

Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física “Gleb Wataghin”

Dissertação de Mestrado

**Efeitos de Desordem e Correlação
Eletrônica numa Abordagem local**

Daniel Cesar Bosco de Miranda

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Miranda

Este exemplar corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado defendida pelo aluno Daniel Cesar Bosco de Miranda e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas, 12 de Maio de 2009

Eduardo Miranda

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

M672e Miranda, Daniel Cesar Bosco de
 Efeitos de desordem e correlação eletrônica numa
 abordagem local / Daniel Cesar Bosco de Miranda. --
 Campinas, SP : [s.n.], 2009.

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

1 1. Hubbard, Modelo de. 2. Sistemas desordenados.
2 3. Transições metal-isolante. I. Miranda, Eduardo.
3 II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física
4 "Gleb Wataghin". III. Título.

5 (vsv/ifgw)

- **Título em inglês:** Effects of disorder and electronic correlations within a local approach
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
 - 1. Hubbard model
 - 2. Disordered systems
 - 3. Metal-insulator transitions
- **Área de Concentração:** Física da Matéria Condensada
- **Titulação:** Mestre em Física
- **Banca examinadora:**
 - Prof. Eduardo Miranda
 - Prof. Luiz Nunes de Oliveira
 - Prof. Peter Alexander Bleinroth Schulz
- **Data da Defesa:** 24/03/2009
- **Programa de Pós-Graduação em:** Física

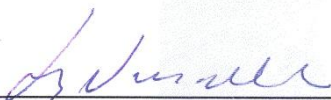


MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **DANIEL CESAR BOSCO DE MIRANDA – RA 069821** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 24 / 03 / 2009.

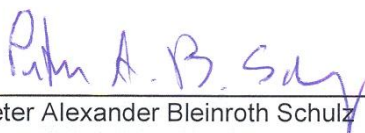
COMISSÃO JULGADORA:



Prof. Dr. Eduardo Miranda - Presidente da Comissão Julgadora
DFMC/IFGW/UNICAMP



Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira – IFSC/USP



Prof. Dr. Peter Alexander Bleinroth Schulz - DFMC/IFGW/UNICAMP

Para minha família.

Agradecimentos

Ao meu orientador, o professor Dr. Eduardo Miranda, por ter me aceitado como seu aluno e pelo apoio que me deu nesses dois anos de trabalho.

Aos amigos do grupo: Eric, que me forneceu diversos dos seus códigos numéricos, Martha e Jesus. Todos contribuíram muito para a minha aprendizagem com as conversas que tivemos.

Aos amigos que fiz na UNICAMP, principalmente no Prédio D do IFGW.

Ao professor Marcelo Rozenberg, por ter fornecido o seu código numérico de Monte Carlo Quântico e ter tirado várias das dúvidas que tive.

Aos meus pais, pelo apoio que me deram em todas as etapas da minha vida. Aos meus irmãos, Lúcia, Fernanda e Felipe. Todos sempre preocupados comigo e me dando ajuda nos momentos mais difíceis. Sem o amor da minha família não teria conseguido terminar esta dissertação.

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

Resumo

O objetivo deste trabalho é estudar os efeitos da desordem nas proximidades da transição metal-isolante de Mott. Para tanto, utilizamos o modelo de Hubbard desordenado em duas dimensões. A teoria que aplicamos para estudar esse modelo é a Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio, que trata de maneira não-trivial os efeitos de desordem e interação elétron-elétron. A aproximação básica da teoria consiste em descrever os efeitos de interação de maneira local. Nela mapeamos o nosso problema original em vários problemas de uma impureza de Anderson, embebidos em banhos que são determinados através de uma condição de autoconsistência. Esses problemas são resolvidos no nosso trabalho aplicando o método do Monte Carlo Quântico, algoritmo Hirsch-Fye, que faz cálculos em temperatura finita. No nosso estudo conseguimos observar a coexistência de soluções metálicas ruins e isolantes ruins num mesmo sistema, para temperaturas um pouco maiores do que a que determina o ponto crítico da transição de Mott. Relacionamos a condutividade local com as energias locais desordenadas, observando que essas energias funcionam como um potencial químico dependente do sítio que altera localmente a dopagem do sistema. Finalmente, verificamos o aumento do valor da interação crítica com a desordem. Esse trabalho é a primeira implementação numérica da Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio com Monte Carlo Quântico, que é o estado da arte de cálculos de sistemas de uma impureza única. Nesse sentido, nosso trabalho representa um importante primeiro passo na implementação do método e fornece um paradigma inicial do seu poder e das suas limitações.

Abstract

The main goal of this work is to study the effects of disorder in the proximity of a Mott metal-insulator transition. For that, we use the disordered Hubbard model in two dimensions. The theory we apply to study this model is the Statistical Dynamical Mean Field Theory, which treats the effects of disorder and electron-electron interactions in a non-trivial fashion. The basic approximation of that theory is to describe the effects of interactions in a local way. In this theory we map the original system in several Anderson single-impurity problems, embedded in baths that are determined through a self-consistency condition. These problems are solved in our work through the Quantum Monte Carlo method, with the Hirsch-Fye algorithm, at finite temperature. In our study, we found the coexistence of bubbles of bad metal and bad insulator in the same system, for temperatures a little higher than that which determines the critical point of the Mott transition. We could relate the local conducting properties with the local disordered energies, finding that these energies work like a site-dependent chemical potential which changes locally the doping of the system. Finally, we verified the enhancement of the critical interaction by disorder. This work is the first numerical implementation of the Statistical Dynamical Mean Field Theory with the Quantum Monte Carlo, which is the state of art for calculations of single-impurity systems. In this sense, our work is an important first step in the implementation of the method and sets a preliminary benchmark of its power and limitations.

Sumário

1	Introdução	1
2	Transição Metal-Isolante	4
2.1	Transição Metal-Isolante de Anderson	4
2.2	Transição Metal-Isolante de Mott	11
2.3	Transição Metal-Isolante em sistemas 2D	14
3	Fundamentação Téorica	19
3.1	Teoria Dinâmica de Campo Médio	19
3.1.1	Teoria	19
3.1.2	TDCM e Transição Metal-Isolante de Mott	26
3.2	Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio	29
3.3	Problema de uma impureza	32
4	Resultados	37
4.1	Modelo	37
4.2	Método	38
4.3	Resultados	44
5	Conclusões	59
A	Algoritmo Hirsch-Fye	61

Lista de Figuras

2.1	Representações de funções de onda em um sistema desordenado. Figura reproduzida da ref. [10]	9
2.2	Densidade de estados típica para um sistema desordenado	9
2.3	Diagrama de fases do modelo de Anderson para uma rede cúbica 3d, calculado por G. Schubert <i>et al.</i> [13]	11
2.4	Densidade de estados para um isolante de Mott típico	13
2.5	Resistividade em função da temperatura para um MOSFET de Si para diferentes valores de densidade eletrônica, medida por Kravchenko <i>et al.</i> [21]	16
2.6	Comportamento da resistividade na vizinhança da separatiz para um MOSFET de silício diluído como função da temperatura. Resultado reproduzido da ref. [5].	17
2.7	Resistividade na separatiz para um MOSFET de Si como função da temperatura, comparada com a obtida teoricamente utilizando a teoria de escala com apenas um parâmetro. Resultado reproduzido da ref. [5]	17
3.1	Cavidade criada na rede removendo-se um único sítio e suas ligações adjacentes. Figura reproduzida da ref. [2]	21
3.2	Densidade de estados local a $T=0$, para alguns valores de U , obtidas pela teoria de perturbação iterada. Resultado reproduzido da ref. [2]	27

3.3	Diagrama de fases do modelo de Hubbard completamente frustrado no semi-preenchimento, obtido utilizando TDCM. Resultado reproduzido da ref. [2]	28
3.4	Diagrama de fases para o óxido de vanádio V_2O_3 dopado com cromo Cr, obtido por P. Limelette <i>et al.</i> [25]	29
3.5	Diagrama de fases do modelo de Hubbard desordenado para vários valores de W , obtido com a TDCM por M. C. O. Aguiar <i>et al.</i> [26]	31
3.6	Parte real e parte imaginária da função de hibridização $\Delta_i(\omega)$ de dois sítios quaisquer e do seu valor médio, resultado obtido utilizando TEDCM por E. C. Andrade <i>et al.</i> [30]	33
4.1	Densidade de estados para o Hamiltoniano estudado quando $U=0$, $W=0$ e $t_1 = 0.25$. D é a semi-largura da banda, a unidade de energia que utilizamos.	38
4.2	$\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede para $W=0.6$, $U=2.18$ e $T=0.025$	39
4.3	Evolução de $\text{Im } G(i\omega_1)$ para alguns sítios de uma rede 20×20 com o número de passos de iteração, para $W=0.6$, $U=2.22$ e $T=0.025$	40
4.4	Evolução de $\text{Im } G(i\omega_1)$ com o número de passos de iteração para $W=0.6$, $U=2.22$ e $T=0.025$	41
4.5	Distribuição espacial de $\text{Im } G(i\omega_1)$ para dois “chutes” iniciais diferentes, com $W=0.6$, $U=2.22$ e $T=0.031$	42
4.6	Média aritmética de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para $W=0.6$, $U=2.22$ e $T=0.025$ e diferentes números de varreduras de Monte Carlo	43
4.7	Distribuição espacial de $\text{Im } G(i\omega_1)$ para $W=0.6$, $U=2.22$ e $T=0.025$ e diferentes números de varreduras de Monte Carlo	44
4.8	Diagrama de fases aproximado, no caso em que $W=0$, para o modelo que estudamos	45

4.9	$\text{Im } G(i\omega_n)$ para um metal e um isolante de Mott típicos	46
4.10	$\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede, $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para os sítios em que $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ tem seu valor máximo e o seu valor mínimo, e o valor médio de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para $W=0.8$, $U=2.27$ e $T=0.025$	47
4.11	$\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede, $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para os sítios em que $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ tem seu valor máximo e o seu valor mínimo, e o valor médio de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para $W=0.6$, $U=2.18$ e $T=0.025$	48
4.12	$\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede, $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para os sítios em que $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ tem seu valor máximo e o seu valor mínimo, e o valor médio de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para $W=0.6$, $U=2.13$ e $T=0.025$	49
4.13	$\text{Im } G(i\omega_1)$ em ordem decrescente para uma realização de desordem e ε_i seguindo o mesmo ordenamento para $W=0.6$, $U=2.08$ e $T=0.025$	50
4.14	$\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede para três realizações diferentes de desordem, para $W=0.6$, $U=2.21$ e $T=0.025$	51
4.15	$\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para os sítios em que $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ tem seu valor máximo e o seu valor mínimo, e o valor médio de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para $W=0.6$ e $T=0.025$ e alguns valores de U	52
4.16	$\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede para $W=0.6$, $T=0.025$ e alguns valores de U	53
4.17	$\text{Im } G_i(i\omega_n) / \langle \text{Im } G_i(i\omega_n) \rangle$ para $W=0.6$, $T=0.025$ e alguns valores de U .	54
4.18	$\text{Im } G_i(i\omega_n) / \langle \text{Im } G_i(i\omega_n) \rangle$ para $W=0.8$, $T=0.025$ e alguns valores de U .	55
4.19	Flutuações de $\text{Im } G(i\omega_1)$ em torno da média para $T=0.025$ e dois valores de desordem: $W=0.6$ e $W=0.8$	56
4.20	Média aritmética de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para $W=0.6$, $T=0.025$ e alguns valores de U	57
4.21	Média aritmética de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para $W=0.6$ ou $W=0.8$, $T=0.025$ e alguns valores de U	58

Capítulo 1

Introdução

Sistemas desordenados são bastante comuns e interessantes, além de terem relevância tecnológica, como no caso dos semicondutores dopados e dos semicondutores vítreos. No entanto, devido à falta de invariância translacional, abordagens teóricas para o estudo de tais sistemas não são simples. Um bom entendimento foi ganho nos últimos anos, desde que Anderson propôs o seu modelo em 1958 [1] e enfatizou a importância de considerarmos distribuições de probabilidade e não apenas médias para uma descrição do que ocorre nesses sistemas. A desordem está associada a processos aleatórios e cada sistema é diferente: no caso de semicondutores dopados, a distribuição das impurezas varia de amostra para amostra. Atualmente entende-se bem principalmente a física de sistemas desordenados não-interagentes ou fracamente interagentes. Mas o que ocorre quando temos desordem e interações fortes?

A física de sistemas fortemente correlacionados representa outro desafio, uma outra classe de problemas bastante interessantes e não completamente entendidos. Por sistema fortemente correlacionado queremos dizer um sistema em que a interação elétron-elétron tem intensidade igual ou maior que a energia cinética. Um modelo de sistema fortemente correlacionado bastante estudado é o modelo de Hubbard. Esse é um modelo simples, que se acredita seja capaz de captar a essência da física dos óxidos de metais de

transição e da transição metal-isolante de Mott que ocorre em tais sistemas. No entanto, a não ser em uma dimensão, o modelo não tem solução analítica e precisamos de boas aproximações para estudá-lo. Uma teoria que vem sendo aplicada com bastante sucesso ao modelo de Hubbard e a outros modelos de sistemas fortemente correlacionados é Teoria Dinâmica de Campo Médio (TDCM) [2]. Essa teoria trouxe luz a diversos fenômenos, em particular à transição metal-isolante de Mott.

Entender quais os efeitos que a desordem traz à transição de Mott é um problema bastante interessante e essencialmente em aberto. Para estudá-lo, precisamos de alguma abordagem que leve em conta os efeitos de desordem e interação forte. A TDCM pode ser utilizada para estudar sistemas em que desordem e interação elétron-elétron são importantes, porém ela é um tanto deficiente nesse caso, pois não descreve efeitos de localização de Anderson. O tratamento que ela dá à desordem equivale à chamada Aproximação do Potencial Coerente (do inglês “Coherent Potential Approximation”). Existe, entretanto, uma generalização da TDCM que mantém o tratamento local das correlações eletrônicas, característica da TDCM, mas que incorpora efeitos de localização de Anderson: é a chamada Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio (TEDCM). A TEDCM é uma teoria bastante poderosa e ainda não muito explorada para estudar os efeitos conjuntos de desordem e correlação. O interesse do nosso trabalho é aplicar a TEDCM para estudar o modelo de Hubbard desordenado numa rede bidimensional nas proximidades da transição metal-isolante de Mott. Este trabalho é o primeiro a utilizar a TEDCM com Monte Carlo Quântico, e representa um importante primeiro passo para entender o poder e as limitações do método.

A transição metal-isolante em sistemas bidimensionais é um problema que vem sendo discutido há vários anos. Desde que a teoria de escala para a localização [3] previu que sistemas bidimensionais desordenados não-interagentes seriam isolantes para qualquer valor de desordem, a questão da possibilidade de um estado metálico em duas dimensões

vem sendo motivo de debate. A inclusão de interações fracas ao problema mostrou que essa localização era realçada, de maneira que se acreditou na impossibilidade de um estado metálico em sistemas bidimensionais de qualquer tipo. Experimentos iniciais, feitos na década de 1980 estavam de acordo com isso. No entanto, em meados da década de 1990 começaram a surgir evidências de estados metálicos em duas dimensões e de uma transição metal-isolante em tais sistemas [4, 5]. Nesses experimentos as interações elétron-elétron eram bastante intensas, muito mais intensas que a energia cinética. Esses experimentos dão motivação a um estudo como o nosso, o de elétrons fortemente interagentes em uma rede bidimensional desordenada.

No capítulo 2, falaremos sobre transição metal-isolante. Concentraremos a nossa atenção no que é relevante para o nosso trabalho: a transição metal-isolante de Anderson, a transição metal-isolante de Mott, e resultados experimentais que dão evidências de uma transição metal-isolante em sistemas bidimensionais.

No capítulo 3 introduziremos a TDCM para depois abordarmos a teoria que aplicamos no nosso estudo, a TEDCM. Finalmente será discutido o método de solução do problema de uma impureza de Anderson, parte importante da TEDCM.

No capítulo 4 apresentaremos os resultados que obtivemos aplicando a TEDCM ao estudo do modelo de Hubbard desordenado em uma rede bidimensional.

Finalmente, faremos um resumo apresentando as conclusões deste trabalho.

Capítulo 2

Transição Metal-Isolante

Neste capítulo iremos tratar da transição metal-isolante, nos concentrando no que é relevante para o nosso trabalho. Na primeira seção falaremos da transição de Anderson, na segunda da transição de Mott e por último de alguns resultados experimentais em sistemas bidimensionais.

2.1 Transição Metal-Isolante de Anderson

Muito da maneira como pensamos sobre estados eletrônicos em matéria condensada é determinado pela nossa experiência com elétrons independentes movendo-se num cristal. Nesse caso, os auto-estados eletrônicos são estendidos por todo o sistema e as energias correspondentes são divididas em bandas que são separadas por gaps, onde não temos estados. Mas o que ocorre quando temos um sistema desordenado? P. W. Anderson [1] percebeu que em sistemas desordenados as coisas podem ser bem diferentes. Nesse tipo de sistema existe a possibilidade de uma banda de energia inteira, ou parte dela, ser composta de estados localizados espacialmente. É esse fato e as suas consequências que começaremos a discutir agora [6, 7, 8, 9].

Historicamente o que deu ímpeto ao estudo de Anderson sobre localização foram

experimentos de ressonância magnética realizados em silício dopado com fósforo. O fenômeno físico de interesse nesses experimentos era a difusão de spin num meio desordenado, a mudança do spin do elétron da impureza com o tempo.

Como o raio de Bohr efetivo para o elétron de valência do fósforo que não forma ligação com o silício é da ordem de 20 Å, a função de onda desse elétron se estende sobre um número grande de núcleos de Si. Da ordem de 5 % dos átomos de silício são do isótopo ^{29}Si , que possui momento magnético, de maneira que o campo magnético local visto pelos spins dos elétrons das impurezas tem uma largura causada pela interação hiperfina. Isso implica que a ressonância desses spins ocorre em um intervalo amplo de campos magnéticos. Utilizando este fato, técnicas de ressonância magnética podem ser aplicadas de maneira a acompanhar diretamente a difusão de um spin (que, por exemplo, tem ressonância no campo H_1). O fato estranho observado foi que a difusão era da ordem de 10^6 vezes mais lenta que a esperada, tomando como base estimativas teóricas simples.

Isso levou Anderson a pensar que a difusão poderia ou não acontecer dependendo das larguras das distribuições do acoplamento spin-spin e do campo magnético experimentado por cada elétron. Se essas larguras fossem muito grandes o spin não difundiria. A idéia é naturalmente generalizada para o problema da difusão de elétrons em meios desordenados, que é onde está nosso interesse e no qual focaremos nossa atenção a partir de agora.

