico}}^{(2)}(\omega) = Un + \frac{n(1-n)U^2}{\omega - E_f - (1-n)U - i\eta}, \quad (5.6)$$

onde $\eta \rightarrow 0$ e $n \approx 0.5$, no limite considerado. Essas realizações apresentam valores pequenos tanto para $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ como para $\text{Im}[\Phi(\omega \approx 0)]$, como esperado pela substituição da eq. (5.6) nas eqs. (5.4) e (5.5), lembrando que $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$ assume valores pequenos. Além disso, para $V = 0.3$, a distribuição de pontos em torno de $\text{Re}[\Sigma_f(\omega \approx 0)] \approx -2$ é mais estreita do que para $V = 0.5$, na região de $|\epsilon|$ pequeno, o que se reflete num comportamento similar para a parte real de $\Phi(\omega \approx 0)$.

Voltando à Figura 5.1, ela também mostra os resultados para a DE típica dos elétrons de condução em função da desordem para $U = 2$ e $V = 0.5$. Nesse caso, o sistema apresenta simetria partícula-buraco ($E_f = -U/2$) no limite limpo e espalhadores unitários agem coerentemente dando origem a um “gap” na DE, o que é característico de um isolante Kondo. Isso explica o fato de que, para desordem

³De acordo com a eq. (3.84), para a função de hibridização entre estados estendidos e localizados, tomar o limite de ϵ grande equivale a fazer $V \rightarrow 0$, ou seja, a tomar o limite atômico.

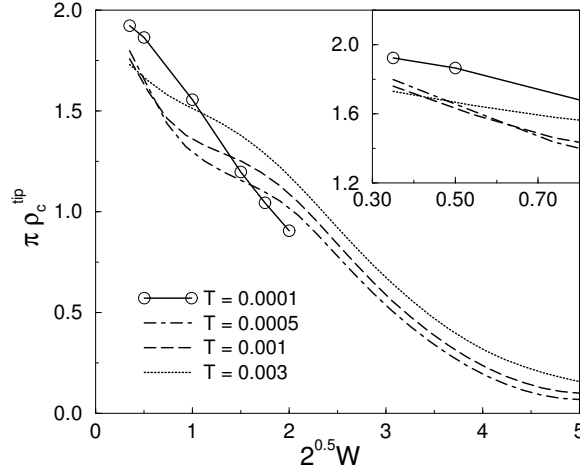


Figura 5.10: DE típica dos elétrons de condução próximo à superfície de Fermi em função da desordem para diferentes valores da temperatura. Os outros parâmetros usados no cálculo foram $U = 4$, $V = 0.3$, $E_f = -1$ e $\mu = 0$.

baixa, a DE típica decresce à medida que W decresce. Por outro lado, à medida que a desordem cresce, a partir de $W \approx 3/\sqrt{2}$, a situação é semelhante à descrita no início deste capítulo para $U = 4$ e $V = 0.5$. Na verdade, uma outra maneira de interpretar o rápido decréscimo da DE típica que ocorre para $U = 4$ e $V = 0.5$, na região de desordem baixa, é considerar que os espalhadores quase unitários mencionados anteriormente correspondem a gotas de isolante Kondo, presentes no sistema devido à proximidade com o estado isolante, como descrito nas referências [61, 62, 64]. Resultados semelhantes obtidos a $T = 0$ são apresentados nessas mesmas referências.

5.2 Dependência com a temperatura

A Figura 5.10 apresenta os resultados para a DE típica dos elétrons de condução em função de W para $U = 4$, $V = 0.3$ e diferentes temperaturas. Os outros parâmetros usados no cálculo foram $E_f = -1$ e $\mu = 0$. Primeiramente, notamos que, para o valor mais baixo de desordem ($W = 0.35/\sqrt{2}$), a DE típica decresce com o aumento da temperatura, como pode ser visualizado melhor no detalhe da figura. Por outro lado, para $W = 2.00/\sqrt{2}$, a tendência se inverte. Finalmente, entre esses dois extremos, a dependência com a temperatura pode ser não-monotônica. Uma idéia

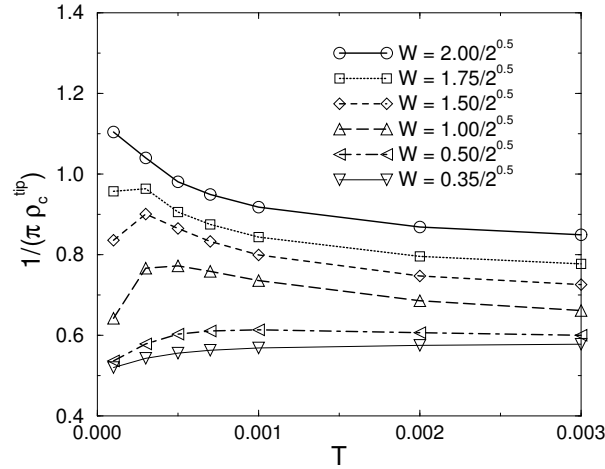


Figura 5.11: Inverso da DE típica dos elétrons de condução próximo à superfície de Fermi em função da temperatura para diferentes valores da desordem. Outros parâmetros como na Figura 5.10.

melhor do comportamento geral pode ser obtida olhando-se para o inverso da DE típica em função de T para diferentes valores de W , como mostrado na Figura 5.11. Por esse gráfico, fica claro que, para $1/\sqrt{2} \leq W \leq 1.75/\sqrt{2}$, o inverso da DE típica como função de T apresenta um pico, que se move gradualmente para temperatura nula à medida que a desordem aumenta. Da mesma maneira que a DE típica pode ser considerada uma medida indireta da condutividade do sistema, seu inverso representa uma medida indireta da resistividade.

A dependência da DE típica dos elétrons de condução com a temperatura pode ser entendida analisando-se as distribuições da desordem efetiva, $\Phi(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, como fizemos na seção anterior. Analisemos, em particular, os resultados para $W = 1/\sqrt{2}$, para o qual $1/\pi\rho_c^{tip}$ claramente apresenta um máximo, em $T \approx 0.0005$. As Figuras 5.12 e 5.13 apresentam as distribuições de $\Phi(\omega \approx 0)$ em relação a ϵ a $T = 0.0005$ e $T = 0.0001$, respectivamente. Esses resultados devem ser comparados com aqueles obtidos a temperatura mais alta, $T = 0.003$, que estão na Figura 5.2. Na análise que fazemos a seguir, consideramos, por opção, o comportamento à medida que T diminui. Pela Figura 5.11, vemos que o inverso da DE típica cresce, quando T vai de 0.003 para 0.0005, e então decresce, quando T diminui para 0.0001. A distribuição de $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ se torna mais larga quando T diminui de 0.003 para 0.0005, mas se torna mais estreita quando T vai de 0.0005

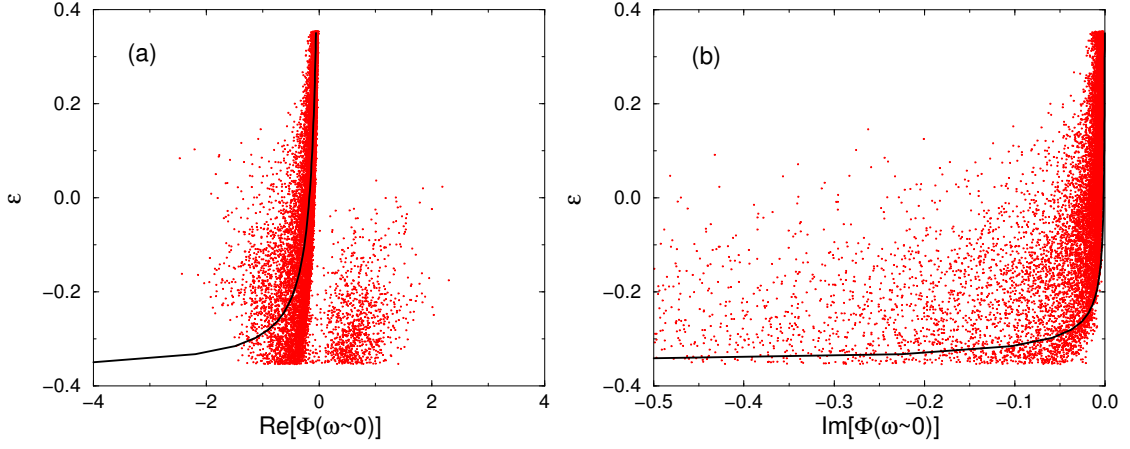


Figura 5.12: Distribuição da desordem efetiva, $\Phi(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $T = 0.0005$ e $W = 1/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 0.7$. Outros parâmetros como na Figura 5.10.

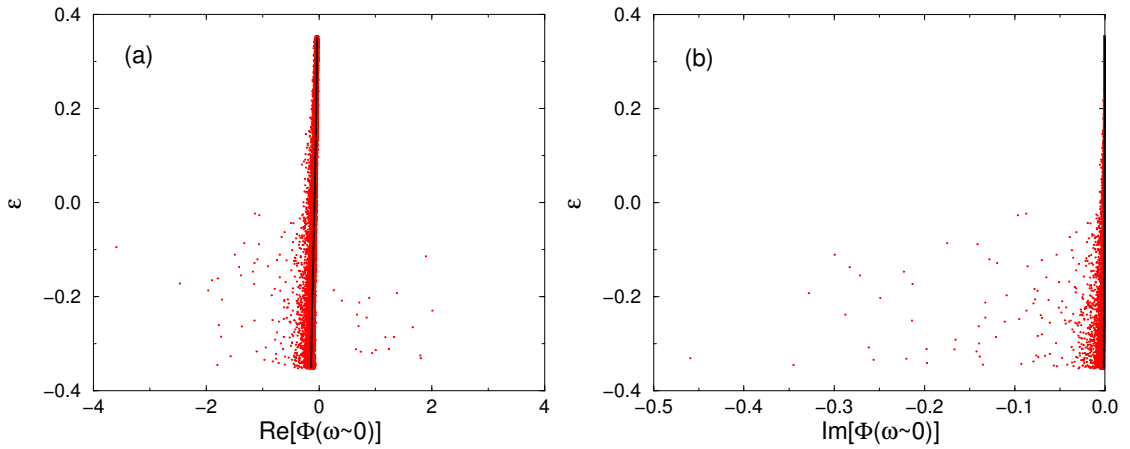


Figura 5.13: Distribuição da desordem efetiva, $\Phi(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $T = 0.0001$ e $W = 1/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 0.7$. Outros parâmetros como na Figura 5.10.

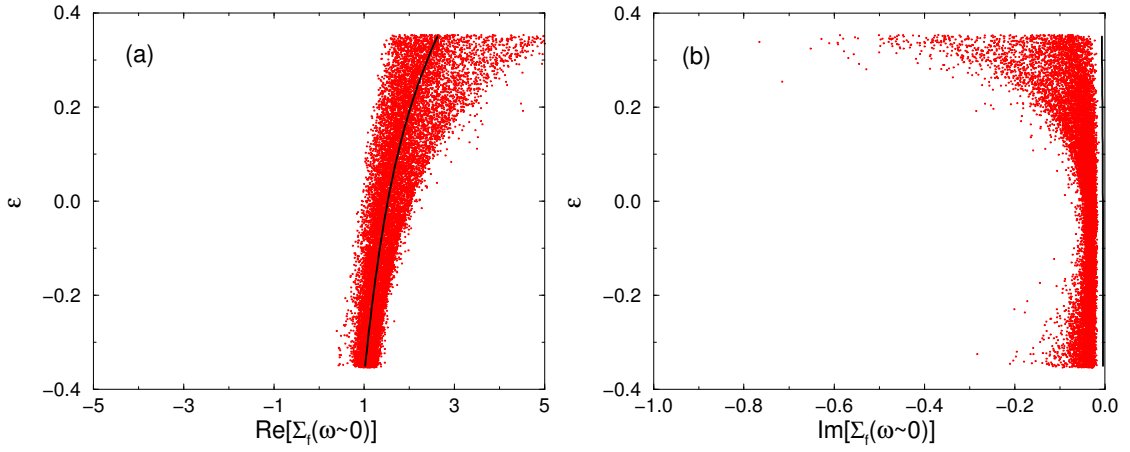


Figura 5.14: Distribuição da autoenergia, $\Sigma_f(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $T = 0.0005$ e $W = 1/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 0.7$. Outros parâmetros como na Figura 5.10.