Para analisar esse problema Anderson criou o modelo mais simplificado possível que contivesse o essencial do problema, um modelo “tight-binding” desordenado de partículas não-interagentes conhecido como modelo de Anderson:

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j, \quad (2.1)$$

onde c_i e $c_i^\dagger$ são os operadores de aniquilação e criação de um elétron no sítio i , t_{ij} é a amplitude de “hopping” entre os sítios i e j , tomado como não aleatório, e ε_i é uma energia local aleatória, determinada por uma distribuição de probabilidade com largura W .

Vamos dar uma idéia do argumento original de Anderson utilizando uma notação mais moderna. Basicamente o que ele fez foi estudar a função de Green local de um sítio qualquer i , dada por

$$G_{ii}(E^+) = \left(\frac{1}{E^+ - H} \right)_{ii} = \frac{1}{E^+ - \varepsilon_i - \Sigma_i(E^+)}, \quad (2.2)$$

onde $E^+ = E + is$, sendo E a energia do elétron e s um quantidade pequena e positiva, e $\Sigma_i(E^+)$ a auto-energia. Analisando essa função, ele percebeu que se E estiver numa região em que temos estados estendidos a parte imaginária de $\Sigma_i(E^+)$ tem um valor finito no limite em que $s \rightarrow 0$ e que, por outro lado, se E estiver numa região de estados localizados espacialmente a parte imaginária de $\Sigma_i(E^+)$ tende a zero quando $s \rightarrow 0$ [6, 7, 8, 9].

Podemos analisar isso tratando a parte do Hamiltoniano de Anderson que contém o hopping como perturbação. Expandindo a auto-energia, temos

$$\Sigma_i(E^+) = \sum_{j \neq i} \frac{t_{ij}t_{ji}}{E^+ - \varepsilon_j} + \sum_{j,k \neq i} \frac{t_{ij}t_{jk}t_{ki}}{(E^+ - \varepsilon_j)(E^+ - \varepsilon_k)} + \dots \quad (2.3)$$

O primeiro passo é olharmos para o comportamento do termo de ordem mais baixa, que nos dá

$$\text{Im}\Sigma_i(E^+) = -s \sum_{j \neq i} \frac{t_{ij}t_{ji}}{(E - \varepsilon_j)^2 + s^2}. \quad (2.4)$$

Se tomarmos a média sobre configurações de desordem da equação (2.4), assumindo hopping apenas entre primeiros vizinhos e uma distribuição uniforme para as energias ε_i no intervalo $[-W/2, +W/2]$, obtemos que

$$\begin{aligned} \langle \text{Im}\Sigma_i(E^+) \rangle &= -s \frac{zt^2}{W} \int_{-W/2}^{W/2} \frac{d\varepsilon}{(E - \varepsilon)^2 + s^2} \\ &= -\frac{zt^2}{W} \frac{s}{2} \left(\tan^{-1} \frac{E - W/2}{s} - \tan^{-1} \frac{E + W/2}{s} \right), \end{aligned} \quad (2.5)$$

de modo que $\langle \text{Im}\Sigma_i(E^+) \rangle$ dá uma constante quando $s \rightarrow 0$. Nesse ponto poderíamos ser levados ao erro se, baseados no que dissemos acima acerca da diferença entre estados estendidos e localizados, concluíssemos que o estado de energia E é estendido. O fato

importante notado por Anderson é que se deve olhar para a distribuição de probabilidade para fazer tal afirmação. Para ver por que isso é necessário, vamos analisar a equação (2.4) de maneira mais detalhada [7]. Com um s finito, temos que

$$\text{Im}\left(\frac{\Sigma_i(E^+)}{s}\right) = -\sum_{j \neq i} \frac{t_{ij}t_{ji}}{(E - \varepsilon_j)^2 + s^2} \quad (2.6)$$

A condição para que ε_j apareça como um pico de $\text{Im}(\Sigma_i/s)$, de modo que possamos ter $\text{Im}\Sigma_i$ finito quando $s \rightarrow 0$, depende de que ε_j esteja dentro de um intervalo s ao redor de E e que t_{ij} seja maior que s . Para analisarmos a possibilidade de que t_{ij} seja grande o suficiente vamos assumir a hipótese fisicamente razoável de funções de onda exponenciais, de modo que

$$t(R) = t_0 e^{-R/R_0}, \quad (2.7)$$

onde $t(R)$ é o termo de hopping entre sítios i e j , separados por uma distância R . $t_{ij} > s$ implica

$$R < -R_0 \ln \frac{s}{t_0}, \quad (2.8)$$

onde o sinal de menos foi incluído porque s é muito pequeno. Sendo n a densidade de sítios por unidade de volume, temos $-n \frac{4}{3} \pi R_0^3 (\ln \frac{s}{t_0})^3$ sítios em volta do sítio i que satisfazem à condição $t_{ij} > s$. Além disso, assumindo que E está dentro da região $[-W/2, +W/2]$, a probabilidade de que um dado j sítio tenha energia ε_j no intervalo s ao redor de E é s/W .

Sendo assim, a probabilidade de que $t_{ij} > s$ e $|E - \varepsilon_j| < s$ é dada por

$$P(t_{ij} > s, |E - \varepsilon_j| < s) = -n \frac{4\pi R_0^3}{3} \left(\frac{s}{W}\right) \left(\ln \frac{s}{t_0}\right)^3. \quad (2.9)$$

No limite $s \rightarrow 0$

$$P(t_{ij} > s, |E - \varepsilon_j| < s) = 0, \quad (2.10)$$

de maneira que a possibilidade de termos estados estendidos é efetivamente zero.

Pode-se formalizar a análise acima [1] e mostrar que a distribuição de probabilidade de $X = \text{Im}(\Sigma_i/s)$ é dada por $P(X) = \exp(-s/X)/X^{3/2}$. A probabilidade de que

$X \sim 1/s$ (necessária para estados estendidos) é $P(1/s) \sim s^{3/2}$, ou seja, praticamente nula quando $s \rightarrow 0$. Podemos ver que a distribuição de probabilidade de $\text{Im}\Sigma_i(E^+)$ na verdade corresponde ao estado de energia E como sendo localizado. O fato da média não nos dar informação útil vem do fato da distribuição $P(X)$ ser bastante larga e os momentos superiores não serem finitos.

Para mostrar que o estado é realmente localizado, é preciso mostrar que a expansão em termos do hopping converge e que a distribuição de probabilidade para $\text{Im}\Sigma$ tem o mesmo comportamento qualitativo que a do termo de segunda ordem, discutido anteriormente. Demonstrar essa convergência é bem complicado, mas em suma requer que zt/W seja menor que um valor crítico que depende na energia, dimensionalidade e tipo de rede. Anderson mostrou que quando a convergência é obtida, $P(X)$ tem o mesmo comportamento discutido acima e desse modo definiu os estados estendidos como aqueles em que a teoria de perturbação falha. A discussão acima salienta a importância de lidarmos com distribuições de probabilidade para quantidades físicas ao invés de valores médios quando tratamos de um sistema desordenado. Fenômenos novos, como a localização, podem ser perdidos por abordagens que se concentrem na última. Por exemplo, a Aproximação do Potencial Coerente (CPA) prediz apenas estados estendidos num sistema desordenado.

Na figura 2.1 temos a representação de um estado estendido (a) e de um estado localizado (b) num sistema desordenado. De maneira geral podemos ver a função de onda de um estado localizado num sistema desordenado como uma função que tem um envelope que decai exponencialmente a partir de um certo ponto no espaço, de modo que $|\psi(\vec{r})| \sim \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_0|/\xi)$. ξ é chamado de comprimento de localização.

O que emerge dessa discussão é que num sistema desordenado podemos ter regiões de energia em que os estados são estendidos e regiões em que os estados são localizados. É plausível que estados localizados e estendidos de mesma energia não coexistam, visto que nesse caso poderíamos misturá-los de modo a delocalizar os primeiros. Além disso,

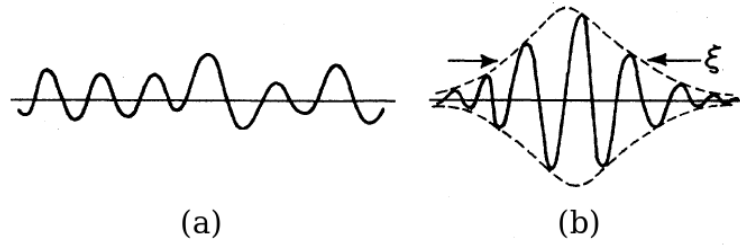


Figura 2.1: Representações de uma (a) função de onda estendida e de uma (b) função de onda localizada num sistema desordenado. Figura reproduzida da ref. [10].

os estados localizados devem estar nas bordas da banda pois correspondem a armadilhas mais profundas no espectro de energia, o que impede que os sítios se conectem. Uma densidade de estados típica para sistemas descritos pelo Hamiltoniano (2.1) está na figura 2.2. As energias E_c e $E_{c'}$ que separam estados estendidos de localizados são chamadas de bordas de mobilidade. À medida que a desordem aumenta as bordas de mobilidade se movem em direção ao centro da banda e, para desordem alta o suficiente, todos os estados estendidos desaparecem.

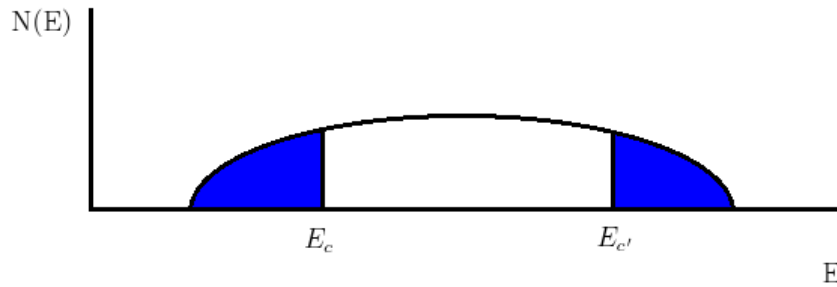


Figura 2.2: Densidade de estados para um sistema desordenado. A região azul corresponde a estados localizados. E_c e $E_{c'}$ são chamadas de bordas de mobilidade.

Uma cenário muito interessante surge da análise da figura 2.2. À temperatura zero os estados eletrônicos são ocupados um por um em ordem crescente de energia. Se o estado na energia de Fermi for estendido, o sistema é um metal, visto que excitações

eletrônicas próximas à superfície de Fermi podem carregar corrente de um lado a outro da amostra. Por outro lado, se o estado eletrônico na energia de Fermi for localizado não há transporte de carga e o sistema é um isolante. Desse modo, variando a densidade do sistema ou o valor da desordem podemos cruzar a borda de mobilidade e o sistema pode passar de um estado isolante para um estado metálico e vice-versa. Essa é a chamada transição metal-isolante de Anderson.

Visto que temos uma transição de fase o próximo passo é sabermos se a mesma é contínua ou não. Mott argumentava que a transição deveria ser descontínua. Baseando-se em idéias anteriores, ele dizia que o livre caminho médio dos elétrons no metal não poderia ser menor que a distância entre os átomos. Aplicando essa idéia em conjunto com a teoria de transporte de Boltzmann, que nos dá $\sigma = \frac{ne^2l}{m^*v_F}$ (onde σ é a condutividade, n é a densidade eletrônica, e é a carga do elétron, m^* é a massa efetiva dos elétrons, v_F é a velocidade de Fermi e l o livre caminho médio), deve haver uma condutividade mínima para o sistema, que daria a descontinuidade da condutividade na transição.

Essa questão só ficou clara com a teoria de escala para a localização. No trabalho de Abrahams et al. [3] foi mostrado que a transição é contínua e, além disso, que em uma e duas dimensões não há estado metálico e conseqüentemente transição metal-isolante. O fato de que em uma dimensão não há transição já era conhecido [11, 12], mas em duas dimensões foi uma surpresa.

Na figura 2.3 temos o diagrama de fases do modelo de Anderson para uma rede cúbica 3d, obtido numericamente [13]. A linha contínua é a borda de mobilidade e a linha pontilhada a borda da banda. Podemos ver que para desordem suficientemente grande todos os estados estão localizados. Esse diagrama está de acordo com a discussão anterior.

A física da localização e da transição metal-isolante de Anderson é relevante para várias situações, como para o estudo de condução eletrônica na banda de impurezas em semicondutores dopados e para semicondutores amorfos e vítreos.

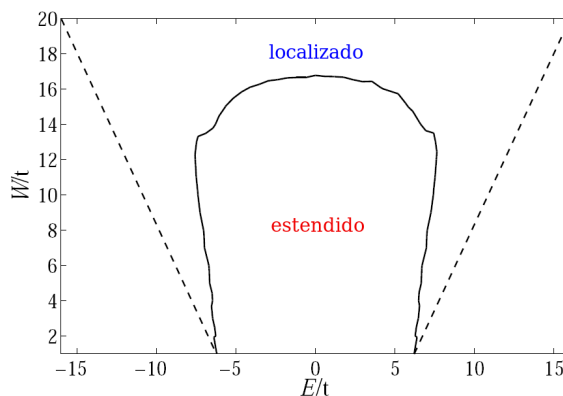


Figura 2.3: Diagrama de fases do modelo de Anderson para uma rede cúbica 3d. A linha contínua é a borda de mobilidade e a linha pontilhada a borda da banda. Resultado reproduzido da ref. [13].

Isso encerra o que queríamos falar sobre a transição metal-isolante de Anderson. Na seção seguinte trataremos da transição metal-isolante de Mott.

2.2 Transição Metal-Isolante de Mott

Na maioria dos casos podemos determinar se um sólido cristalino é metálico ou isolante analisando a sua estrutura de banda. Como dissemos no início da seção anterior, para tais sólidos os níveis de energia são divididos em bandas separadas por gaps. À temperatura $T=0$ K os níveis de energia são preenchidos em ordem crescente, de maneira que se o nível de Fermi está no meio de uma banda temos um metal e se estiver no meio de um gap temos um isolante. No entanto, nem todos os sólidos são bem descritos pela teoria de bandas. Isso ocorre porque nem sempre os efeitos de interação elétron-elétron são levados em conta de maneira adequada por essa teoria.

Historicamente, uma das primeiras falhas da teoria de bandas foi descoberta no estudo do óxido de níquel (NiO). Este sistema que teoricamente deveria ser um metal, é na verdade um isolante. O mesmo “problema” ocorre para vários óxidos de metais de

transição e alguns outros sistemas, que são conhecidos como isolantes de Mott. Além disso, esses sistemas podem sofrer uma transição metal-isolante quando variamos a pressão, temperatura ou composição. Somente com os trabalhos de Mott [14] e Hubbard [15, 16, 17] ficou clara a importância da forte interação entre os elétrons que ocupam um mesmo orbital para o entendimento do que ocorre nesses sistemas.

Um modelo adequado para o estudo de tais sistemas é o modelo de Hubbard:

$$H = - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}, \quad (2.11)$$

onde $c_{j\sigma}$ e $c_{j\sigma}^\dagger$ são os operadores de aniquilação e criação de um elétron no sítio j com projeção de spin σ , t_{ij} é a amplitude de “hopping” entre os sítios i e j , e U é a repulsão coulombiana entre elétrons de spins opostos em um mesmo sítio.

Quando a rede está semi-preenchida (um elétron por sítio), os elétrons só se movem se tiverem energia cinética suficiente para superar a energia de interação U . No limite em que $t_{ij} \ll U$, os elétrons não tem energia suficiente e surge um gap na densidade de estados eletrônica, dando origem ao comportamento de isolante de Mott. O gap $E_g \simeq U - 2D$, onde D é a semi-largura de banda, é a energia que um elétron tem de pagar para superar a energia de repulsão coulombiana e sair de um dado sítio. Na figura 2.4 temos uma representação da densidade de estados para um isolante de Mott. No limite em que $t_{ij} \gg U$, basicamente o que temos é uma banda de um modelo tight-binding semi-preenchida, ou seja, um metal. Pensando de uma maneira simplificada, partindo de um valor de U grande, à medida que U diminui existe um valor crítico de U em que as bandas se sobrepõem e obtemos um metal. Obter esse valor de U e saber o que ocorre nas proximidades dessa transição é um problema bastante complicado, que vem sendo estudado há vários anos. Essa descrição, em termos do fechamento de um gap, foi a que Hubbard [17] deu à transição metal-isolante.

Outra forma de descrever essa transição metal-isolante foi dada por Brinkman e Rice [18]. Eles trataram o problema partindo da solução metálica, que descreveram como

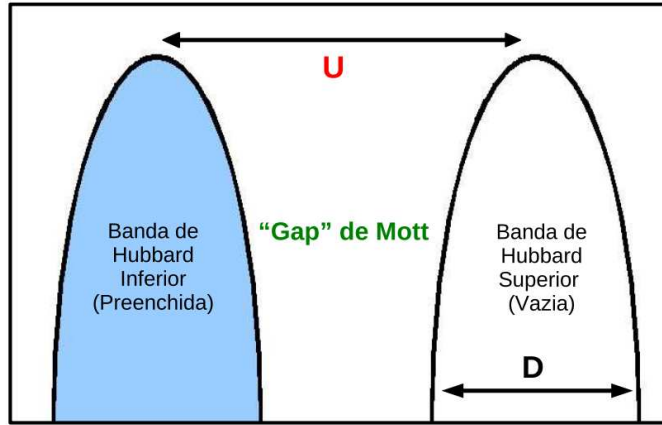


Figura 2.4: Densidade de estados para o isolante de Mott, que se forma quando a repulsão coulombiana local U é maior que a largura da banda D .

um líquido de Fermi fortemente renormalizado. Nessa abordagem, ao nos aproximarmos da transição metal-isolante a massa efetiva das quasi-partículas diverge,

$$\frac{m^*}{m} \sim (U_c - U)^{-1}, \quad (2.12)$$

indicando a localização (destruição) das mesmas. Essa descrição é boa para energias baixas, mas não captura as bandas de Hubbard que já deveriam estar presentes no estado metálico. Além disso, descreve o isolante de uma maneira muito simplificada, como uma coleção de momentos independentes localizados.

Como a transição metal-isolante de Mott ocorre quando $U \sim D$, seu tratamento teórico requer abordagens não-perturbativas. Isso impediu um entendimento claro da região crítica por muitos anos. Com a Teoria Dinâmica de Campo médio conseguimos ganhar uma visão bem mais clara da transição, unificando os pontos de vista de Hubbard e Brinkman-Rice descritos de maneira sucinta acima. Essa teoria será descrita no próximo capítulo. Isso encerra a descrição breve que queríamos fazer da transição de Mott.

2.3 Transição Metal-Isolante em sistemas 2D

Como discutido na primeira seção, em sistemas eletrônicos bidimensionais não-interagentes não há transição metal-isolante. Como a teoria de escala não inclui efeitos de interação, é de se esperar que ocorram mudanças quando as interações entre os elétrons forem levadas em conta. No entanto, trabalhos teóricos posteriores à teoria de escala para a localização mostraram que interações fracas aumentavam a localização dos elétrons [19]. Além disso, para interações fortes o sistema se torna um cristal de Wigner, em que os elétrons também estão localizados. Dessa maneira, não era esperado que esses sistemas fossem metálicos em nenhuns dos dois limites, fracamente (ou não-) interagente, ou fortemente interagente.