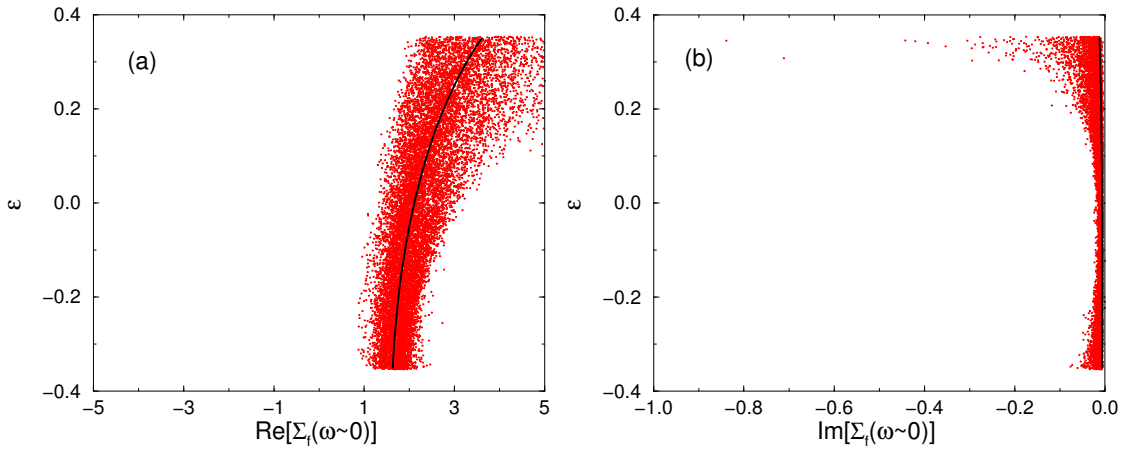


Figura 5.15: Distribuição da autoenergia, $\Sigma_f(\omega \approx 0)$, em relação à desordem despida, ϵ , no mesmo sítio obtida usando a TDCME (pontos) para $T = 0.0001$ e $W = 1/\sqrt{2}$: (a) parte real e (b) parte imaginária. A linha contínua é o resultado dentro da TDCM para $W = 0.7$. Outros parâmetros como na Figura 5.10.

para 0.0001. Por sua vez, tanto a largura da distribuição como os valores assumidos por $\text{Im}[\Phi(\omega \approx 0)]$ sempre diminuem à medida que T decresce, refletindo uma diminuição nos processos de espalhamento inelástico, como era de se esperar. Em termos de T_K , isso é o mesmo que dizer que, à medida que T diminui, o número de sítios com $T_K < T$, que têm um forte espalhamento inelástico, torna-se menor. Assim, quando T diminui de 0.003 para $T = 0.0005$, o espalhamento causado pela parte real de $\Phi(\omega \approx 0)$ domina sobre aquele causado pela parte imaginária, de tal modo que o inverso da DE típica aumenta. Nesse caso, o comportamento é semelhante ao discutido na seção anterior, quando V aumenta de 0.3 para 0.5, a $T = 0.003$. No outro intervalo, quando T diminui de 0.0005 para 0.0001, ambos os espalhamentos contribuem da mesma maneira, causando uma diminuição no inverso da DE típica.

Para complementar a análise acima, discutimos a seguir o comportamento das distribuições da autoenergia dos elétrons tipo f em relação à desordem despida. Esses resultados são apresentados nas Figuras 5.14 e 5.15, para $T = 0.0005$ e $T = 0.0001$, respectivamente. Além disso, a Figura 5.6, da seção anterior, mostra os resultados para $T = 0.003$. A distribuição de $\text{Re}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$ se torna mais larga à medida que T diminui, enquanto a distribuição de $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$ apresenta o comportamento inverso e se torna mais estreita. Além disso, no caso da distribuição de $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$, o mais marcante é que ela se desloca para valores menores de $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$. Quando T diminui de 0.003 para 0.0005, podemos considerar que a distribuição da parte real de $\Sigma_f(\omega \approx 0)$ muda muito pouco, principalmente em comparação com a mudança correspondente para a parte imaginária. Assim, quando T diminui, dentro desse intervalo, o fato da distribuição de $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$ se tornar mais estreita e se deslocar para valores menores implica num alargamento da distribuição de $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$, conforme a eq. (5.4) e como de fato pode ser observado nas Figuras 5.2 e 5.12. Dessa maneira, para esse intervalo de T , é a diminuição nos processos inelásticos que domina o comportamento de $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$, que, por sua vez, domina o comportamento da DE típica dos elétrons de condução, como vimos no parágrafo anterior. Quando diminuimos ainda mais a temperatura, para $T = 0.0001$, além do comportamento geral descrito acima, notamos que a distribuição de $\text{Re}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$ se desloca para valores acima de 1. Nesse caso, os valores assumidos por $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$ são pequenos, fazendo com que sua contribuição para $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ também seja pequena, conforme a eq. (5.4). Por outro lado, o aumento da largura da distribuição de $\text{Re}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$, juntamente com seu deslocamento para

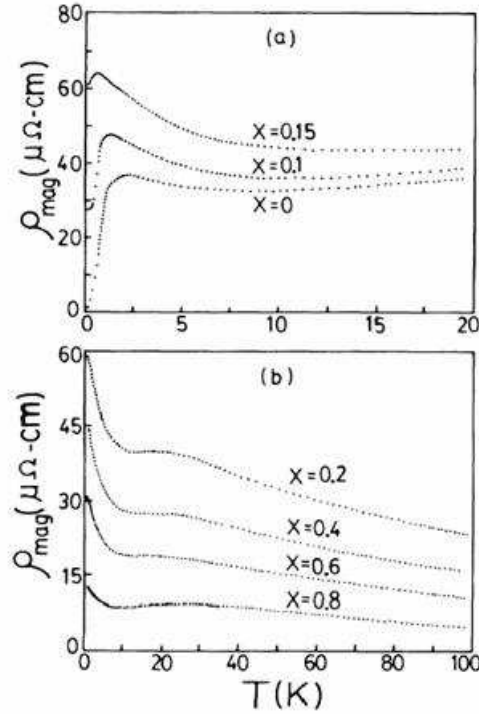


Figura 5.16: Resistividade magnética, ρ_m , em função da temperatura para amostras de $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{Pb}_3$: (a) $x = 0, 0.1$ e 0.15 até $T = 20$ K; (b) $x = 0.2$ a 0.8 até $T = 100$ K. ρ_m é definida como a resistividade total menos a resistividade do LaPb_3 . Resultado reproduzido da referência [94].

valores acima de 1 [lembre-se que, na eq. (5.4), $E_f = -1$ e $\mu = 0$], faz com que a distribuição de $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ se torne mais estreita. Para finalizar, a distribuição de $\text{Im}[\Phi(\omega \approx 0)]$ segue a de $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$: as duas se estreitam e deslocam-se para valores menores à medida que T diminui.

Em toda a discussão deste capítulo, usamos a DE típica como uma medida das propriedades de condução do sistema. Isso se justifica pela sua interpretação como uma taxa de escape de um sítio na rede e pelo fato de que ela se anula na transição de localização [4]. Idealmente, deveríamos calcular a condutividade. Porém, isso é uma tarefa difícil dentro do esquema da TDCME. Uma aproximação, que se torna razoável próximo à transição de localização, pode ser empregada [91, 92], mas requer o cálculo do propagador entre dois sítios diferentes, que está além da TDCME, na qual apenas as funções de Green locais estão envolvidas. Ainda assim, o uso

do inverso da DE típica como uma medida aproximada da resistividade é razoável, *especialmente longe da região fracamente desordenada* ($W > 1/\sqrt{2}$). Dessa maneira, a divergência das curvas da “resistividade” na Figura 5.11, quando $T \rightarrow 0$, pode ser identificada com as correlações de Mooij [93]. Essas correlações foram observadas originalmente em ligas desordenadas de metais de transição [93], mas também são observadas em ligas de férmions pesados, como no resultado reproduzido na Figura 5.16 [94], e em sistemas bidimensionais, como os MOSFET’s [12]. Nossos resultados, dentro do contexto da discussão acima, mostram que efeitos de localização e interação elétron-elétron dão origem às correlações de Mooij, sem a necessidade da inclusão de interações elétron-fônon, como sugerido na literatura [91, 21].