Experimentos em diferentes sistemas 2D, como filmes metálicos finos e MOS-FET's (do inglês metal-oxide-semiconductor field-effect transistor), realizados na década de 1980 confirmaram as previsões teóricas de maneira convincente, de modo que por quase duas décadas a questão da possibilidade de um estado metálico em um sistema 2D foi considerada resolvida.

No entanto, o progresso recente da tecnologia de semicondutores permitiu a produção de amostras muito puras, com muito pouca desordem, e em que podem ser feitas medidas a densidades eletrônicas muito baixas. Experimentos realizados nesses sistemas indicaram que o ponto de vista anterior estava geralmente errado. Comportamento metálico (resistividade diminuindo com a diminuição da temperatura) foi observado às temperaturas mais baixas atingidas, para densidades eletrônicas acima de um valor crítico n_c . Abaixo dessa densidade o comportamento da resistividade é o de um isolante, de modo que podemos ter uma transição metal-isolante variando a densidade. Esses resultados só começaram a ser bem aceitos depois que grupos distintos obtiveram o mesmo comportamento em amostras e sistemas diferentes. Uma revisão desses resultados experimentais pode ser encontrada nas referências [4, 5].

Os primeiros experimentos a demonstrar o comportamento não usual da resis-

tividade com a temperatura e a existência de uma transição metal-isolante em 2D foram realizados por Kravchenko *et al* no ano de 1994 [20] em MOSFET's de silício muito pouco desordenados, com mobilidades eletrônicas bastante elevadas, muito maiores que as obtidas em experimentos anteriores. Devido à alta qualidade dessas amostras foi possível estudá-las num regime bastante diluído. Nas densidades estudadas a energia de interação elétron-elétron média é dominante sobre a energia de Fermi. Estimativas para o valor dessas energias para um MOSFET de silício à $n_s \simeq 10^{11}\text{cm}^{-2}$ dão [4]

$$E_{e-e} \sim \frac{e^2}{\epsilon}(\pi n_s)^{1/2} \simeq 10\text{meV} \quad (2.13)$$

e

$$E_F = \frac{\pi \hbar^2 n_s}{2m^*} \simeq 0.58\text{meV}, \quad (2.14)$$

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 energia de Fermi e m^* é a massa efetiva do elétrons. A razão $r_s = E_{e-e}/E_F$ é maior que 10 para essas amostras e tem-se um regime fortemente interagente.

Na figura 2.5 temos a dependência da resistividade com a temperatura para um MOSFET de silício diluído para 30 valores de densidade eletrônica, variando de $7.12 \times 10^{10}\text{cm}^{-2}$ a $13.7 \times 10^{10}\text{cm}^{-2}$, com os valores correspondentes de r_s variando de 15 a 20 [21]. A densidades baixas, curvas de cima, a resistividade cresce monotonicamente com a diminuição da temperatura, comportamento típico de um isolante. Para densidades pouco maiores que a densidade crítica n_c (curvas abaixo da curva vermelha para a densidade crítica) a resistividade apresenta um comportamento não-monotônico: diminuindo a temperatura a resistividade primeiro aumenta, até uma temperatura da ordem de 2 K, e depois começa a decrescer de maneira bastante pronunciada até as temperaturas mais baixas obtidas. A densidades mais altas o comportamento é monotônico com T. A separatriz entre os comportamentos metálico e isolante extrapola para uma valor de aproximadamente $3h/e^2$.

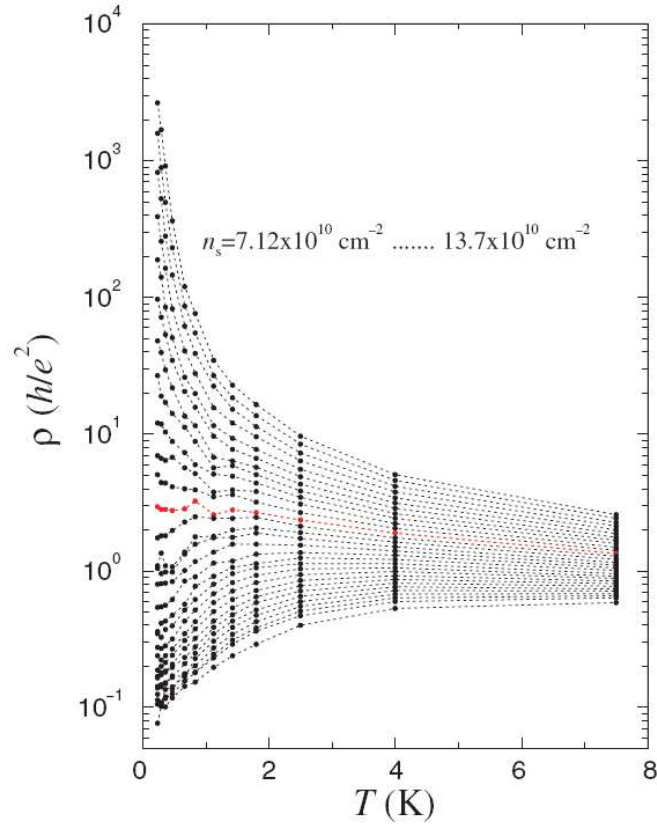


Figura 2.5: Dependência da resistividade com a temperatura para um MOSFET de silício diluído para 30 valores diferentes de densidade eletrônica. Resultado reproduzido da ref. [21].

Na figura 2.6 temos uma visão um pouco melhor do comportamento da resistividade com a temperatura na vizinhança da separatriz. Podemos ver que os comportamentos metálico e isolante são bem pronunciados nessa região, quando olhados num intervalo menor de temperatura ($T < 2$ K). As curvas abaixo da separatriz apresentam um comportamento metálico muito forte, a curva com maior densidade apresentando uma queda na resistividade de uma ordem de grandeza.

Na figura 2.7 temos uma comparação do comportamento da resistividade na separatriz com o esperado pela teoria de escala da localização para elétrons não-interagentes. Podemos ver a enorme discrepância entre as duas curvas, experimental e teórica.

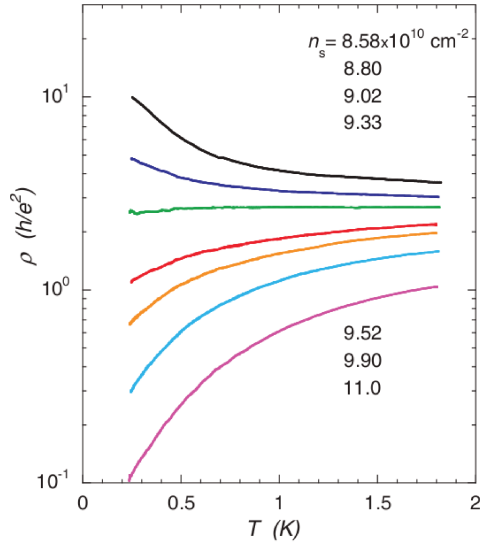


Figura 2.6: Comportamento da resistividade na vizinhança da separtriz para um MOS-FET de silício diluído como função da temperatura. Resultado reproduzido da ref. [5].

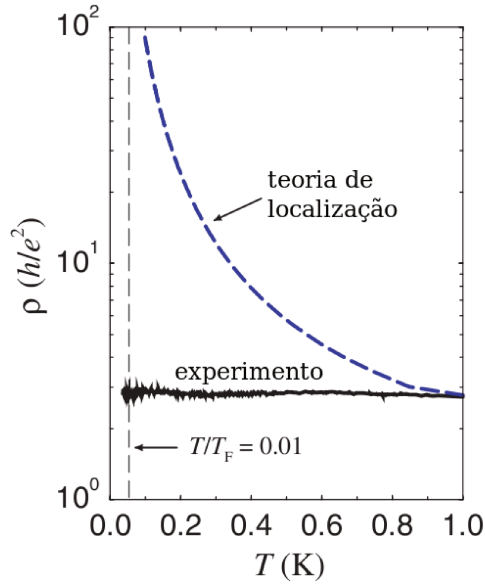


Figura 2.7: Resistividade na separtriz para um MOSFET de silício diluído como função da temperatura, comparada com a obtida teoricamente utilizando a teoria de escala com apenas um parâmetro. Resultado reproduzido da ref. [5].

Comportamentos similares aos discutidos acima foram obtidos para outros sistemas de elétrons e buracos bastante diluídos, como por exemplo heteroestruturas de GaAs/AlGaAs, p-SiGe, p-GaAs/AlGaAs e n-AlAs (ver referências em [4, 5]).

A discussão acima mostra a relevância do estudo de sistemas bidimensionais em que desordem e interações entre os elétrons estão presentes. Apesar dos dados discutidos nessa seção terem sido obtidos para desordem pequena e interações fortes, é um problema interessante saber o que ocorre quando o valor da desordem é moderado ou grande, e compete com as interações. Isso encerra o que queríamos falar sobre transição metal-isolante.

Capítulo 3

Fundamentação Téorica

Neste capítulo iremos discutir dois métodos utilizados para o estudo de sistemas fortemente correlacionados. Começaremos com a Teoria Dinâmica de Campo Médio (TDCM), que pode ser aplicada a sistemas com ou sem desordem. Depois, trataremos da Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio (TEDCM), própria para sistemas com desordem, que leva em conta os efeitos de localização de Anderson desprezados pela TDCM. Por último, falaremos de maneira sucinta sobre o método que utilizamos no nosso trabalho para resolver o problema de uma impureza de Anderson, parte fundamental tanto da TDCM quanto da TEDCM. Como nosso trabalho está focado no modelo de Hubbard, utilizaremos o mesmo como referência na dedução de algumas equações.

3.1 Teoria Dinâmica de Campo Médio

3.1.1 Teoria

A TDCM começou a surgir com o trabalho de Metzner e Vollhardt [22]. Eles perceberam que no limite de dimensão espacial infinita ($d \rightarrow \infty$) se o “hopping” no modelo de Hubbard for reescalado de maneira adequada obtém-se um limite não-trivial em que as energias

cinética e potencial são da mesma ordem. Por outro lado, os cálculos seriam bem mais simplificados nesse limite.

Isso levou a uma série de desenvolvimentos que culminou com o artigo de Georges e Kotliar [23], em que eles mostraram que no limite $d \rightarrow \infty$ o modelo de Hubbard pode ser mapeado em um problema de uma impureza embebida num banho autoconsistente, construção que é a base da TDCM.

Vamos primeiramente introduzir o modelo de Hubbard:

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

onde $c_{j\sigma}$ e $c_{j\sigma}^\dagger$ são os operadores de aniquilação e criação de um elétron no sítio j com projeção de spin σ , t_{ij} é a amplitude de “hopping” entre os sítios i e j , e U é a repulsão coulombiana entre elétrons de spins opostos em um mesmo sítio.

No caso de uma rede cúbica simples d -dimensional com parâmetro de rede $a = 1$ e hopping apenas entre primeiros vizinhos 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 t é a amplitude de hopping e $\vec{k} = (k_1, \dots, k_d)$. A densidade de estados das partículas não-interagentes ($U = 0$) no limite $d \rightarrow \infty$ é determinada pelo teorema do limite central como

$$D(\epsilon) = \frac{1}{2t(\pi d)^{1/2}} \exp[-(\epsilon/2t\sqrt{d})^2]. \quad (3.3)$$

Para que essa densidade seja finita e, conseqüentemente, a energia cinética média das partículas não-interagentes seja finita temos de reescalar o hopping fazendo $t = t^*/\sqrt{2d}$. Dessa maneira consegue-se que os termos cinético e potencial tenham a mesma ordem de grandeza e que o modelo tenha solução não-trivial [22].

Na discussão abaixo assumiremos que o sistema está na fase paramagnética, mas a teoria pode ser utilizada no estudo de fases ordenadas magneticamente. Para introduzirmos a TDCM é conveniente escrevermos a função de partição do modelo de Hubbard

como uma integração funcional nas variáveis de Grassmann [24]:

$$Z = \int \prod_i Dc_{i\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} e^{-S}, \quad (3.4)$$

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger (\partial_\tau - \mu) c_{i\sigma} - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right]. \quad (3.5)$$

$\beta = 1/T$, onde T é a temperatura, e μ é o potencial químico.

Vamos agora nos concentrar em um dado sítio, que chamaremos de o , e integrar os graus de liberdade de todos os outros sítios da rede para determinarmos a dinâmica efetiva do sítio escolhido, ou seja, para encontrarmos a ação efetiva do mesmo. Esse é o chamado método da cavidade [2], e está ilustrado na figura 3.1. A ação efetiva deve ser tal que

$$\frac{1}{Z_{ef}} e^{-S_{ef}[c_{o\sigma}^\dagger, c_{o\sigma}]} \equiv \frac{1}{Z} \int \prod_{i \neq o} Dc_{i\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} e^{-S}. \quad (3.6)$$

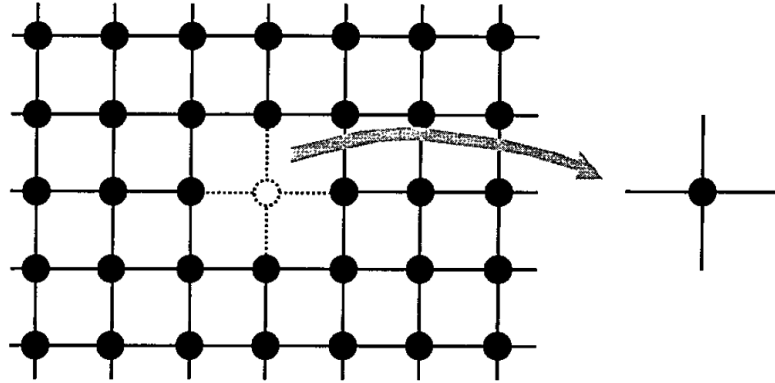


Figura 3.1: Cavidade criada na rede removendo-se um único sítio e suas ligações adjacentes. Figura reproduzida da ref. [2]

Para obtermos uma expressão formal para S_{ef} vamos dividir a ação em três partes: uma que contém apenas variáveis do sítio escolhido (S_o), outra que contém os termos que conectam o sítio escolhido ao resto da rede (ΔS) e outra que contém os termos do resto

da rede ($S^{(o)}$):

$$S_o = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_\sigma c_{o\sigma}^\dagger (\partial_\tau - \mu) c_{o\sigma} + U n_{o\uparrow} n_{o\downarrow} \right], \quad (3.7)$$

$$\Delta S = \int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} (t_{io} c_{i\sigma}^\dagger c_{o\sigma} + t_{oi} c_{o\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \quad e \quad (3.8)$$

$$S^{(o)} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i \neq o, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger (\partial_\tau - \mu) c_{i\sigma} - \sum_{i \neq o, j \neq o, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_{i \neq o} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right]. \quad (3.9)$$

Assim, podemos escrever

$$Z = \int Dc_{o\sigma}^\dagger Dc_{o\sigma} e^{-S_o} \int \prod_{i \neq o} Dc_{i\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} e^{-S^{(o)} - \Delta S}. \quad (3.10)$$

Definindo as variáveis $\eta_i = t_{io} c_{o\sigma}$, ΔS pode ser reescrita como

$$\Delta S = \int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} (\eta_i^\dagger c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger \eta_i). \quad (3.11)$$

Olhando agora para a integração na equação (3.10) que não envolve o sítio o , podemos ver que ela é o funcional geratriz das funções de Green conectadas da rede com o sítio o removido [24]. Temos então que

$$S_{ef} = \sum_{n=1}^\infty \sum_{i_1 \dots j_n} \int \eta_{i_1}^\dagger(\tau_{i_1}) \dots \eta_{i_n}^\dagger(\tau_{i_n}) \eta_{j_1}(\tau_{j_1}) \dots \eta_{j_n}(\tau_{j_n}) G_{i_1 \dots j_n}^{(o)}(\tau_{i_1} \dots \tau_{i_n} \tau_{j_1} \dots \tau_{j_n}) \quad (3.12)$$

$$+ S_o.$$

No limite de dimensões muito grandes ($d \rightarrow \infty$) a ação efetiva simplifica bastante. Isso ocorre devido ao reescalonamento do hopping, discutido no início dessa seção. Nesse caso, como é bem explicado na Ref. [2], só os termos com $n = 1$ não se anulam na equação (3.12), de maneira que

$$S_{ef} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{o\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{o\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{o\uparrow}(\tau) n_{o\downarrow}(\tau), \quad (3.13)$$

com

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \sum_{ij} t_{io} t_{oj} G_{ij}^{(o)}(i\omega_n) \quad (3.14)$$

no espaço de frequências. $G_{ij}^{(o)}(i\omega_n)$ é a função de Green para propagação entre os sítios i e j , numa rede em que o sítio o tenha sido removido.

Fisicamente $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ representa uma amplitude efetiva para um f rmion ser criado no s tio o no tempo τ , vindo do banho, e ser destru do no tempo τ' , voltando ao banho. Dessa maneira incorporamos a informa  o dos outros s tios da rede.

A fun  o de Green da rede com o s tio o removido que aparece na equa  o (3.14) pode ser relacionada com as fun  es de Green da rede completa atrav s da seguinte rela  o [2],

$$G_{ij}^{(o)}(i\omega_n) = G_{ij}(i\omega_n) - \frac{G_{io}(i\omega_n)G_{oj}(i\omega_n)}{G_{oo}(i\omega_n)}. \quad (3.15)$$

Para tentarmos escrever $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)$, dado pela express o (3.14), apenas em termos da fun  o de Green local, vamos introduzir a fun  o de Green no espa o dos momentos, que   dada por

$$G(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon(\vec{k}) - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n)}, \quad (3.16)$$

onde $\Sigma(\vec{k}, i\omega_n)$   a auto-energia e $\varepsilon(\vec{k}) = \sum_j t_{ij} e^{\vec{k} \cdot \vec{R}_{ij}}$   a rela  o de dispers o do problema n o-interagente. Metzner e Vollhardt [22] mostraram que no limte $d \rightarrow \infty$ a auto-energia   local, ou seja, $\Sigma(\vec{k}, i\omega_n) = \Sigma(i\omega_n)$.

Substituindo (3.15) na equa  o (3.14), ficamos com

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \sum_{ij} t_{io} t_{oj} \left[G_{ij}(i\omega_n) - \frac{G_{io}(i\omega_n)G_{oj}(i\omega_n)}{G_{oo}(i\omega_n)} \right]. \quad (3.17)$$

  conveniente transformarmos para o espa o $\vec{k}$:

$$G_{ij}(i\omega_n) = \sum_{\vec{k}} e^{\vec{k} \cdot \vec{R}_{ij}} G(\vec{k}, i\omega_n). \quad (3.18)$$

Substituindo a equa  o (3.18) na equa  o (3.17), temos

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \sum_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k})^2 G(\vec{k}, i\omega_n) + \left(\sum_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) G(\vec{k}, i\omega_n) \right)^2 / \sum_{\vec{k}} G(\vec{k}, i\omega_n). \quad (3.19)$$

As somas sobre $\vec{k}$ na equa  o (3.19) podem ser obtidas atrav s de integra  es sobre a energia se introduzirmos a densidade de estados n o-interagente $D(\varepsilon) = \sum_{\vec{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon(\vec{k}))$.

Fazendo isso e definindo a vari vel $\zeta = i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n)$, podemos escrever

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)\varepsilon^2}{\zeta - \varepsilon} + \left(\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)\varepsilon}{\zeta - \varepsilon} \right)^2 / \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\zeta - \varepsilon}. \quad (3.20)$$

Podemos utilizar as relações

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)\varepsilon}{\zeta - \varepsilon} = -1 + \zeta \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\zeta - \varepsilon} \quad \text{e} \quad (3.21)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)\varepsilon^2}{\zeta - \varepsilon} = \zeta \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)\varepsilon}{\zeta - \varepsilon}, \quad (3.22)$$

para obter que

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \zeta + \left(\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\zeta - \varepsilon} \right)^{-1}. \quad (3.23)$$

$\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\zeta - \varepsilon}$ é a função de Green local $G_{oo}(i\omega_n) = G(i\omega_n)$.

Finalmente, podemos escrever $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)$ em termos da função de Green local do Hamiltoniano original:

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu + G(i\omega_n)^{-1} - R[G(i\omega_n)], \quad (3.24)$$

onde $R(G)$ é a função recíproca da transformada de Hilbert da densidade de estados $D(\epsilon)$, correspondente ao problema não-interagente ($U = 0$). A transformada de Hilbert $\tilde{D}(\zeta)$ e sua função recíproca R são definidas por

$$\tilde{D}(\zeta) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \frac{D(\epsilon)}{\zeta - \epsilon}, \quad R[\tilde{D}(\zeta)] = \zeta. \quad (3.25)$$

Podemos ver que temos um conjunto de equações autoconsistentes, já que a ação efetiva dada por (3.13) depende da função de Green local, que pode ser calculada de maneira direta a partir da ação efetiva,

$$G(\tau - \tau') = -\langle T_\tau c_\sigma(\tau) c_\sigma^\dagger(\tau') \rangle_{S_{ef}}. \quad (3.26)$$

Para que possamos ganhar com a nossa intuição é interessante que haja um Hamiltoniano efetivo, ao invés de uma ação efetiva, que descreva a dinâmica do sítio. No entanto, um Hamiltoniano que contenha apenas os graus de liberdade do sítio é impossível, visto que a ação efetiva permite que o sítio troque elétrons com o resto da rede. Portanto precisamos introduzir graus de liberdade auxiliares.

Um Hamiltoniano que serve para essa descrição é do modelo de uma impureza de Anderson:

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} [V_k c_{o\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V_k^* c_{k\sigma}^\dagger c_{o\sigma}] - \mu \sum_{\sigma} c_{o\sigma}^\dagger c_{o\sigma} + U n_{o\uparrow} n_{o\downarrow}. \quad (3.27)$$

A ação que descreve a dinâmica da impureza o nesse caso é

$$S_{ef} = \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\sigma} c_{o\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{o\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{o\uparrow}(\tau) n_{o\downarrow}(\tau), \quad (3.28)$$

onde

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\Delta(\omega)}{i\omega_n - \omega}, \quad \Delta(\omega) = \sum_{k,\sigma} V_k^2 \delta(\omega - \varepsilon_k). \quad (3.29)$$

Podemos então ver (3.27) como uma representação Hamiltoniana da ação efetiva desde que escolhamos os parâmetros V_k e ε_k de modo a reproduzir $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)$ em (3.24). É importante ter em mente que $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)$ não é conhecida a priori, mas é na verdade a solução procurada do problema.

Então, o que fizemos foi mapear o modelo de Hubbard em uma rede num modelo de uma impureza de Anderson embebida num meio autoconsistente. Esse mapeamento é muito útil pois o modelo de Anderson foi muito bem estudado nos últimos 40 anos e esse conhecimento pode agora ser utilizado para o estudo de vários modelos de sistemas fortemente correlacionados (já que a TDCM pode ser aplicada a outros modelos).

Em geral as equações autoconsistentes são resolvidas por iteração. Começamos com um chute inicial para $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$, definindo o problema de uma impureza dado pela equação (3.13). Resolvendo o problema de uma impureza através de algum método, obtemos a função de Green local $G(i\omega_n)$. Podemos então obter a auto-energia local através da equação

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = \Sigma(i\omega_n) + G^{-1}(i\omega_n). \quad (3.30)$$

Com $\Sigma(i\omega_n)$, através de

$$G(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \varepsilon}, \quad (3.31)$$

podemos calcular a nova função de Green. Com os novos $G(i\omega_n)$ e $\Sigma(i\omega_n)$ obtemos um novo $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$, que determina um novo problema de uma impureza a ser resolvido. O processo se repete até que uma solução convergida é obtida.

Podemos ver uma semelhança muito grande entre a TDCM e a teoria de campo médio clássica de sistemas magnéticos. Em ambas, um problema complicado em uma rede é transformado em um problema mais simples em que um dado sítio interage com um banho, mais uma condição de autoconsistência que determina esse banho. Outro fato importante é que ambas são exatas no limite $d \rightarrow \infty$, mas que não deixam de ser boas aproximações para sistemas físicos reais.

3.1.2 TDCM e Transição Metal-Isolante de Mott

Nos últimos anos surgiu uma descrição bastante completa da transição metal-isolante de Mott devido à TDCM. Ela unificou os pontos de vista de Hubbard e Brinkman-Rice, discutidos no Capítulo 1, dando uma descrição bem mais rica à transição.

Nas figuras 3.2 e 3.3 abaixo estão alguns resultados interessantes obtidos com a TDCM, para uma rede com densidade de estados semi-circular e semi-preenchida. Na 3.2 temos a densidade de estados local para alguns valores de U . Esses resultados foram obtidos utilizando a teoria de perturbação iterada como método de solução do problema de uma impureza [2]. Para U pequeno a densidade de estados local é muito parecida com a do caso não-interagente. Com o aumento de U surgem as bandas de Hubbard e o pico de quasi-partícula de Brinkman-Rice. Para U maior ainda o pico de quasi-partícula some e surge um gap na densidade de estados local: o sistema deixa de ser um metal e se torna um isolante.

Na figura 3.3 está um diagrama de fases do modelo [2]. A região limitada pelas linhas pontilhadas é a chamada região de coexistência, pois dentro dela as soluções metálica e isolante coexistem. Pode-se obter a linha da transição de primeira ordem calculando-se

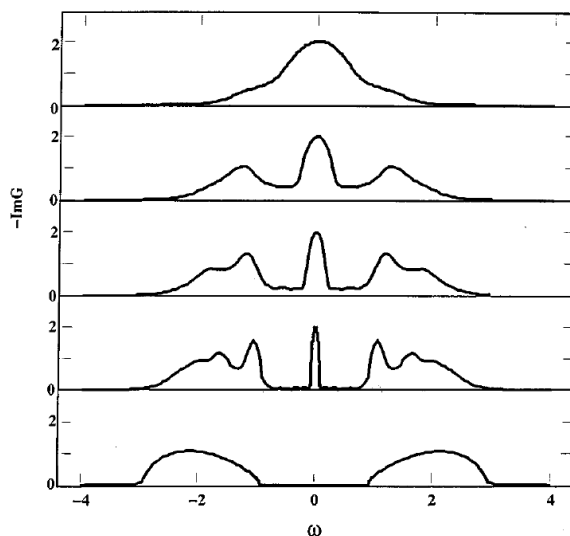


Figura 3.2: Densidade de estados local a $T=0$, para alguns valores de U , obtidas pela teoria de perturbação iterada. As primeiras quatro curvas (de cima para baixo $U/D=1,2,2.5,3$) correspondem a um metal cada vez mais correlacionado, enquanto a curva de baixo ($U/D=4$) corresponde a um isolante. D é a largura da banda. Resultado reproduzido da ref. [2].

a energia livre das duas soluções e determinando qual a menor. Essa linha termina num ponto de transição de segunda ordem. Acima desse ponto temos uma região de “crossover” e podemos passar de maneira contínua de um metal a um isolante.

É importante frisar que um isolante só pode ser distinguido de um metal rigorosamente em $T=0$, o primeiro tendo condutividade nula e o último condutividade finita. Em temperaturas um pouco maiores, ainda podemos continuar diferenciando um metal de um isolante Mott porque temos uma transição de primeira ordem, uma mudança brusca na condutividade quando aumentamos o valor de U , e associamos uma lado a um metal e o outro a um isolante. Acima do ponto crítico de segunda ordem essa condutividade muda de maneira contínua com U . Se olharmos para a curva de condutividade temos duas regiões distintas e podemos dizer que uma está associada a um mal isolante e outra a um

mal metal.

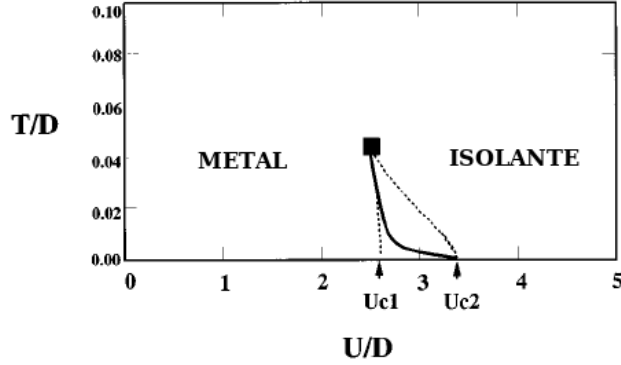


Figura 3.3: Diagrama de fases do modelo de Hubbard completamente frustrado no semi-preenchimento, obtido utilizando TDCM. Dentro da região delimitada pelas linhas pontilhadas soluções metálica e isolante coexistem. A linha preta é a linha da transição de primeira ordem que termina num ponto de preto que indica uma transição de segunda ordem. Resultado reproduzido da ref. [2].

Na figura 3.4 temos o diagrama de fase para o óxido de vanádio V_2O_3 dopado com cromo Cr [25], um sistema muitas vezes descrito pelo modelo de Hubbard. A introdução do cromo altera os parâmetros da rede cristalina, e conseqüentemente a importância relativa dos termos de hopping e de interação local U , de tal modo que é equivalente à aplicação de pressão no sistema.

Podemos ver que esse diagrama tem algumas das características do diagrama da figura 3.3, como uma região de coexistência e um ponto crítico de segunda ordem, além de um formato bem parecido. A fase ordenada magneticamente depende de detalhes mais específicos do material, cuja reprodução geralmente requer uma descrição mais detalhada que vai além do modelo de Hubbard considerado.

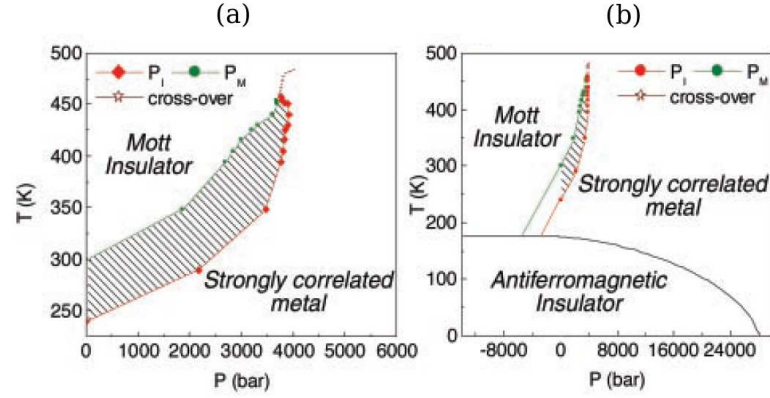


Figura 3.4: Diagrama de fases para o óxido de vanádio V_2O_3 dopado com cromo Cr. Resultado reproduzido da ref. [25]

3.2 Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio

Vamos considerar o modelo de Hubbard desordenado:

$$H = \sum_{ij,\sigma} (-t_{ij} + \varepsilon_i \delta_{ij}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}, \quad (3.32)$$

onde estamos assumindo que a energia atômica de cada sítio ε_i é dada por uma distribuição de probabilidade $P(\varepsilon_i)$, que geralmente é considerada como sendo uniforme no intervalo $[-W/2, +W/2]$ ou uma gaussiana centrada em zero com dispersão W .

Consideremos uma dada realização de desordem, definida por um conjunto de energias aleatórias dos sítios. Seguindo a abordagem utilizada na TDCM no caso limpo, vamos nos concentrar num dado sítio da rede, o sítio i , e integrar todos os outros para obtermos uma ação efetiva para o sítio i . Isso gera acoplamentos de todas as ordens entre os elétrons do sítio, como em (3.12). Dentro do espírito da seção anterior reteremos, além da repulsão local de Hubbard, apenas as contribuições quadráticas dos campos fêrmionicos. Dessa maneira, a ação efetiva local assume a forma

$$S_{ef}(i) = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{i\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{i-1}(\tau - \tau') c_{i\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau), \quad (3.33)$$

com

$$\mathcal{G}_0^{i-1}(i\omega_n) = i\omega_n - \varepsilon_i + \mu - \Delta_i(i\omega_n). \quad (3.34)$$

$\Delta_i(i\omega_n)$ é chamada função de hibridização e é dada por

$$\Delta_i(i\omega_n) = \sum_{jk} t_{ji} t_{ik} G_{jk}^{(i)}(i\omega_n) \quad (3.35)$$

A construção acima é exata em dois casos: no limite de dimensão infinita, discutido na primeira seção, e para elétrons não-interagentes em qualquer dimensão. No primeiro caso, a soma na definição de $\Delta_i(i\omega_n)$ é feita sobre um número infinito de termos, os vizinhos do sítio i , o que faz com que a função de hibridização seja substituída pelo seu valor médio. Isso significa que todos os sítios veem o mesmo banho. Como consequência, as flutuações espaciais da função de hibridização, que representam as diferentes vizinhanças vistas por cada sítio, são suprimidas e não capturamos efeitos de localização de Anderson. No caso de elétrons não-interagentes ($U=0$) isso se reduz à Aproximação do Potencial Coerente (CPA). É dessa forma que a TDCM trata a desordem [26, 27]. É importante salientar que agora não temos apenas um, mas vários problemas de uma impureza a serem resolvidos. Na figura 3.5 temos o diagrama de fase do modelo de Hubbard desordenado para vários valores de desordem obtidos com TDCM [26].

Para que possamos incluir efeitos de localização de Anderson dentro da abordagem acima temos de estudar redes com número de coordenação finito. É isso que é feito na TEDCM [28, 29, 30, 31], e que analisaremos a partir de agora. Olhando para as equações (3.15) e (3.35) podemos ver a função de hibridização, que define a ação efetiva, como funcional das funções de Green locais e não-locais. Para podermos obter uma relação de autoconsistência na TEDCM precisamos relacionar essas funções de Green com a ação efetiva. Para fazer isso vamos lembrar que a ação (3.33) é idêntica àquela do modelo de uma impureza de Anderson num banho fermiônico. A solução desse modelo define uma auto-energia dada por

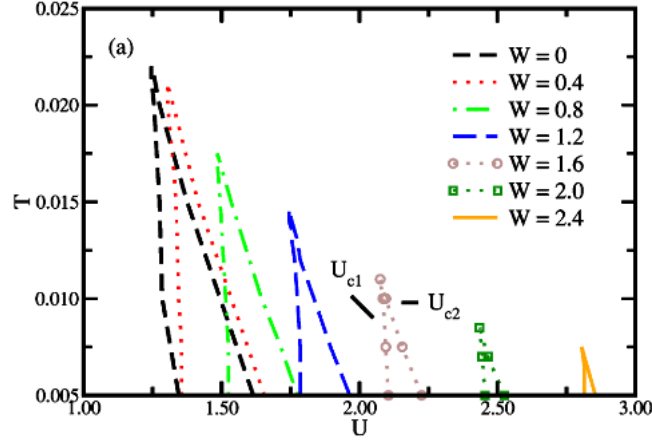


Figura 3.5: Diagrama de fases do modelo de Hubbard desordenado para vários valores de W , obtido com a TDCM. Resultado reproduzido da ref. [26].

$$\Sigma_i(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \varepsilon_i - \Delta_i(i\omega_n) - (G_{ii}(i\omega_n))^{-1}, \quad (3.36)$$

com

$$G_{ii}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{i\sigma}^\dagger(\tau') \rangle_{S_{ef}}. \quad (3.37)$$

Sejam G_{ij}^0 as funções de Green da rede para a mesma realização de desordem, mas no caso em que não há interação ($U = 0$). As funções de Green G_{ij} , do problema com interação, são definidas dentro da TEDCM por

$$G_{ij} = G_{ij}^0[\varepsilon_i \rightarrow \varepsilon_i + \Sigma_i], \quad (3.38)$$

fechando o laço de autoconsistência da teoria.

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

$$\hat{G} = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \hat{H}_0[\varepsilon_i \rightarrow \varepsilon_i + \Sigma_i]}, \quad (3.39)$$

onde

$$\hat{H}_0[\varepsilon_i] = \sum_{ij,\sigma} (-t_{ij} + \varepsilon_i \delta_{ij}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}. \quad (3.40)$$

Esse resolvente pode ser calculado facilmente por inversão matricial.

É importante enfatizar que a substituição na equação (3.39) não é exata, e constitui a segunda aproximação da teoria. Na formulação exata as auto-energias são não-locais no espaço. Podemos então descrever a TEDCM como uma aproximação na qual as auto-energias têm um caráter estritamente local.

Podemos escrever um algoritmo de solução da seguinte maneira:

1. Dada uma realização de desordem, começamos com um palpite para as funções de hibridização $\Delta_i^1(i\omega_n)$.
2. Para cada sítio resolvemos o problema definido por (3.33), isto é, achamos a função de Green local (3.37) utilizando algum método aproximativo e através de (3.36) encontramos as auto-energias.
3. Utilizando as autoenergias calculamos as funções de Green da rede através de (3.39).
4. Com as novas funções de Green atualizamos as funções de hibridização $\Delta_i^2(i\omega_n)$, através de (3.36).
5. Voltamos ao item 2 e comparamos as funções de hibridização, parando o processo quando atingida a convergência necessária.

Na figura 3.6 estão ilustradas as funções de hibridização para dois sítios quaisquer de uma dada realização de desordem e o seu valor médio [31]. Como podemos ver, a função de hibridização média contém bem menos informação que a função de hibridização de cada sítio, o que traz uma enorme vantagem à TEDCM quando comparada à TDCM.