Finalmente, observando os resultados da TDCM, presentes em todas as figuras discutidas acima, notamos que os resultados obtidos para $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ e para $\text{Re}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$ caem aproximadamente nas regiões em que a concentração de realizações do cálculo usando a TDCME é maior. Não há razões para esperar que a TDCM e a TDCME dêem resultados similares, exceto para desordem baixa. No entanto, nossos resultados mostram que o cálculo usando a TDCM pode servir como um guia para os valores mais prováveis de $\text{Re}[\Phi(\omega \approx 0)]$ e $\text{Re}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$. Há, porém, uma grande discrepância entre os resultados da TDCM e da TDCME para $\text{Im}[\Phi(\omega \approx 0)]$ e para $\text{Im}[\Sigma_f(\omega \approx 0)]$, especialmente para $T = 0.003$ e desordem baixa. Nesses casos, a linha da TDCM subestima os valores mais prováveis dos resultados da TDCME. À medida que a temperatura diminui, a concordância melhora. Portanto, a TDCM, que não incorpora efeitos de localização de Anderson, pode ser usada apenas como um limite inferior na estimativa da importância dos processos de espalhamento inelástico em redes de Anderson desordenadas.

Conclusões

Sendo o objetivo desta tese o estudo dos efeitos de temperatura e interação finitas em sistemas desordenados correlacionados, resolvemos os modelos de Hubbard e da rede de Anderson na presença de desordem na energia local dos elétrons de condução. As motivações para esse estudo envolveram medidas experimentais em sistemas que podem ser descritos por esses modelos. Mais especificamente, no caso do modelo de Hubbard, medidas que mostram a existência de uma fase metálica e uma transição metal-isolante em sistemas bidimensionais de elétrons, fracamente desordenados e diluídos, e, no caso do modelo da rede de Anderson, o comportamento não-líquido de Fermi observado em ligas de férmions pesados. A solução desses modelos, no nosso trabalho, foi obtida usando a Teoria Dinâmica de Campo Médio e a Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística, esta última capaz de descrever a transição de localização de Anderson. Em ambos os casos, o problema da rede é mapeado em vários problemas de uma impureza, resolvidos por nós usando teoria de perturbação até segunda ordem no potencial de interação elétron-elétron. Como nossos cálculos foram feitos a temperatura finita e não foram baseados na teoria do líquido de Fermi de Landau, eles incluem efeitos de espalhamento inelástico.

Nossos resultados para o modelo de Hubbard mostram uma forte dependência da taxa total de espalhamento com a temperatura na fase metálica. Uma queda de aproximadamente uma ordem de grandeza na taxa de espalhamento à medida que a temperatura diminui é observada para valores grandes do potencial de interação elétron-elétron. As medidas experimentais mostram também uma queda dessa ordem de grandeza. Além disso, olhando separadamente para as contribuições dos espalhamentos elástico e inelástico, concluímos que é o espalhamento inelástico que dá origem à essa forte dependência da taxa total de espalhamento com a temperatura. Nesse ponto, é importante chamar a atenção para o fato de que tratamentos baseados na teoria do líquido de Fermi, como a aproximação Hartree-Fock, não in-

cluem efeitos de espalhamento inelástico. Nossa principal conclusão é então que esses efeitos têm que ser levados em consideração para um melhor entendimento dos resultados experimentais. Embora não sejamos capazes de descrever a fase isolante, nossos resultados mostram um comportamento não-monotônico da taxa total de espalhamento à medida que nos aproximamos, no diagrama de fase para o problema, da região isolante. Esse comportamento não-monotônico é justamente um indicativo da proximidade com a transição metal-isolante.

Nossa análise dos resultados para o modelo da rede de Anderson teve como ponto de partida os resultados para a densidade de estados típica dos elétrons de condução, que pode ser usada como uma estimativa para a condutividade do sistema, em função da desordem. Dois casos foram analisados: (1) resultados a uma temperatura fixa e diferentes valores da hibridização entre estados estendidos e localizados e (2) resultados para um valor fixo da hibridização e diferentes temperaturas. Nos dois casos, o comportamento da densidade de estados típica pode ser entendido analisando-se os resultados da distribuição da desordem efetiva em função da desordem despida, ambas vistas pelos elétrons de condução. Esses resultados, por sua vez, podem ser entendidos pela análise da distribuição da autoenergia dos elétrons tipo f em função da desordem despida, embora a conexão entre essas grandezas não seja trivial. Nos resultados a temperatura fixa, como consequência da formação de espalhadores quase unitários, uma queda brusca da densidade de estados típica é observada na região de baixa desordem para o maior valor de hibridização analisado. À medida que a desordem aumenta, no entanto, ocorre uma saturação na formação desses espalhadores e o comportamento da densidade de estados típica passa a ser dominado pela desordem despida. À medida que a desordem continua a aumentar, a densidade de estados típica diminui, tendendo a zero, o que indica que o sistema está se aproximando da transição de localização de Anderson. Na dependência com a temperatura, o comportamento da densidade de estados típica é melhor visualizado num gráfico do seu *inverso* em função da temperatura, para diferentes valores da desordem. Interpretando o inverso da densidade de estados típica como a “resistividade” do sistema, o resultado obtido por nós é característico das correlações de Mooij, presentes em diferentes tipos de sistemas, inclusive sistemas bidimensionais como os MOSFET’s. Nosso gráfico mostra que, para desordem baixa, a “resistividade” cresce com o aumento da temperatura, enquanto, para desordem mais alta, o oposto ocorre. Para valores intermediários da desordem, o comportamento é não-

monotônico.

O resultado comentado acima, que é característico das correlações de Mooij, permite estabelecer um paralelo entre os resultados obtidos por nós para o modelo da rede de Anderson e os obtidos para o modelo de Hubbard. Para maior clareza, estamos nos referindo à Figura 5.11, obtida para o modelo da rede de Anderson, e à Figura 4.12, para o modelo de Hubbard. No primeiro caso, o comportamento é o descrito no parágrafo anterior. No segundo caso, considerando os resultados acima de uma dada temperatura, a taxa de espalhamento cresce com o aumento da temperatura quando a desordem é alta e passa a ter um comportamento decrescente com a temperatura à medida que a desordem diminui. Novamente, para valores intermediários da desordem, o comportamento é não-monotônico. Portanto, temos um comportamento similar nos dois gráficos, com a diferença de que, para o modelo da rede de Anderson, a tendência descrita de mudança da “resistividade” ocorre à medida que a desordem *aumenta* e, para o modelo de Hubbard, à medida que a desordem *diminui*. Isso é consequência das diferentes origens dos processos de localização: a desordem, que pode levar à transição de localização de Anderson no problema da rede de Anderson, e a interação elétron-elétron, que pode levar à transição metal-isolante de Mott no modelo de Hubbard.