3.3 Problema de uma impureza

Na prática, as duas teorias discutidas acima são resolvidas de maneira iterativa, de maneira que temos de resolver um número muito grande de problemas de uma impureza

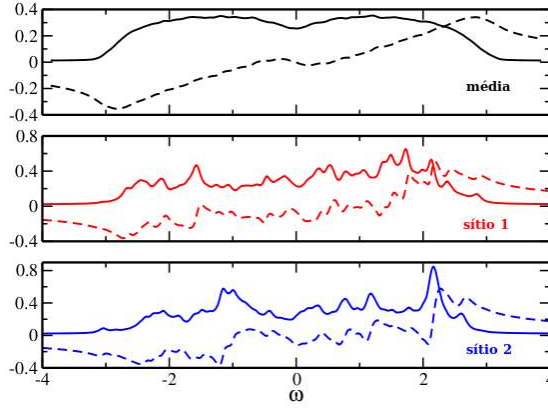


Figura 3.6: Parte real (linhas pontilhadas) e parte imaginária (linhas cheias) da função de hibridização $\Delta_i(\omega)$ de dois sítios quaisquer e do seu valor médio. Resultado reproduzido da ref. [30].

de Anderson. A resolução desses problemas é a parte mais custosa dos cálculos e, portanto, precisamos de métodos práticos para solucionar o problema de uma impureza que, apesar de ser bem mais simples que o problema original, continua a ser um problema de muitos corpos. Como esse modelo foi bastante estudado nos últimos anos, existem uma grande quantidade de métodos. Nesta seção vamos dar uma idéia geral do Monte Carlo Quântico, algoritmo Hirsch-Fye [32], que utilizamos no nosso trabalho como método de solução. No apêndice A estão alguns detalhes a mais.

Basicamente, queremos obter a função de Green local a temperatura finita, equação (3.37), dada a ação efetiva ou o Hamiltoniano efetivo. Vamos utilizar a abordagem hamiltoniana.

Consideremos um operador A . O seu valor esperado a temperatura finita é dado por

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} A e^{-\beta H}}{Z}. \quad (3.41)$$

Aqui H é o Hamiltoniano do modelo de Anderson (3.27) e $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$ é a função de

partição. O primeiro passo consiste em separarmos o Hamiltoniano em duas partes, uma que contém apenas termos de um corpo (H^0) e outra que contém a interação (H^i) e é dada por

$$H^i = U[n_{0\uparrow}n_{0\downarrow} - \frac{1}{2}(n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow})]. \quad (3.42)$$

O próximo passo é dividirmos o intervalo $[0, \beta]$ em L intervalos de tamanho $\Delta\tau$ e fazer

$$e^{-\beta H} = \left[e^{-\Delta\tau(H^0 + H^i)} \right]^L \simeq \left[e^{-\Delta\tau H^0} e^{-\Delta\tau H^i} \right]^L, \quad (3.43)$$

onde utilizamos a decomposição de Suzuki-Trotter e introduzimos erros da ordem de $(\Delta\tau)^2 U$.

Podemos desacoplar os termos quárticos utilizando uma transformação de Hubbard-Stratonovich,

$$e^{-\Delta\tau U[n_{0\uparrow}n_{0\downarrow} - \frac{1}{2}(n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow})]} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\lambda s(n_{0\uparrow} - n_{0\downarrow})}, \quad (3.44)$$

onde $\cosh\lambda = e^{-\Delta\tau U/2}$ e o campo discreto s é uma variável tipo Ising. Introduzindo uma transformação desse tipo em cada intervalo de tempo ($\tau_l = l\Delta\tau$) torna-se possível tomar o traço sobre os graus de liberdade fermiônicos já que os termos quárticos deram lugar a termos quadráticos. Temos então que

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} \det \mathcal{O}_{\uparrow}(\{s\}) \det \mathcal{O}_{\downarrow}(\{s\}) \\ &= \sum_{\{s\}} \rho(\{s\}) \end{aligned} \quad (3.45)$$

com a matriz $\mathcal{O}_{\sigma}(\{s\})$ definida em (A.16) e $\rho(\{s\}) = \det \mathcal{O}_{\uparrow}(\{s\}) \det \mathcal{O}_{\downarrow}(\{s\})$. Podemos fazer o mesmo e obter a função de Green:

$$\begin{aligned} G_{\sigma}(\tau_{l_1}, \tau_{l_2}) &= \frac{1}{2^L} \frac{1}{Z} \sum_{\{s\}} \det \mathcal{O}_{\uparrow}(\{s\}) \det \mathcal{O}_{\downarrow}(\{s\}) G_{\sigma}^{\{s\}}(\tau_{l_1}, \tau_{l_2}) \\ &= \frac{\sum_{\{s\}} \rho(\{s\}) G_{\sigma}^{\{s\}}(\tau_{l_1}, \tau_{l_2})}{\sum_{\{s\}} \rho(\{s\})} \end{aligned} \quad (3.46)$$

onde $G_{\sigma}^{\{s\}}(\tau_{l_1}, \tau_{l_2})$ é dada pela equação (A.15). Em (3.46) temos de somar sobre 2^L configurações e em cada termo a inversão de uma matriz $L \times L$ está envolvida. Em geral temos então de utilizar o método Monte Carlo para calcular a função de Green. Primeiro,

uma configuração aleatória de spins é gerada, depois um processo aleatório é construído tentando flipar spins sucessivamente. Para gerarmos um processo Markoviano para o procedimento de flips de spin precisamos determinar uma probabilidade de transição, com o requerimento de satisfazer o balanço detalhado. Duas formas muito utilizadas para essa probabilidade de transição P são :

$$P(s \rightarrow s') = \frac{\rho'}{\rho + \rho'} \quad (\text{Banho térmico}), \quad (3.47)$$

$$P(s \rightarrow s') = \begin{cases} 1 & \text{se } \rho' > \rho \\ \frac{\rho'}{\rho} & \text{de outro modo} \end{cases} \quad (\text{Metropolis}). \quad (3.48)$$

A implementação do algoritmo requer que calculemos os determinantes que aparecem em ρ , assim como a inversão das matrizes que aparecem no cálculo da função de Green. Hirsch e Fye descobriram uma maneira de facilitar esse procedimento. Primeiramente encontraram uma equação de Dyson relacionando configurações de spin diferentes, dada por

$$G' = \mathcal{A}^{-1}G, \quad (3.49)$$

com

$$\mathcal{A} = 1 + (1 - G)(e^{\nu' - \nu} - 1), \quad (3.50)$$

que é chamada de atualização limpa. Na equação (3.50) $G = G_{\sigma}^{\{s\}}$ e e^{ν} é uma matriz diagonal cujos elementos são $e^{\lambda \sigma s}$. Quando as configurações diferem por apenas um spin a expressão (3.49) se simplifica, e ficamos com a chamada atualização suja

$$G'_{l_1 l_2} = G_{l_1 l_2} + (G - 1)_{l_1 l} (e^{\nu' - \nu} - 1)_{ll} (A_{ll})^{-1} G_{ll_2}. \quad (3.51)$$

Nesse caso também podemos calcular a razão entre os determinantes de maneira simplificada, dada por

$$\frac{\rho'}{\rho} = 1 + (1 - G_{ll}) (e^{\lambda \sigma (s_{l'} - s_l)} - 1). \quad (3.52)$$

Os nomes atualização limpa e suja se devem ao fato de que a última introduz erros de arredondamento que se amplificam depois de muitas iterações, de maneira que devemos intercalá-la com a limpa que é computacionalmente mais cara.

Capítulo 4

Resultados

Nesse capítulo discutiremos os resultados que obtivemos aplicando a Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio, discutida no capítulo anterior, ao modelo de Hubbard desordenado, utilizando o Monte Carlo Quântico (algoritmo Hirsch-Fye) como método de solução do problema de um impureza. Na primeira seção falaremos da rede que utilizamos para o nosso estudo e determinaremos a unidade de energia utilizada nos resultados, na segunda falaremos de alguns dos testes que fizemos para estudar a convergência do método e por último discutiremos os resultados.

4.1 Modelo

No nosso trabalho focamos nossa atenção na fase paramagnética do modelo de Hubbard desordenado numa rede quadrada, com hopping entre primeiros e segundos vizinhos e com as energias dos orbitais, ε_i , dadas por uma distribuição uniforme no intervalo $[-W/2, +W/2]$. Escolhemos o hopping entre primeiros vizinhos (t_1) real e o hopping entre segundos vizinhos (t_2) imaginário, e utilizamos $t_2 = i0.5t_1$. Introduzimos “hopping” entre segundos vizinhos para eliminar a singularidade de Van Hove que aparece no nível de Fermi quando $W=0$. D , a semi-largura de banda quando $U=0$ e $W=0$ (na

figura 4.1 temos a densidade de estados para esse caso), é a unidade de energia utilizada na apresentação dos resultados. Para os sistemas em que o modelo estudado se aplica $D \sim 0.5eV - 1eV \sim 10^4 K$.

Todos os resultados que serão apresentados foram feitos para uma rede quadrada 20×20 , com condições periódicas de contorno, no semi-preenchimento, $\mu = U/2$.

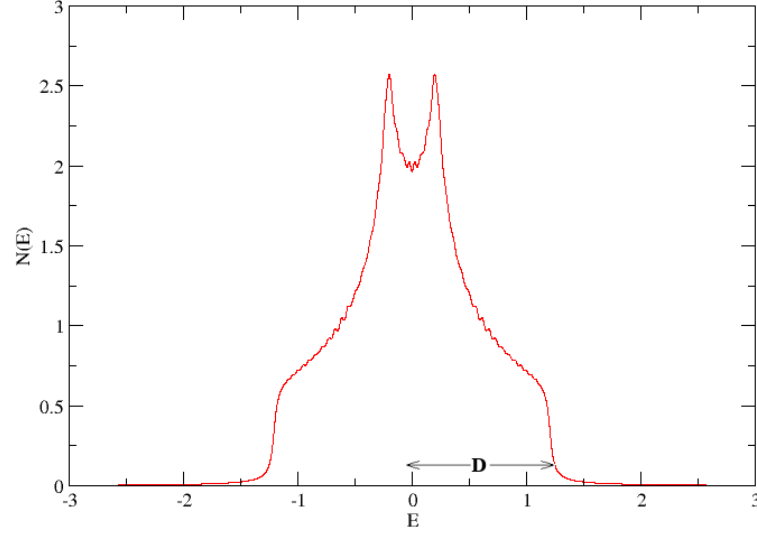


Figura 4.1: Densidade de estados para o Hamiltoniano estudado quando $U=0$, $W=0$ e $t_1 = 0.25$. D é a semi-largura da banda, a unidade de energia que utilizamos.

4.2 Método

Nesta seção discutiremos alguns dos estudos que fizemos para entender melhor o processo de convergência das soluções e a dependência com parâmetros do método Monte Carlo.

Apresentaremos daqui para frente alguns gráficos como o mostrado na figura 4.2. Esses gráficos mostram a distribuição espacial da parte imaginária da função de Green na primeira frequência de Matsubara ($\text{Im } G_i(i\omega_1)$) para uma realização de desordem. Por realização de desordem queremos dizer uma escolha aleatória das energias dos sítios da

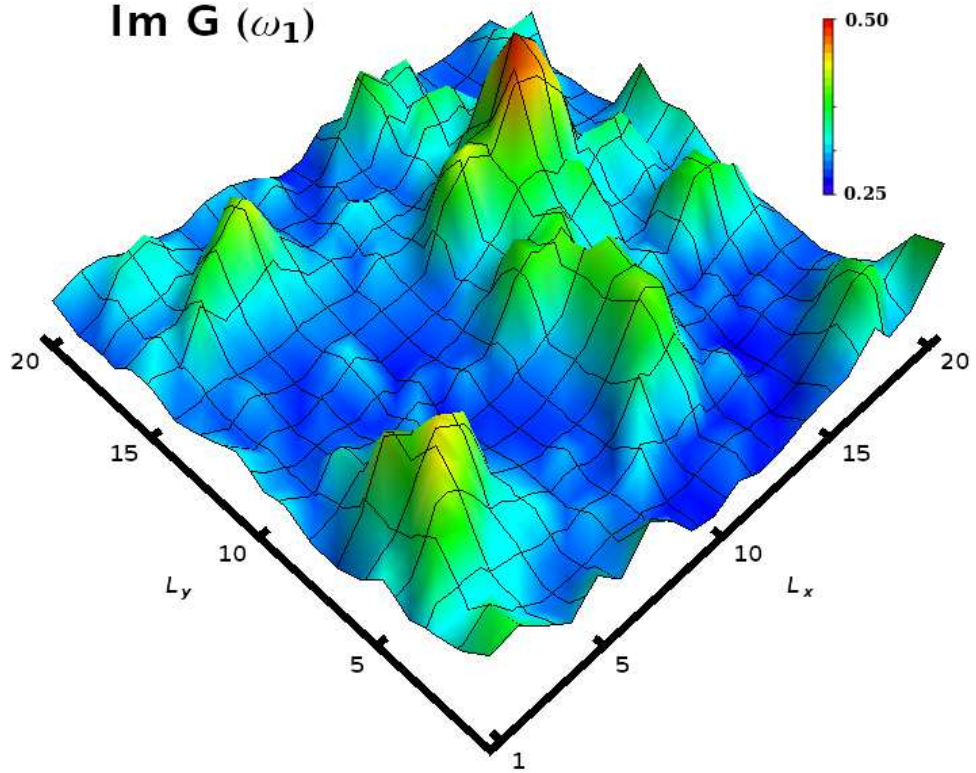


Figura 4.2: $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede para $W=0.6$, $U=2.18$ e $T=0.025$

rede. Com esses gráficos podemos ver as flutuações espaciais que a TEDCM capta. Além disso, é fácil ver que a teoria incorpora correlações entre os sítios: o valor de $\text{Im } G(i\omega_1)$ de um dado sítio correlaciona-se com o valor da mesma quantidade para o sítio vizinho.

Na figura 4.3 temos a evolução de $\text{Im } G(i\omega_1)$ para alguns sítios da rede com o número de passos de iteração. Em geral, começamos com uma função de hibridização inicial igual para todos os sítios, que descreve um banho isolante ou um banho condutor. Cada uma das curvas na figura 4.3 está associada a um problema de uma impureza de Anderson no banho gerado pelos outros sítios. Para uma rede quadrada $L \times L$ temos L^2 curvas deste tipo. Acompanhamos essa evolução apenas na primeira frequência de Matsubara porque é nela que a função de Green (ou hibridização) demora mais para se estabilizar. Na TDCM sem desordem temos que acompanhar a evolução de apenas uma

curva desse tipo devido à invariância translacional. A convergência é obtida quando as flutuações entre duas iterações consecutivas são menores que as flutuações estatísticas do Monte Carlo.

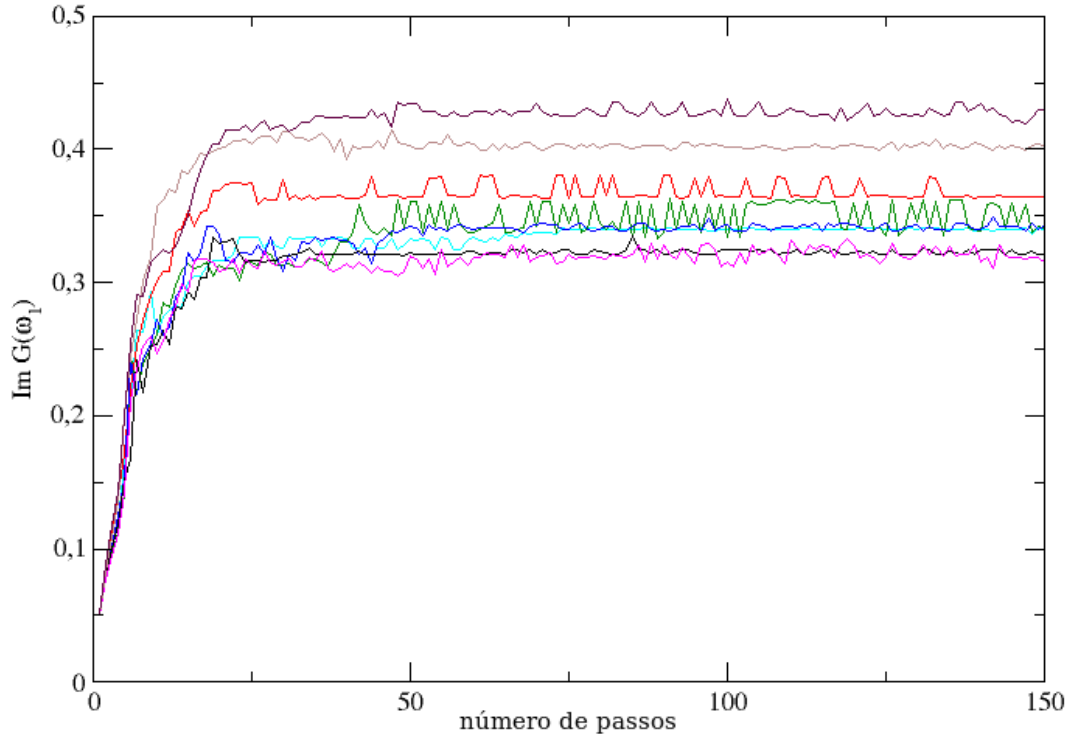


Figura 4.3: Evolução de $\text{Im } G(i\omega_1)$ para alguns sítios da rede 20×20 com o número de passos de iteração, para $W=0.6$, $U=2.22$ e $T=0.025$

Na figura 4.4 fizemos gráficos com a evolução de $\text{Im } G(i\omega_1)$ com o número de passos de iteração como função de sua posição espacial. Esses gráficos auxiliam no processo de checagem de convergência das soluções. Podemos perceber que algumas regiões se definem bem cedo no processo iterativo.

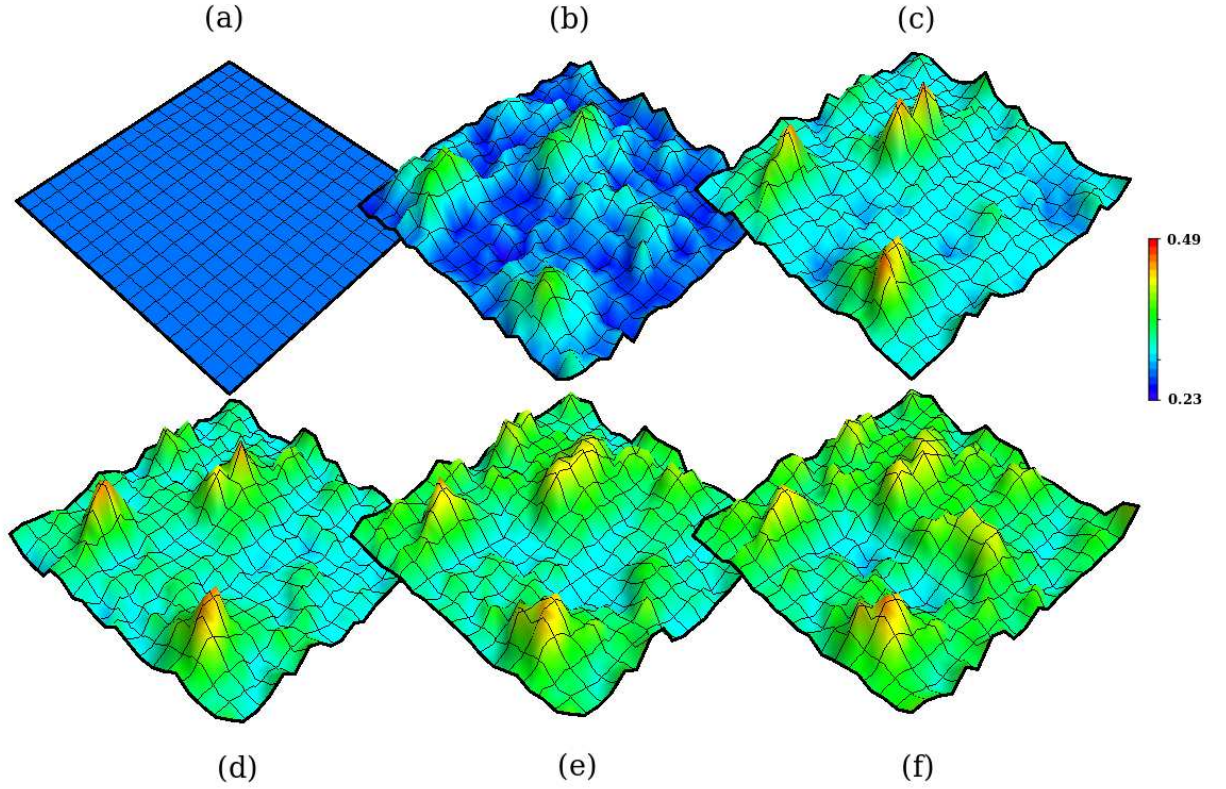


Figura 4.4: Evolução de $\text{Im } G(i\omega_1)$ para toda a rede 20×20 com o número de passos: (a) 0, (b) 10, (c) 20, (d) 25, (e) 35 e (f) 130 passos. Os parâmetros utilizados foram $W=0.6$, $U=2.22$ e $T=0.025$.

Para uma mesma realização de desordem, com valores iguais de W, U e T , fizemos alguns cálculos com diferentes “chutes” iniciais. Na figura 4.5 temos um desses resultados para $W=0.6$, $U=2.22$ e $T=0.035$. Na figura 4.5 (a) começamos com um “chute” inicial em que todas as funções de hibridização descrevem um banho isolante e em 4.5 (b) um banho metálico. O que observamos foi que a dependência com esse “chute” inicial é bastante

pequena.

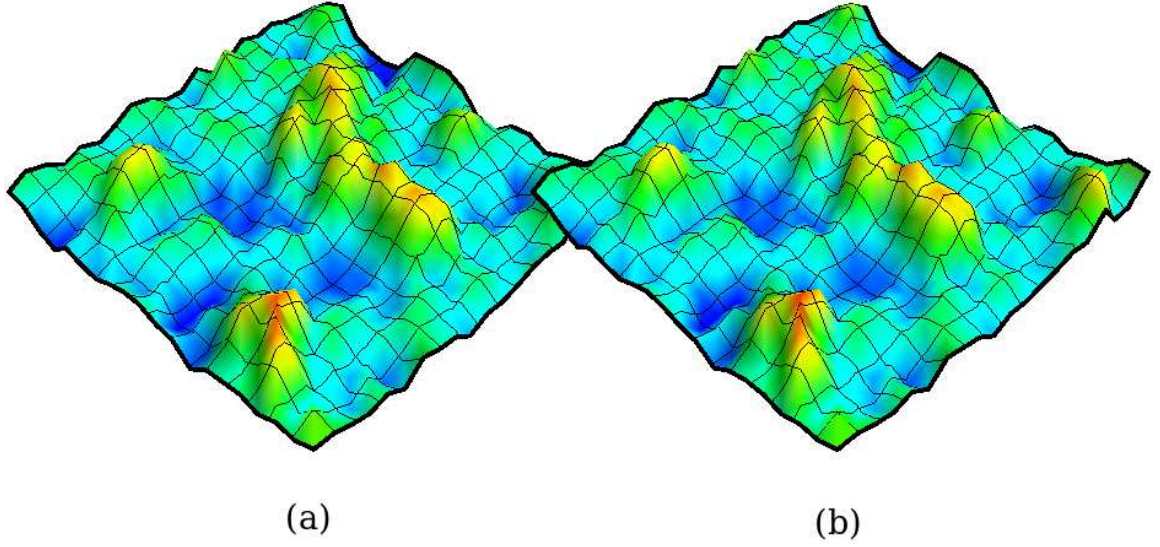


Figura 4.5: Nessa figura comparamos a distribuição espacial de $\text{Im } G(i\omega_1)$ para dois “chutes” iniciais diferentes para as funções de hibridização: em (a) todas são características de um banho isolante e em (b) de um banho metálico. Os parâmetros utilizados foram $W=0.6$, $U=2.22$ e $T=0.031$

Na figura 4.6 fizemos uma comparação entre o valor médio da parte imaginária da função de Green para diferentes números de varreduras que utilizamos no Monte Carlo, que denominaremos n -varreduras, para $W=0.6$, $U=2.2$ e $T=0.025$. Essas varreduras dão o número de vezes que tentamos mudar todos os spins de Ising que o nosso método de solução utiliza, discutido no capítulo anterior e no apêndice A. O que observamos foi que para valores de n -varreduras igual ou maiores que 60000 as soluções não variam muito. Podemos ver claramente na figura a diferença entre a curva obtida com n -varreduras=20000 e as outras, que são praticamente idênticas. O valor de n -varreduras=60000 está de acordo com o utilizado no trabalho [33], que aplica o Monte Carlo Quântico, algoritmo Hirsch-Fye, como método de solução dos problemas de uma impureza dentro da TDCM, para estudar valores de U não muito próximos do ponto crítico. No entanto, na TDCM a

diferença encontrada para diferentes valores de n-varreduras não é tão grande quanto a que observamos aqui.

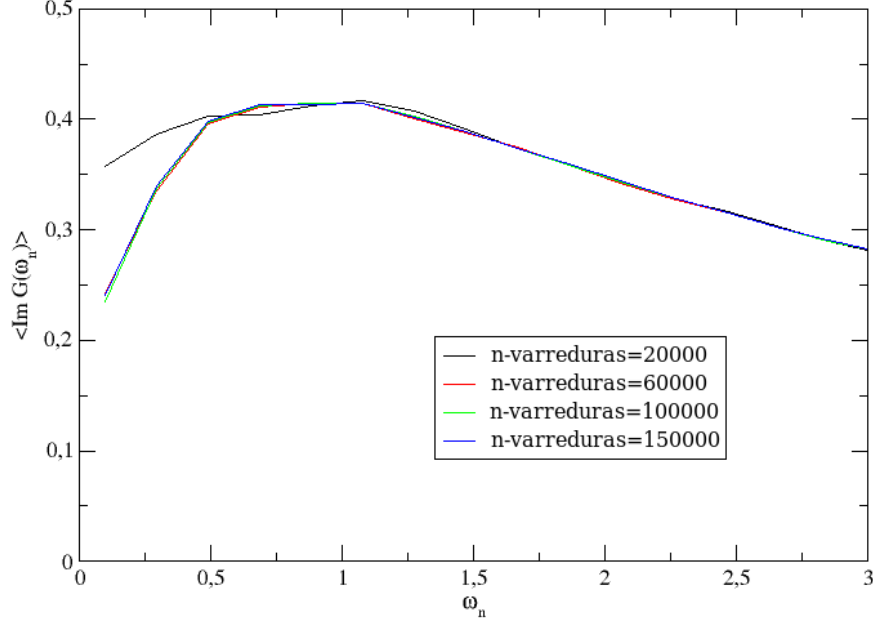


Figura 4.6: Média aritmética de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para uma realização de desordem para $W=0.6$, $U=2.22$ e $T=0.025$ e diferentes valores de número de varreduras de Monte Carlo: 20000, 60000, 100000 e 150000.

Não podemos olhar apenas para valores médios. Precisamos ver se a distribuição espacial não se altera muito quando mudamos o valor de n-varreduras. Na figura 4.7 fizemos uma comparação entre os gráficos com a distribuição espacial de $\text{Im } G(i\omega_1)$ para diferentes valores de n-varreduras, com a realização de desordem correspondente à utilizada na figura 4.6. Não colocamos o gráfico para n-varreduras=20000 porque com a mesma escala de cor não se consegue ver de maneira nítida os contornos dos gráficos para os outros valores de n-varreduras. Podemos ver que não só o valor médio de $\text{Im } G(i\omega_n)$ é bastante parecido, mas também a distribuição espacial dessa função, mostrando que n-varreduras=60000 já nos dão resultados bem confiáveis.

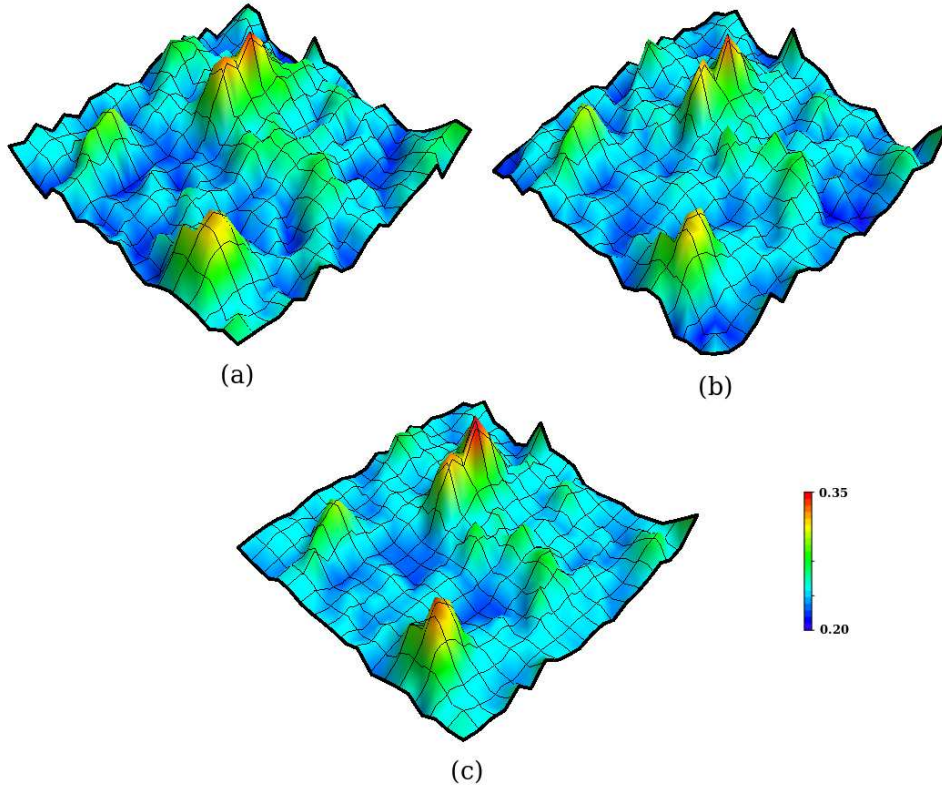


Figura 4.7: Distribuição espacial de $\text{Im } G(i\omega_1)$ para uma realização de desordem para $W=0.6$, $U=2.22$ e $T=0.025$ e diferentes valores de n-varreduras: (a) 60000, (b) 100000 e (c) 150000.

4.3 Resultados

O Monte Carlo Quântico, algoritmo Hirsch-Fye, é um método poderoso para o estudo do problema de uma impureza de Anderson. Quando acoplado à TEDCM podemos estudar tanto a fase metálica quanto a isolante. Além disso, o método nos permite estudar um vasto intervalo de parâmetros: temperatura T , valor de interação local U e potencial químico μ . No entanto, os cálculos são bastante custosos e, como na TEDCM precisamos resolver um número muito grande de problemas de uma impureza, atingir temperaturas muito baixas requer um tempo de computação muito grande. Isso representou um impedimento para estudarmos a região de coexistência, onde estava o nosso interesse inicial.

Em todos os resultados apresentados aqui estamos com temperaturas acima da que determina o ponto crítico de segunda ordem, que marca o fim da região de coexistência. Para o caso em que não temos desordem ($W=0$), o ponto crítico para o modelo que estamos utilizando ocorre aproximadamente em $U_c^0 = 2.13$ e $T_c^0 = 0.025$ [34]. Na figura 4.8 temos um diagrama de fases aproximado para o modelo nesse caso. Como estudamos apenas temperaturas iguais ou maiores que T_c^0 , e é um resultado conhecido que T_c^W diminui com a desordem [26], sabemos que estamos acima do ponto crítico. Mantivemos a desordem pequena para não nos afastarmos muito do ponto crítico, de modo a podermos observar o que ocorre em suas proximidades.

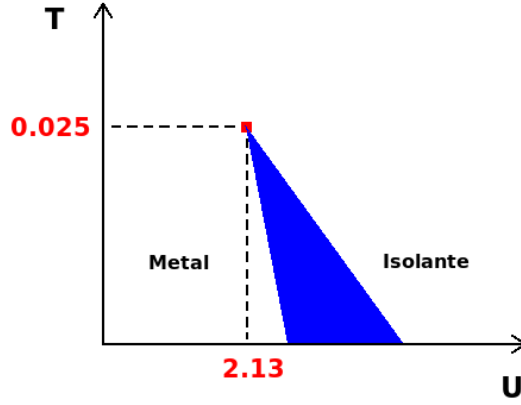


Figura 4.8: Diagrama de fases aproximado para o modelo que estamos estudando, no caso limpo ($W=0$). A região em azul é a chamada região de coexistência, que termina num ponto crítico, em vermelho

Antes de mais nada é conveniente mostrar como distinguimos um isolante de Mott de um metal utilizando o Monte Carlo Quântico, visto que o método se restringe ao tempo imaginário e sozinho não permite que calculemos, por exemplo, a resistividade do sistema. Na figura 4.9 temos a parte imaginária da função de Green para dois casos: (a) um metal típico e (b) um isolante de Mott típico. As duas figuras foram obtidas para $W=0$ e $T < T_c$. No isolante de Mott temos um gap na densidade de estados. Portanto,

quando $i\omega_n \rightarrow 0$, $\text{Im } G(i\omega_n)$ tende a zero. Já para o metal $\text{Im } G(i\omega_n)$ tende a uma constante quando $i\omega_n \rightarrow 0$, que é a densidade de estados em μ . Os círculos determinam as frequências de Matsubara, $\omega_n = (2n + 1)\pi k_B T$.

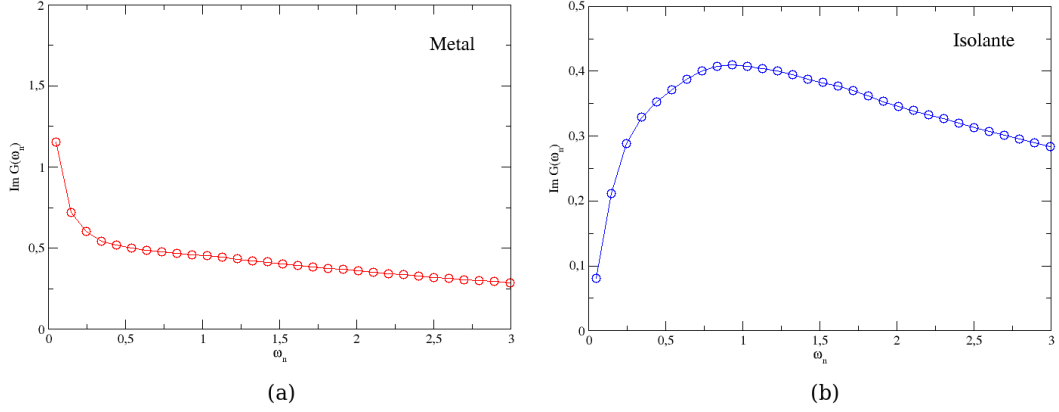


Figura 4.9: Em (a) temos um comportamento de um metal típico e em (b) de um isolante de Mott típico. Em (a) $U=2.11$ e em (b) $U=2.22$, e $T=0.013$ em ambos os casos.

Como dito no capítulo anterior, uma distinção rigorosa entre um metal e um isolante só pode ser feita em $T=0$. O fato é que com temperaturas finitas surge um valor pequeno de densidade de estados, parte imaginária da função de Green, mesmo numa região em que há um gap em $T=0$. Podemos, no entanto, continuar associando o comportamento visto na figura 4.9 (a) com um metal, que para temperaturas acima de T_c é chamado de metal ruim, e um comportamento como o da figura 4.9 (b) com um isolante, que para temperaturas acima de T_c é chamado de isolante ruim [35].

Assim, gráficos como o apresentado na figura 4.2, com a distribuição espacial de $\text{Im } G(i\omega_1)$, nos dão uma “paisagem” das propriedades de condução do sistema. As regiões que tem valores maiores de $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ conduzem melhor que as regiões que tem um valor menor de $\text{Im } G_i(i\omega_1)$.

Nas figuras 4.10 (a), 4.11 (a) e 4.12 (a) temos gráficos mostrando a dependência

especial de $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ para diferentes parâmetros. Temos também em 4.10 (b), 4.11 (b) e 4.12 (b), o valor médio de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para a realização de desordem correspondente e as curvas de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para o sítio em que o valor de $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ é máximo e o sítio em que o valor de $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ é mínimo. Escolhemos essas figuras porque apresentam um comportamento interessante, que será discutido abaixo.

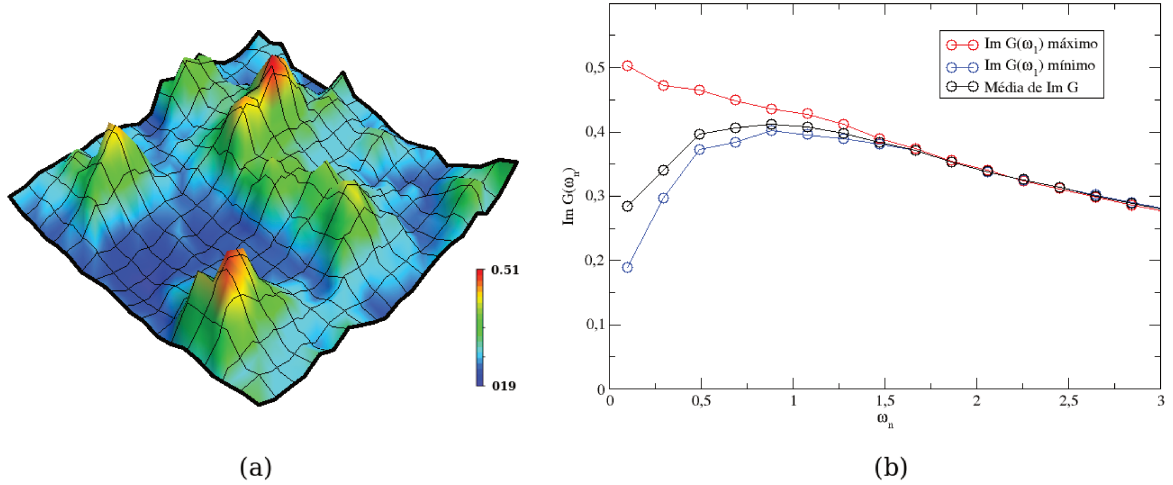


Figura 4.10: Em (a) temos $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede e em (b) temos três curvas: valor médio de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$, $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para o sítio em que $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ é máxima e $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para o sítio em que $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ é mínima. Os parâmetros utilizados foram $W=0.8$, $U=2.27$ e $T=0.025$.