Para finalizar, a inclusão de efeitos de localização de Anderson na resolução do modelo de Hubbard e a busca de um possível cálculo da condutividade, que seja válido no esquema da Teoria Dinâmica de Campo Médio Estatística, são deixadas como questões abertas, a serem estudadas no futuro.

Referências Bibliográficas

- [1] N. F. Mott, Proc. Phys. Soc. London, Ser. A **62**, 416 (1949).
- [2] W. Metzner e D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
- [3] A. Georges e G. Kotliar, Phys. Rev. B **45**, 6479 (1992).
- [4] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [5] V. Dobrosavljević e G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **78**, 3943 (1997).
- [6] K. Yamada e K. Yosida, Prog. Theor. Phys. **46**, 244 (1970).
- [7] K. Yamada e K. Yosida, Prog. Theor. Phys. **53**, 1286 (1975).
- [8] K. Yamada, Prog. Theor. Phys. **53**, 970 (1975).
- [9] H. Kajueter e G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **77**, 131 (1996).
- [10] M. Potthoff, T. Wegner e W. Nolting, Phys. Rev. B **55**, 16132 (1997).
- [11] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello e T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [12] E. Abrahams, S. V. Kravchenko e M. P. Sarachick, Rev. Mod. Phys. **73**, 251 (2001).
- [13] J. Hubbard, Proc. R. Soc. A **240**, 539 (1957).
- [14] J. Hubbard, Proc. R. Soc. A **243**, 336 (1958).
- [15] J. Hubbard, Proc. R. Soc. A **276**, 238 (1963).
- [16] E. M. Lifshitz e L. P. Pitaevskii, *“Statistical Physics - Part 2: Theory of the Condensed State”*, Butterworth-Heineman, 1995.

- [17] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 797 (2001).
- [18] O. O. Bernal, D. E. MacLaughlin, H. G. Lukefahr e B. Andraka, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2023 (1995).
- [19] N. F. Mott e W. D. Twose, *Adv. Phys.* **10**, 107 (1961).
- [20] R. E. Borland, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **274**, 529 (1963).
- [21] P. A. Lee e T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
- [22] B. Tanatar e D. M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **39**, 5005 (1989).
- [23] S. V. Kravchenko, W. E. Mason, G. E. Bowker, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov e M. D'Iorio, *Phys. Rev. B* **51**, 7038 (1995).
- [24] M. P. Sarachik e S. V. Kravchenko, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **96**, 5900 (1999).
- [25] D. Simonian, S. V. Kravchenko, M. P. Sarachik e V. M. Pudalov, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2304 (1997).
- [26] A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov e T.M. Klapwijk, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 086801 (2001).
- [27] V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, H. Kojima, N. Butch, E. M. Dizhur, G. Brunthaler, A. Prinz e G. Bauer, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 196404 (2002).
- [28] S. A. Vitkalov, M. P. Sarachik e T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* **65**, 201106 (2002).
- [29] J. Zhu, H. L. Stormer, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin e K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 056805 (2003).
- [30] A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov e T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* **66**, 073303 (2002).
- [31] A. A. Shashkin, M. Rahimi, S. Anissimova, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov e T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 046403 (2003).
- [32] G. Zala, B.N. Narozhny e I.L. Aleiner, *Phys. Rev. B* **64**, 214204 (2001).

- [33] V.T. Dolgoplov, JETP Lett. **76**, 377 (2002).
- [34] M. Rahimi, S. Anissimova, M.R. Sakr, S.V. Kravchenko e T. M. Klapwijk, cond-mat/0210008, versão 1, 01/10/2002.
- [35] A. P. Mills, Jr., A. P. Ramirez, X. P. A. Gao, L. N. Pfeiffer, K. W. West e S. H. Simon, cond-mat/0101020.
- [36] M. Rahimi, S. Anissimova, M.R. Sakr, S.V. Kravchenko e T. M. Klapwijk, Phys. Rev. Lett. **91**, 116402 (2003).
- [37] A. M. Finkelstein, Z. Phys. B - Condensed Matter **56**, 189 (1984).
- [38] A. Gold e V. T. Dolgoplov, Phys. Rev. B **33**, 1076 (1986).
- [39] S. Das Sarma e E. H. Hwang, Phys. Rev. Lett. **83**, 164 (1999).
- [40] P. Nozières e A. Blandin, J. Physique **41**, 193 (1980).
- [41] D. L. Cox, Phys. Rev. Lett. **59**, 1240 (1987).
- [42] M. A. Continentino, Phys. Rev. B **47**, 11587 (1993).
- [43] A. J. Millis, Phys. Rev. B **48**, 7183 (1993).
- [44] A. M. Tsvelik e M. Reizer, Phys. Rev. B **48**, 9887 (1993).
- [45] A. Schröder, G. Aeppli, E. Bucher, R. Ramazashvili e P. Coleman, Phys. Rev. Lett. **80**, 5623 (1998).
- [46] Q. Si, S. Rabello, K. Ingersent e J. L. Smith, Nature **413**, 804 (2001).
- [47] E. Miranda, V. Dobrosavljević e G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **78**, 290 (1997).
- [48] A. H. Castro Neto, G. Castilla e B. A. Jones, Phys. Rev. Lett. **81**, 3531 (1998).
- [49] H. v. Löhneysen, T. Pietrus, G. Portisch, H. G. Schlager, A. Schröder, M. Sieck e T. Trappmann, Phys. Rev. Lett. **72**, 3262 (1994).
- [50] F. M. Grosche, S. R. Julian, N. D. Mathur e G. C. Lonzarich, Physica B **223-224**, 50 (1996).