Na figura 4.10 (a) temos três picos bem distintos. Esses picos têm funções de Green com comportamento semelhante ao da curva vermelha que está ilustrada na figura 4.10 (b), que é para o pico maior. Essa curva tem comportamento como a de um metal ruim, indicando a existência de “bolhas” de metal ruim no sistema. Utilizaremos esse termo “bolhas” para designar regiões em que as funções de Green dos sítios tem comportamento parecido. A maioria dos sítios apresentam uma função de Green típica de um isolante ruim, como a curva azul da figura 4.10 (b). Podemos perceber isso clara-

mente olhando para a média na figura 4.10 (b), curva preta. Podemos dizer que esse sistema apresenta uma coexistência de “bolhas” de metal ruim e “bolhas” de isolante ruim. Como a desordem para esse caso é pequena e a temperatura é alta, esperamos que esse comportamento fique mais definido se aumentarmos a desordem e diminuirmos a temperatura.

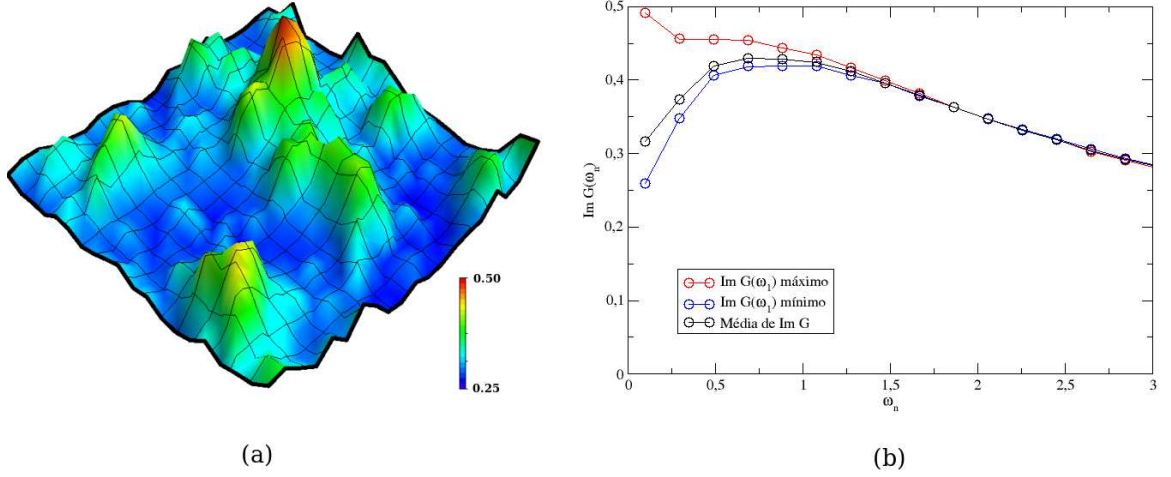


Figura 4.11: Em (a) temos $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede e em (b) temos três curvas: valor médio de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$, $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para o sítio em que $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ é máxima e $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para o sítio em que $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ é mínima. Os parâmetros utilizados foram $W=0.6$, $U=2.18$ e $T=0.025$

Na figura 4.11 (a), temos um comportamento semelhante ao da figura 4.10 (a), mas podemos ver que temos apenas um pico que se destaca mais, uma bolha com comportamento metálico. A realização de desordem é a mesma nos dois casos, o que justifica a semelhança. No entanto, os valores de U e W utilizados na figura 4.10 (a) são maiores. Essas bolhas metálicas existem para valores de U maiores com desordem maior. Para $W=0.6$, $U=2.20$ e $T=0.025$ (ver figura 4.15 (d)), um valor de U menor que o da figura 4.10, esse comportamento já não aparece mais e todo o sistema tem um caráter isolante. Na figura 4.11 (b), vemos que o comportamento médio indica que o sistema é um isolante.

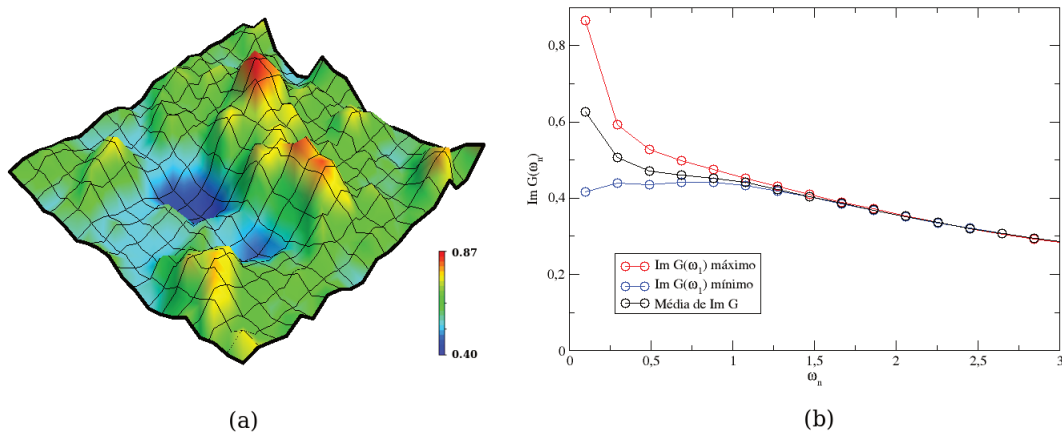


Figura 4.12: Em (a) temos $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede e em (b) temos três curvas: valor médio de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$, $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para o sítio em que $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ é máxima e $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para o sítio em que $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ é mínima. Os parâmetros utilizados foram $W=0.6$, $U=2.13$ e $T=0.025$

Na figura 4.12 (a) podemos ver que o que está começando a surgir é um comportamento isolante, bolhas de isolantes ruins. A região mais azul, no menor valor na escala de cores, tem funções de Green que parecem estar indo para um comportamento isolante, como podemos ver pela curva em azul na figura 4.12 (b). Diferentemente dos casos anteriores o sistema agora tem um comportamento médio semelhante ao de um metal, curva preta na figura 4.12 (b). Novamente, esperamos que esses comportamentos fiquem mais definidos quando a desordem aumenta e quando a temperatura é mais baixa.

Como podemos relacionar as regiões mais ou menos condutoras com as energias locais ε_i ? Para responder essa pergunta construímos a figura 4.13. Na figura 4.13 (a) plotamos os valores de $\text{Im } G(i\omega_1)$ para uma realização de desordem em ordem decrescente: pegamos os 400 valores obtidos para essa quantidade e colocamos em ordem decrescente. Na figura 4.13 (b) plotamos as energias locais ε_i seguindo o ordenamento definido pela figura 4.13 (a): colocamos a energia do sítio i na mesma posição horizontal que $\text{Im } G_i(i\omega_1)$.

Podemos perceber que para os menores valores de $\text{Im } G(i\omega_1)$ as energias correspondentes estão próximas a zero e para os maiores valores de $\text{Im } G(i\omega_1)$ as energias correspondentes tem módulo maior. Isso está associado ao fato de que para energias locais distantes de zero os sítios tem maior tendência a estarem duplamente ou não ocupados, favorecendo a condução, ou seja, valores maiores de $\text{Im } G(i\omega_1)$. Sítios com energias mais próximas de zero tem maior chance de estarem ocupados com apenas um elétron, desfavorecendo a condução, ou seja, favorecendo valores menores de $\text{Im } G(i\omega_1)$. Nesse sentido, as energias locais ε_i atuam como uma espécie de “potencial químico local”, alterando localmente a dopagem.

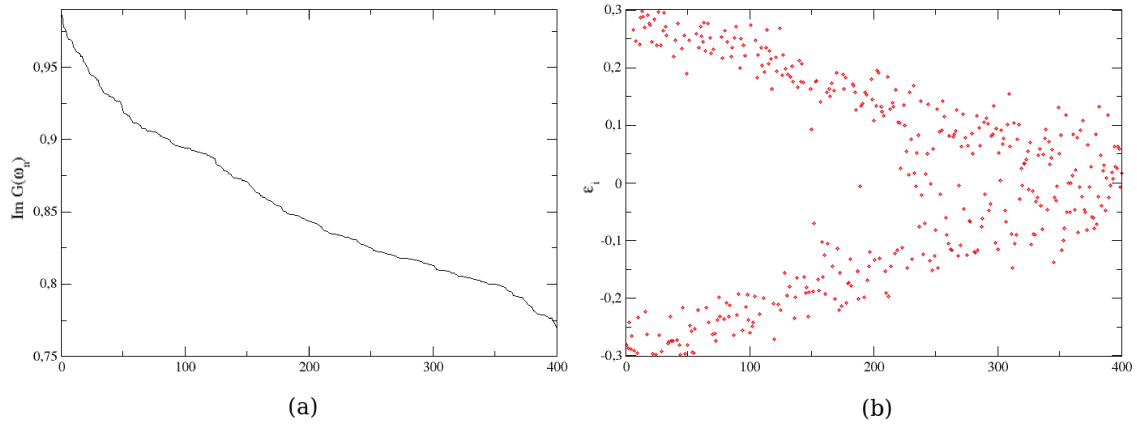


Figura 4.13: (a) $\text{Im } G(i\omega_1)$ em ordem decrescente para uma realização de desordem. (b) ε_i seguindo o ordenamento decrescente de $\text{Im } G(i\omega_1)$. Os parâmetros utilizados foram $W=0.6$, $U=2.08$ e $T=0.025$.

Na figura 4.14 temos gráficos de $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ para três realizações de desordem. Podemos ver que as “paisagens” de condução mudam nos três casos. Essa mudança ocorre porque as equações a serem resolvidas são diferentes para realizações de desordem diferentes. No entanto, características similares se mantêm e $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ permanece na mesma região de valores, já que os valores de desordem, interação e temperatura se mantêm os mesmos.

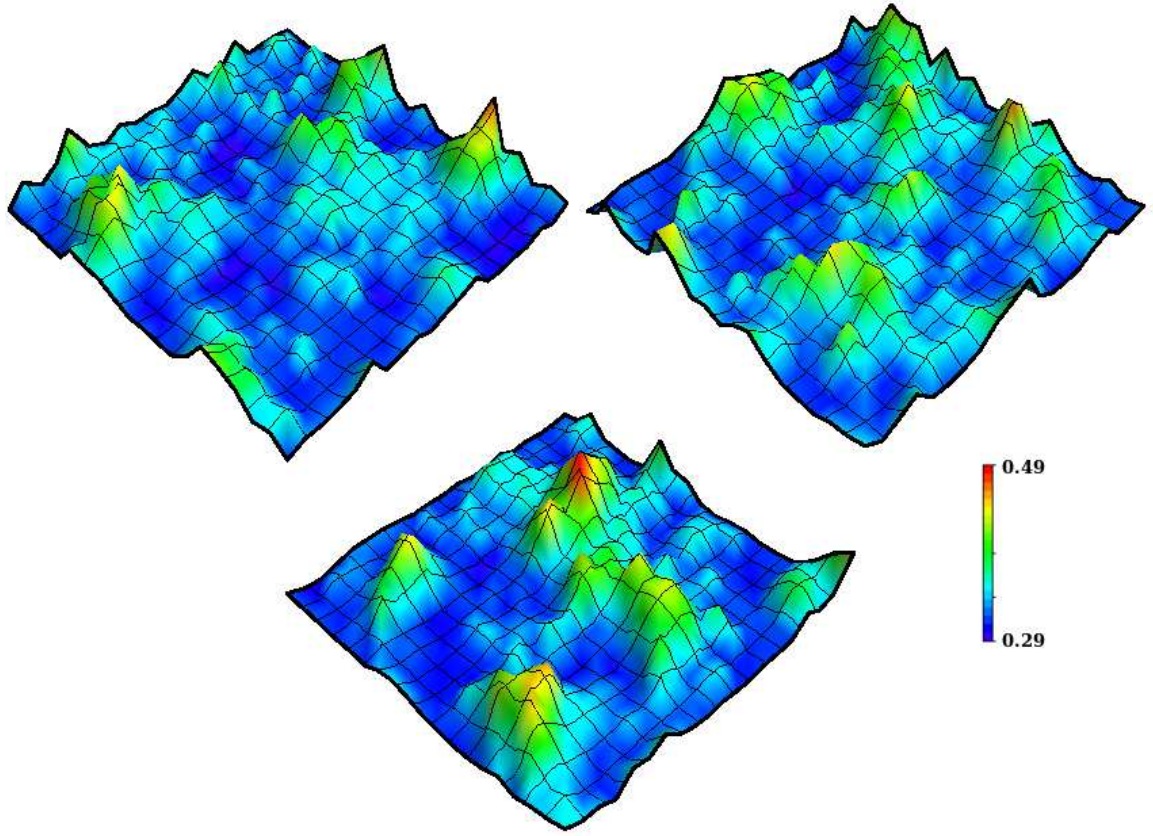


Figura 4.14: $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede para três realizações diferentes de desordem, para $W=0.6$, $U=2.21$ e $T=0.025$

Podemos olhar melhor a mudança de comportamento do sistema quando aumentamos o valor de U olhando para a figura 4.15. Nessa figura temos os valores de $\text{Im } G(i\omega_n)$ para o sítio em que $\text{Im } G(i\omega_1)$ é máxima, $\text{Im } G(i\omega_n)$ para o sítio em que $\text{Im } G(i\omega_1)$ é mínima e o valor médio de $\text{Im } G(i\omega_n)$, para quatro valores de U . Podemos ver que na figura 4.15 (a) todos os sítios têm um comportamento de um metal ruim. Quando U aumenta um pouco aparecem bolhas isolantes no sistema, até que na figura 4.15 (d) todos os sítios do sistema tem um caráter isolante. À medida que o valor de U aumenta o caráter metálico do sistema vai diminuindo até desaparecer completamente.

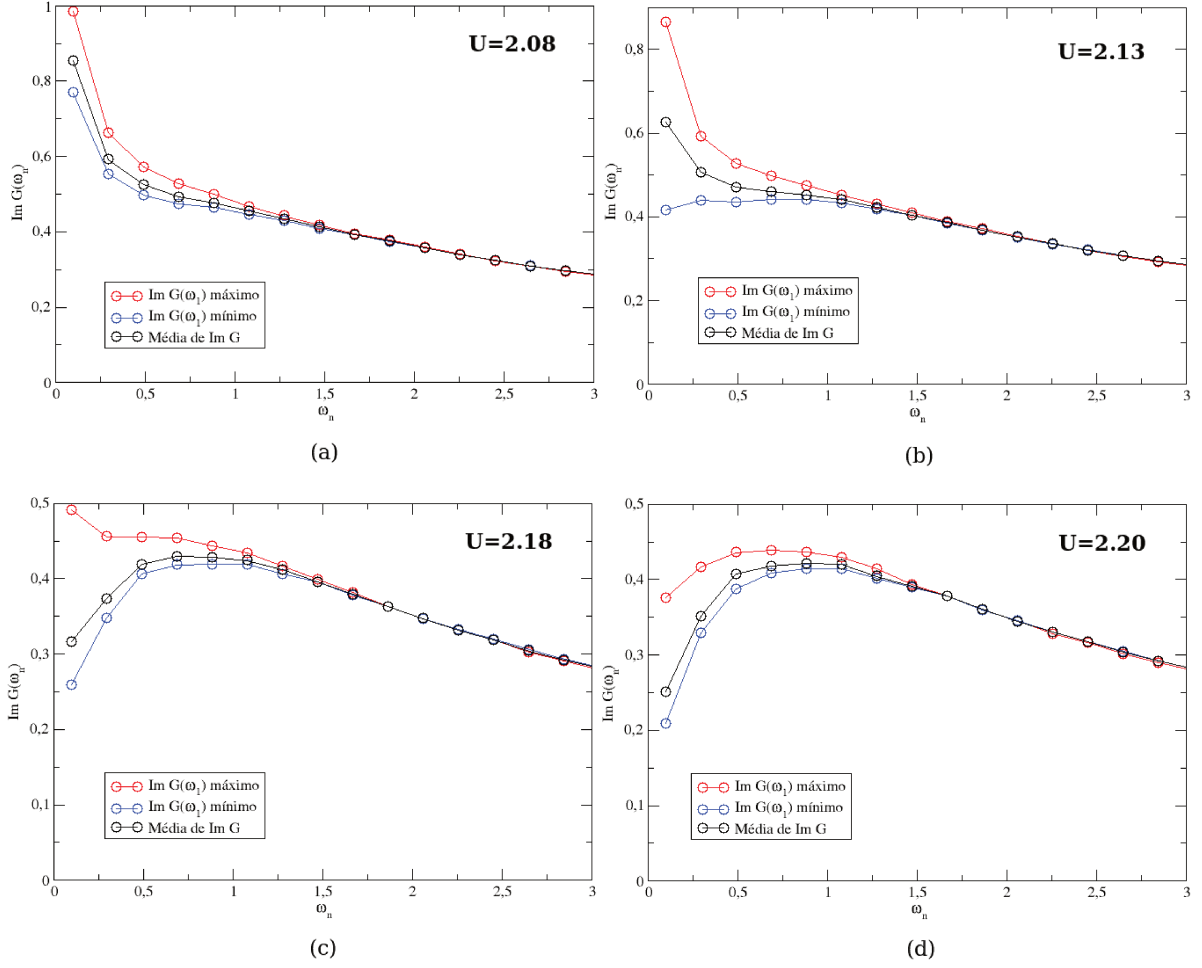


Figura 4.15: $\text{Im } G(i\omega_n)$ para o sítio em que $\text{Im } G(i\omega_1)$ é máxima, $\text{Im } G(i\omega_n)$ para o sítio em que $\text{Im } G(i\omega_1)$ é mínima e o valor médio de $\text{Im } G(i\omega_n)$ para uma realização de desordem e quatro valores de U : (a) 2.08, (b) 2.13, (c) 2.18 e (d) 2.20. Os outros parâmetros utilizados foram $W=0.6$ e $T=0.025$

Podemos olhar também para a mudança que ocorre com o aumento de U através da figura 4.16. Todos esses gráficos foram feitos para valores de U tais que todos têm comportamento isolante, sem presença de bolhas metálicas. Fizemos isso para manter a mesma escala de cores e facilitar a visualização. É perceptível que à medida que U aumenta os valores de $\text{Im } G(i\omega_1)$ vão diminuindo. Como a realização de desordem é a mesma que a utilizada nas figuras 4.11 (a) e 4.12 (a) podemos perceber que os picos se mantêm basicamente nas mesmas posições.