- [51] I. R. Walker, F. M. Grosche, D. M. Freye e G. G. Lonzarich, *Physica C* **282-287**, 303 (1997).
- [52] O. Trovarelli, C. Geibel, S. Mederle, C. Langhammer, F. M. Grosche, P. Gegenwart, M. Lang, G. Sparn e F. Steglich, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 626 (2000).
- [53] D. E. MacLaughlin, O. O. Bernal e H. G. Lukefahr, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 9855 (1996).
- [54] G. D. Mahan, *“Many-particle physics”*, 2^a edição, New York: Plenum Press, 1990.
- [55] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [56] B. Andraka e G. R. Stewart, *Phys. Rev. B* **47**, 3208 (1993).
- [57] M. C. de Andrade, R. Chau, R. P. Dickey, N. R. Dilley, E. J. Freeman, D. A. Gajewski, M. B. Maple, R. Movshovich, A. H. Castro Neto, G. Castilla e B. A. Jones, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5620 (1998).
- [58] C. H. Booth, D. E. MacLaughlin, R. H. Heffner, R. Chau, M. B. Maple e G. H. Kwei, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3960 (1998).
- [59] E. Miranda, V. Dobrosavljević e G. Kotliar, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 9871 (1996).
- [60] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth e M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [61] E. Miranda e V. Dobrosavljević, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 264 (2001).
- [62] E. Miranda e V. Dobrosavljević, *J. Magn. Magn. Mat.* **226-230**, 110 (2001).
- [63] Chia-Ying Liu, D. E. MacLaughlin, A. H. Castro Neto, H. G. Lukefahr, J. D. Thompson, J. L. Sarrao e Z. Fisk, *Phys. Rev. B* **61**, 432 (2000).
- [64] M. C. O. Aguiar, E. Miranda e V. Dobrosavljević, *Phys. Rev. B* **68**, 125104 (2003).
- [65] A. J. Millis, D. K. Morr e J. Schmalian, *Phys. Rev. B* **66**, 174433 (2002).

- [66] M. J. Rozenberg, Tese de Doutorado, Rutgers University, New Brunswick, New Jersey, outubro de 1994.
- [67] J. J. Sakurai, “*Modern Quantum Mechanics*”, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1994.
- [68] A. L. Fetter e J. D. Walecka, “*Quantum Theory of Many-particle Systems*”, New York: McGraw-Hill, Inc., 1971, p. 227.
- [69] J. K. Freericks e M. Jarrell, Phys. Rev. B **50**, 6939 (1994).
- [70] William H. Press, Saul A. Teukolsky e Brian P. Flannery, “*Numerical Recipes in Fortran: the Art of Scientific Computing*”, 2^a edição, Cambridge Univ. Press, 1992.
- [71] M. J. Rozenberg, G. Kotliar e X. Y. Zhang, Phys. Rev. B **49**, 10181 (1994).
- [72] W. Brenig e K. Schönhammer, Z. Phys. **267**, 201 (1974).
- [73] G. A. Baker Jr., “*Essentials of Padé Approximants*”, New York: Academic Press, 1975.
- [74] H. J. Vidberg e J. W. Serene, J. Low Temp. Phys. **29**, 179 (1977).
- [75] K. S. D. Beach, R. J. Gooding e F. Marsiglio, Phys. Rev. B **61**, 5147 (2000).
- [76] J. M. Ziman, “*Models of Disorder*”, London: Cambridge University Press, 1979, p. 321.
- [77] E. N. Economou, “*Green’s Functions in Quantum Physics*”, Berlin: Springer-Verlag, 1983, p. 141.
- [78] R. Vlaming e D. Vollhardt, Phys. Rev. B **45**, 4637 (1992).
- [79] T. Wegner, M. Potthoff e W. Nolting, Phys. Rev. B **57**, 6211 (1998).
- [80] D. Meyer e W. Nolting, Phys. Rev. B **61**, 13465 (2000).
- [81] D. Meyer e W. Nolting, Phys. Rev. B **62**, 5657 (2000).
- [82] A. C. Hewson, “*The Kondo Problem to Heavy Fermions*”, Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press, 1993.

- [83] H. Kajueter, Tese de Doutorado, Rutgers University, New Brunswick, New Jersey, 1996.
- [84] P. W. Anderson, *Rev. Mod. Phys.* **50**, 191 (1978).
- [85] E. Miranda, notas de curso.
- [86] R. Abou-Chakra, P. W. Anderson e D. J. Thouless, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **6**, 1734 (1973).
- [87] V. Dobrosavljević e G. Kotliar, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **356**, 57 (1998).
- [88] E. Miranda e V. Dobrosavljević, *Physica B* **259 - 261**, 359 (1999).
- [89] M. C. O. Aguiar, E. Miranda, V. Dobrosavljević, E. Abrahams e G. Kotliar, submetido para publicação na *Phys. Rev. Lett.*, cond-mat/0305511.
- [90] M. J. Rozenberg, R. Chitra e G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3498 (1999).
- [91] S. M. Girvin e M. Jonson, *Phys. Rev. B* **22**, 3583 (1980).
- [92] V. Dobrosavljević, A. A. Pastor e B. K. Nikolić, *Europhys. Lett.* **62**, 76 (2003).
- [93] J. H. Mooij, *Phys. Status Solidi A* **17**, 521 (1973).
- [94] C. L. Lin, A. Wallash, J. E. Crow, T. Mihalisin e P. Schlottmann, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1232 (1987).

Apêndice A

Alguns resultados no caso limpo

Apresentamos neste apêndice alguns exemplos dos resultados que podemos obter a partir do cálculo numérico realizado usando a TDCM na ausência de desordem. A TDCM e o problema auxiliar de uma impureza a temperatura finita, discutidos no Capítulo 3, são apresentados dentro do formalismo de Matsubara, em que as frequências são discretas, imaginárias e dadas por

$$i\omega_n = i(2n - 1)\pi T, \quad (\text{A.1})$$

no caso de férmions. No entanto, a função de Green tem uma interpretação física mais direta quando é calculada no eixo real. A obtenção dos resultados no eixo real a partir daqueles no eixo imaginário se dá através do processo de continuação analítica. Numericamente, isso pode ser feito através do uso dos aproximantes de Padé, que também são discutidos nesta subseção.

Como discutido na Introdução da tese, o *modelo de Hubbard* pode ser usado para descrever a transição metal-isolante de Mott. Na solução numérica usando a TDCM e a teoria de perturbação para tratar o problema de uma impureza, as fases metálica e isolante são obtidas considerando duas “sementes” distintas para a função de Green $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$. No caso metálico, usamos o limite $U = 0$, em que $\Sigma_{imp}(i\omega_n) = 0$ e $\mathcal{G}_0(i\omega_n) = G(i\omega_n)$ é calculada pela eq. (3.10). No caso isolante, tomamos o valor de $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ no limite atômico ($t = 0$), ou seja, $\mathcal{G}_0(i\omega) = 1/(i\omega_n + \mu)$.

A Figura A.1 mostra os resultados obtidos para a parte imaginária da autoenergia e da função de Green local em função da frequência para (a) $U = 2.4$, na fase metálica, e (b) $U = 3.6$, na fase isolante. Os valores numéricos são dados em unidades de D , a meia largura da densidade de estados do problema não-interagente.

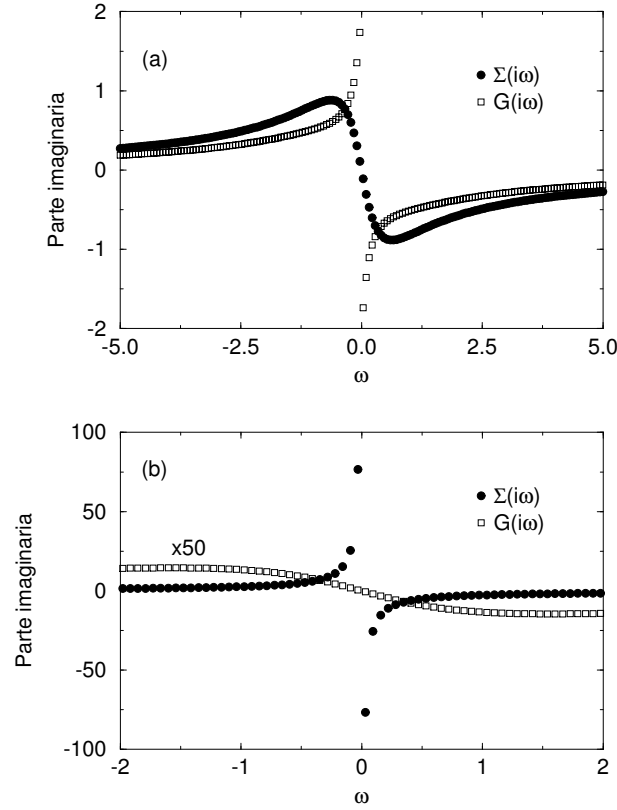


Figura A.1: Resultados obtidos para o modelo de Hubbard (a) na fase metálica, $U = 2.4$, e (b) na fase isolante, $U = 3.6$. A temperatura utilizada no cálculo foi $T = 0.01$.

O cálculo foi feito no eixo imaginário. Chamamos a atenção para o fato de que, no caso em que o sistema encontra-se na fase isolante, a parte imaginária da autoenergia diverge para baixas frequências.

O cálculo de grandezas no eixo real a partir de resultados numéricos no eixo imaginário, como os da Figura A.1, pode ser feito utilizando os aproximantes de Padé [73, 74, 75]. Em particular, estamos interessados no cálculo da função de Green avançada, $G^A(\omega)$, cuja parte imaginária dá a DE do sistema.

O método dos aproximantes de Padé consiste em ajustar uma fração racional à função de Green calculada em N frequências de Matsubara [por exemplo, $G(i\omega_n)$ na Figura A.1]. Após esse ajuste, o aproximante de Padé para a função de Green

em qualquer ponto z do plano complexo é dado por

$$G_N(z) = \frac{A_N(z)}{B_N(z)}, \quad (\text{A.2})$$

onde, para N par, $A_N(z)$ é um polinômio de ordem $(N-2)/2$ e $B_N(z)$ é um polinômio de ordem $N/2$, o que permite que a função $G_N(z)$ apresente o comportamento assintótico correto quando $|z| \rightarrow \infty$. O algoritmo que utilizamos para o cálculo numérico está descrito no apêndice da referência [74]. É um algoritmo recursivo, que permite o cálculo direto de $G_N(z)$ para determinado z dadas as funções de Green em N frequências de Matsubara.

Para implementar o cálculo numérico, é preciso saber como escolher o número N de frequências e também quais frequências usar. Analisando os resultados obtidos em vários testes, concluímos que existe um intervalo do número N para o qual o método funciona, tipicamente N entre 20 e 30. Quanto à escolha das frequências, segundo H. J. Vidberg e J. W. Serene [74], devemos trabalhar com frequências positivas. Nos testes realizados, pudemos notar que é importante escolher um número razoável de frequências baixas, para que essa região fique bem descrita, e também frequências maiores, que descrevam o comportamento assintótico da função. Para isso, trabalhamos com quatro parâmetros de entrada: o número N_1 de frequências com espaçamento Δ_1 , a partir da primeira frequência positiva de Matsubara, e o número N_2 de frequências com espaçamento Δ_2 , sendo $\Delta_1 < \Delta_2$.

Ainda com base nos testes realizados, notamos que existe uma certa margem em que os parâmetros acima podem ser variados sem que saibamos com segurança qual conjunto de parâmetros descreve melhor a grandeza calculada. Além disso, no cálculo da DE, obtivemos alguns valores negativos na região de baixas frequências, valores estes que claramente não têm significado físico. A conclusão a que chegamos é que esses pontos são espúrios e introduzidos por deficiências do cálculo numérico realizado. Uma maneira de ganhar confiabilidade nos resultados obtidos usando aproximantes de Padé, útil no cálculo a temperatura finita realizado no eixo imaginário, é compará-los aos resultados a temperatura nula, já que esse cálculo pode ser feito diretamente no eixo real.

Os resultados obtidos para a DE em função da frequência no *modelo de Hubbard* são apresentados na Figura A.2 para diferentes valores do potencial de interação: (a) $U = 1$, (b) $U = 3$ e (c) $U = 4$. Os resultados apresentados são para temperatura nula, $T = 0.01$ e $T = 0.20$. Esses gráficos mostram que, à medida que o potencial

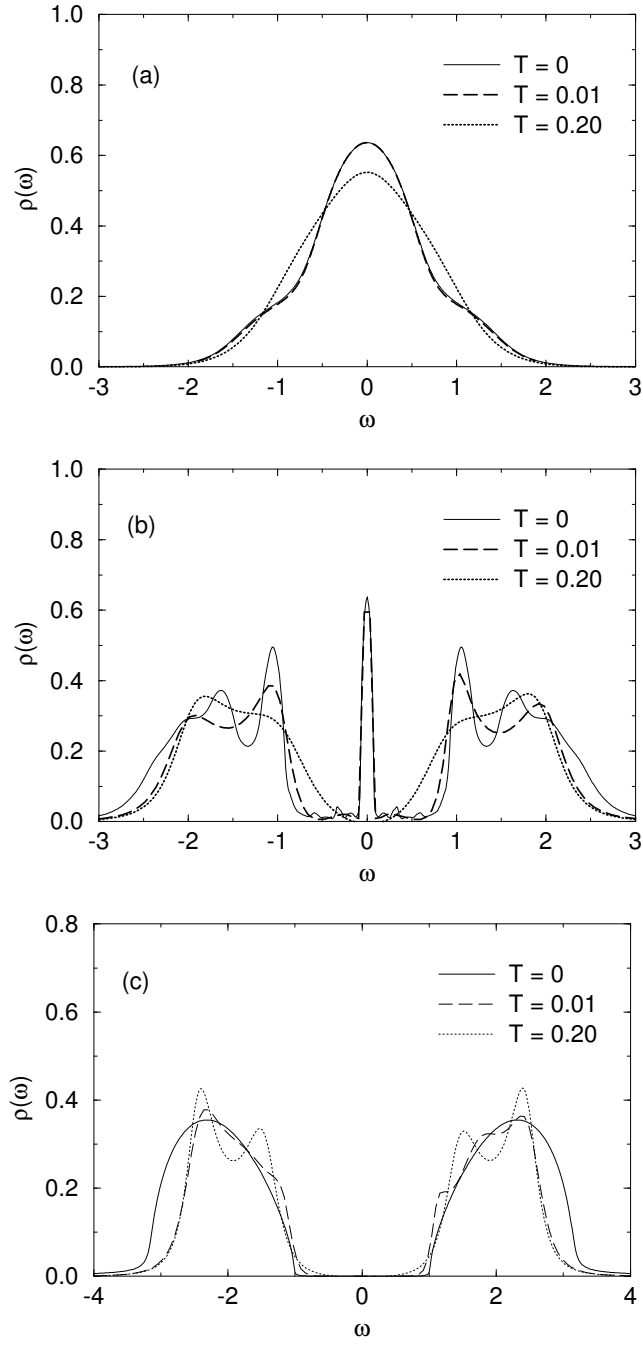


Figura A.2: Resultados obtidos para a DE em função da frequência no *modelo de Hubbard* variando-se o potencial de interação: (a) $U = 1$, (b) $U = 3$ e (c) $U = 4$. Os parâmetros utilizados no cálculo dos aproximantes de Padé foram $N_1 = 8$, $\Delta_1 = 1$, $N_2 = 16$ e $\Delta_2 = 20$.

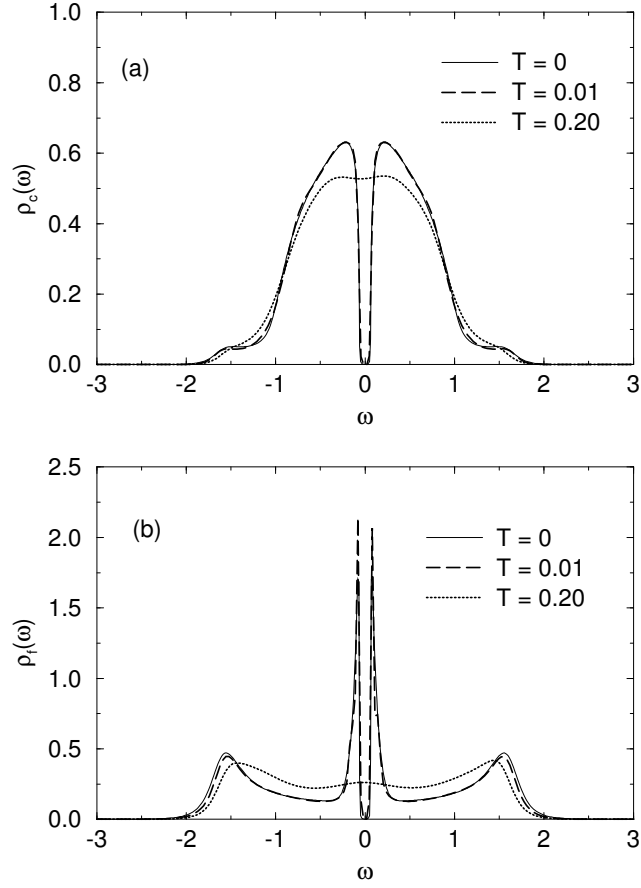


Figura A.3: Resultados obtidos para a DE (a) dos elétrons de condução e (b) dos elétrons tipo f no *modelo da rede de Anderson* para $U = 2$ e $V = 0.4$. Os parâmetros utilizados no cálculo dos aproximantes de Padé foram $N_1 = 8$, $\Delta_1 = 1$, $N_2 = 16$ e $\Delta_2 = 20$.

de interação aumenta, o sistema sofre uma transição metal-isolante (transição de Mott), passando a apresentar duas bandas de energia localizadas em torno de $\pm U/2$ e separadas por um “gap”. Esse transição também está presente nos resultados da Figura A.1. Podemos ainda notar que, para $T = 0.20$, a transição ocorre num valor de U inferior aos valores para $T = 0$ e $T = 0.01$.

A Figura A.3 mostra os resultados obtidos para a DE (a) dos elétrons de condução e (b) dos elétrons tipo f no *modelo da rede de Anderson* para $U = 2$ e $V = 0.4$. A Figura A.4 apresenta os mesmos gráficos para $U = 3$. Comparando os resultados para as três temperaturas apresentadas, notamos o fechamento do “gap” presente a

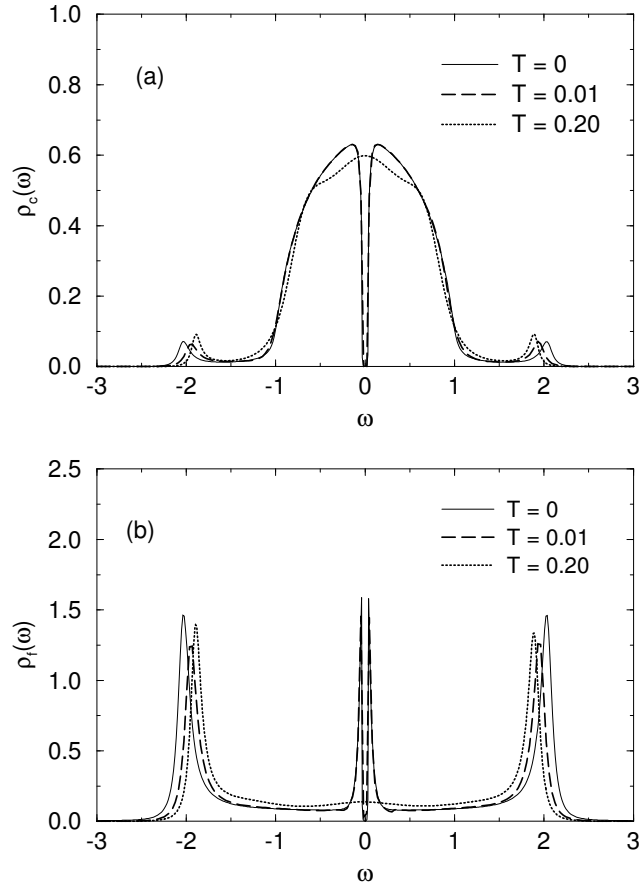


Figura A.4: Resultados obtidos para a DE (a) dos elétrons de condução e (b) dos elétrons tipo f no *modelo da rede de Anderson* para $U = 3$ e $V = 0.4$. Os parâmetros utilizados no cálculo dos aproximantes de Padé foram $N_1 = 8$, $\Delta_1 = 1$, $N_2 = 16$ e $\Delta_2 = 20$.

$T = 0$ e $T = 0.01$. Além disso, para essas duas temperaturas, o “gap” se torna mais estreito quando o potencial de interação aumenta de $U = 2$ para $U = 3$.