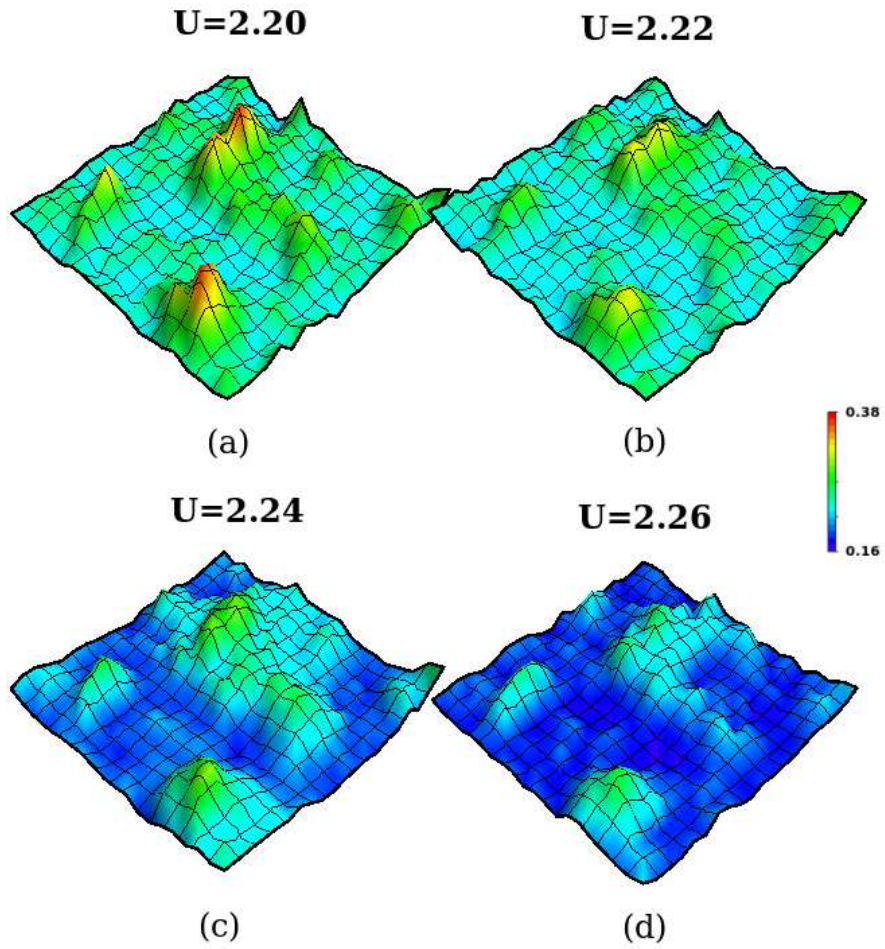


Figura 4.16: $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de sua posição espacial na rede para quatro valores de U : (a) 2.20, (b) 2.22, (c) 2.24 e (d) 2.26. Os outros parâmetros utilizados foram $W=0.6$ e $T=0.025$.

Outra coisa que podemos fazer é olhar para as flutuações de $\text{Im } G(i\omega_1)$ em torno de sua média para uma realização de desordem. Isso é feito na figura 4.17. Podemos perceber que à medida que U aumenta as flutuações em torno da média aumentam e depois diminuem. Isso parece sugerir que as figuras (b) e (c) correspondam a pontos mais próximos do ponto crítico.

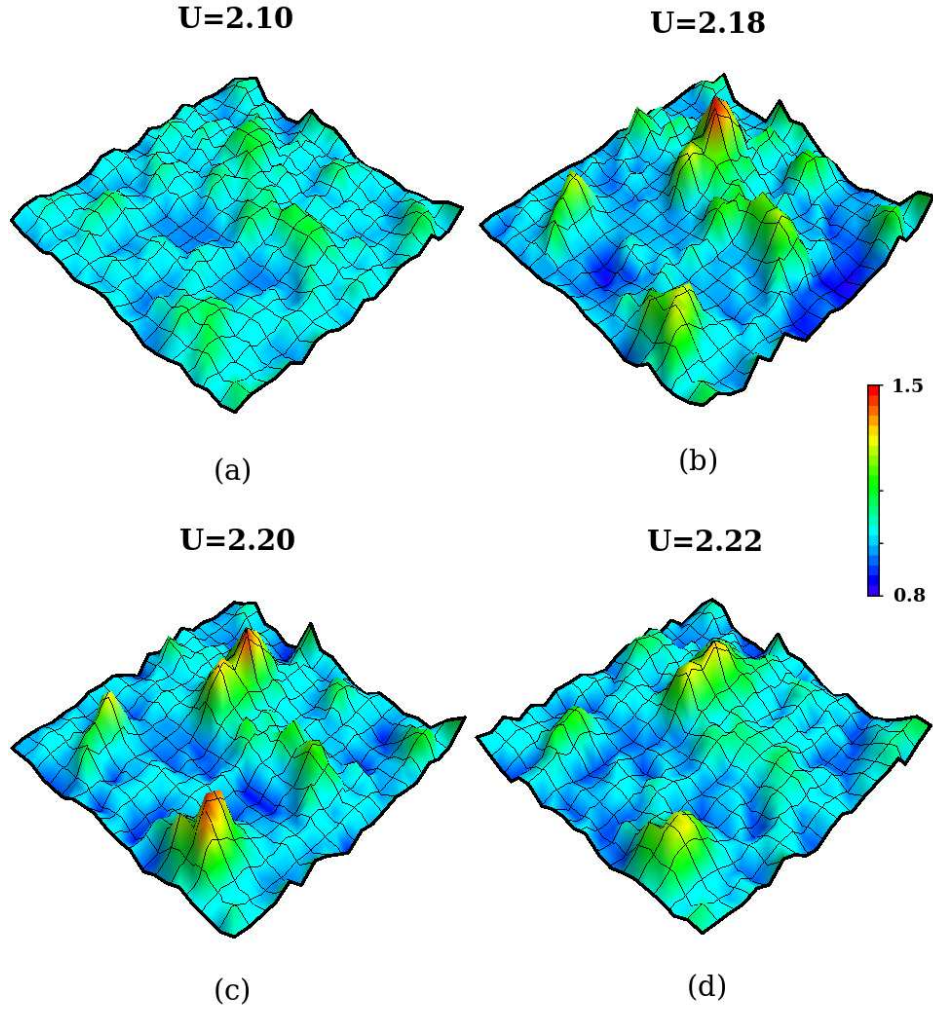


Figura 4.17: $\text{Im } G_i(i\omega_n) / \langle \text{Im } G_i(i\omega_n) \rangle$ para alguns valores de U : (a) 2.08, (b) 2.18, (c) 2.20 e (d) 2.22. Os outros parâmetros utilizados foram $W=0.6$ e $T=0.025$.

O mesmo comportamento aparece quando analisamos uma desordem um pouco maior. Na figura 4.18 temos também as flutuações em torno da média para diferentes valores de U . As flutuações aumentam e depois diminuem, sendo máximas na figura 4.18 (c). O valor de U nesse caso é $U=2.27$, maior que o que ocorre com desordem $W=0.6$ que é próximo de $U=2.18$. Supondo que $U=2.27$ está mais perto do ponto crítico, podemos ver que o valor de U crítico deve estar aumentando com a desordem, como é esperado.

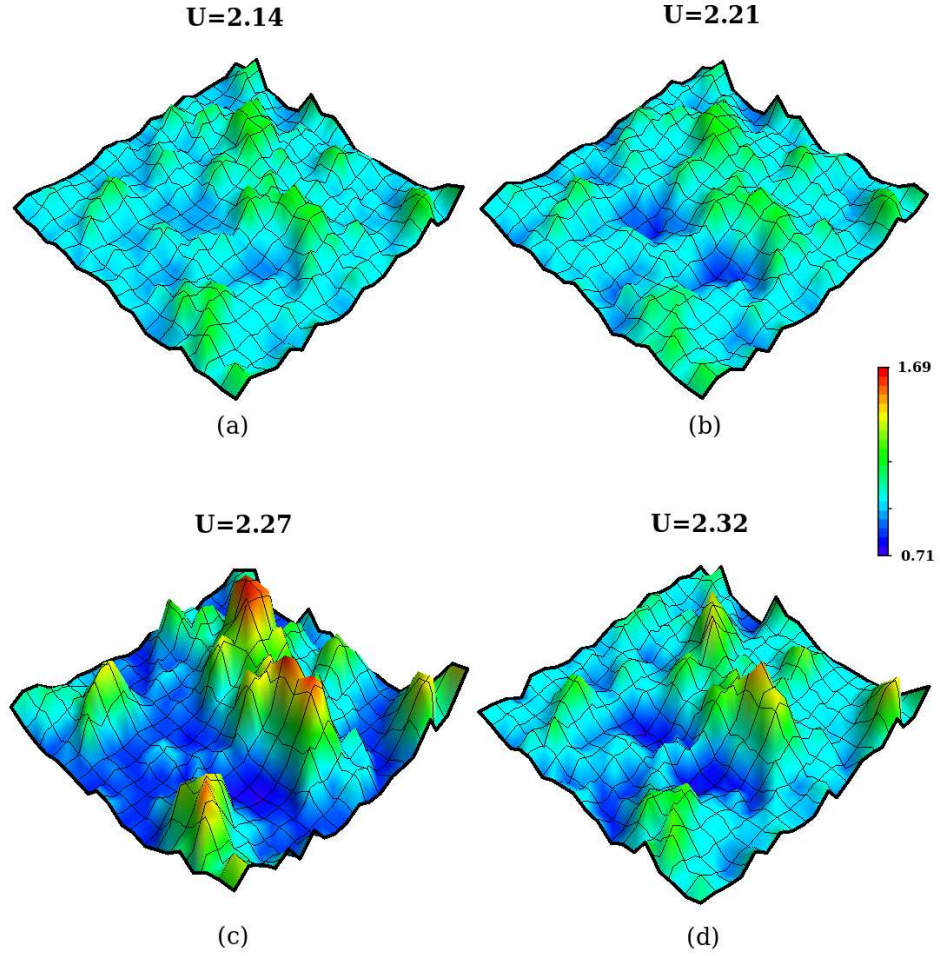


Figura 4.18: $\text{Im } G_i(i\omega_n) / \langle \text{Im } G_i(i\omega_n) \rangle$ para alguns valores de U : (a) 2.14, (b) 2.21, (c) 2.27 e (d) 2.32. Os outros parâmetros utilizados foram $W=0.8$ e $T=0.025$.

Na figura abaixo temos as flutuações de $\text{Im } G(i\omega_1)$ em torno da média como função de U para os mesmos valores de desordem das figuras anteriores. Podemos ver melhor o aumento e a diminuição das flutuações com a variação de U . É interessante notar que para a desordem maior o valor de U em que as flutuações são maiores aumenta, assim como a amplitude dessas flutuações.

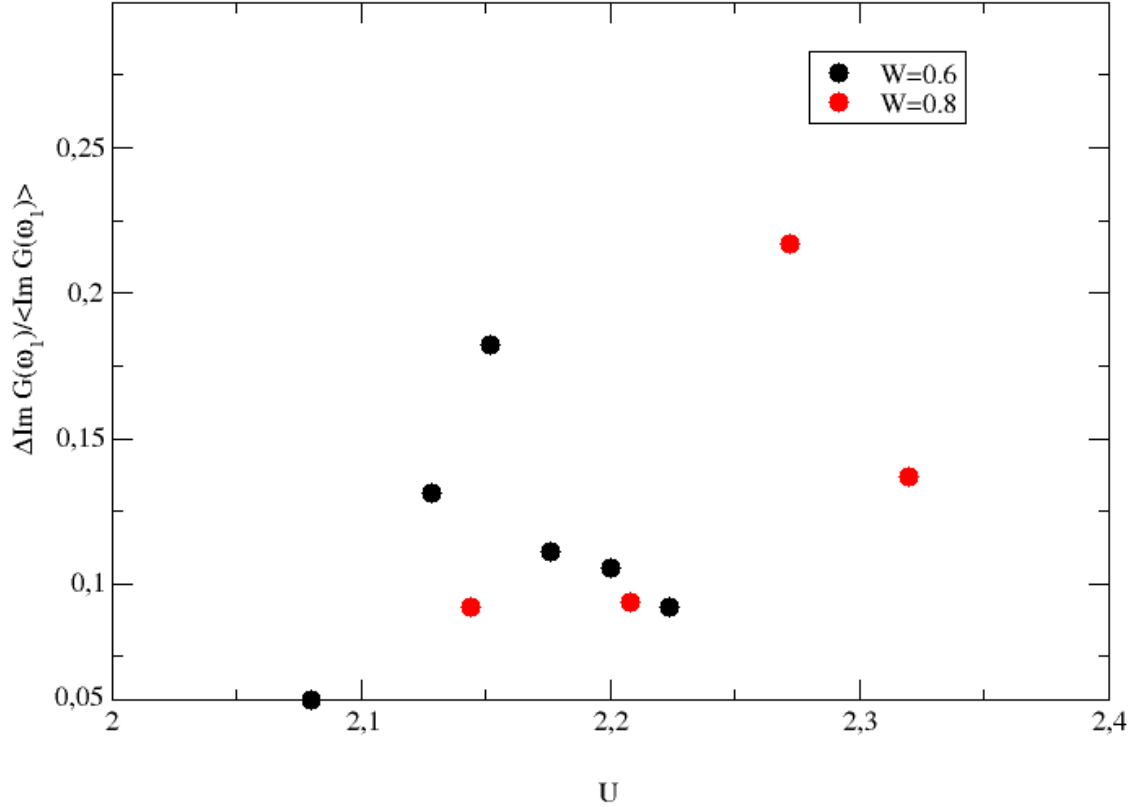


Figura 4.19: Flutuações de $\text{Im } G(i\omega_1)$ em torno da média para $T=0.025$ e dois valores de desordem: $W=0.6$ e $W=0.8$.

Como a desordem que utilizamos em todos os nossos resultados é moderada, de maneira geral as distribuições que aparecem não são muito largas e o valor médio dá uma boa idéia do comportamento do sistema. Na figura 4.20 temos o valor médio da parte imaginária da função de Green para alguns valores de U . Quando olhamos essa figura fica

clara a transição metal-isolante que o sistema sofre com o aumento de U . No entanto, essa transição que observamos é um “crossover”, em que passamos continuamente de um metal ruim a um isolante ruim, pois estamos acima de T_c^W .

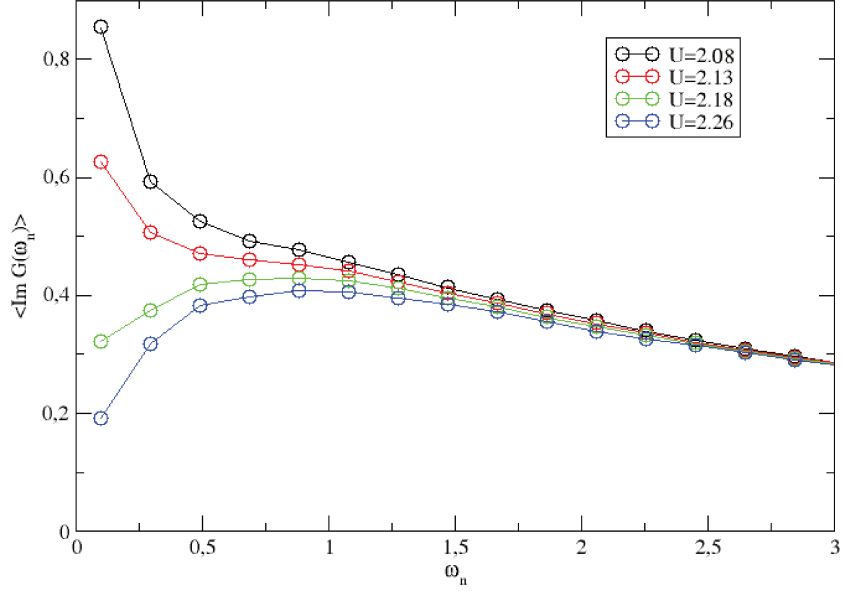


Figura 4.20: Média aritmética de $\text{Im } G_i(i\omega_n)$ para uma realização de desordem para alguns valores de U , $W=0.6$ e $T=0.025$

Na figura 4.21 fizemos um gráfico com o valor médio de $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ como função de U para dois valores de desordem: $W=0.6$ e $W=0.8$. Apesar de não termos uma transição bem definida, podemos ver que há uma região em que as curvas, tanto para $W=0.6$ quanto para $W=0.8$, tem uma derivada mais pronunciada. É razoável supor que essa região corresponde ao crossover, indicando que a desordem está aumentando o valor de U_c , o U no ponto crítico.

A explicação para o aumento do valor de U_c com a desordem segue a que demos anteriormente para explicar o comportamento da figura 4.13. Ao introduzirmos a desordem nas energias locais, favorecemos um pouco a dupla ocupação de alguns sítios e a ocupação nula de outros, ou seja, dopamos localmente em relação ao semi-preenchimento.

Como teremos mais sítios duplamente ocupados e sítios vazios que quando $W=0$, favorecemos o estado metálico, pois os elétrons tem maior liberdade para passear pelo sistema. De modo a recuperarmos uma situação em que temos um elétron por sítio precisamos de um valor de U maior que no caso $W=0$.

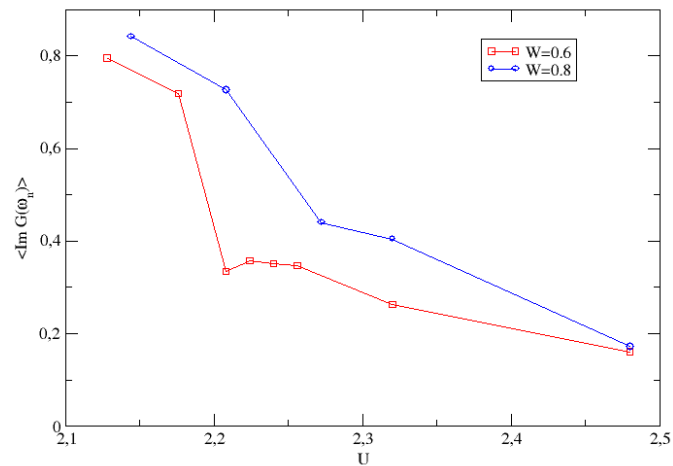


Figura 4.21: Média aritmética de $\text{Im } G_i(i\omega_1)$ para uma realização de desordem para alguns valores de U e dois valores de desordem $W=0.6$ e $W=0.8$. A temperatura para todos casos é $T=0.025$

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho estudamos o modelo de Hubbard desordenado numa rede bidimensional quadrada, com hopping entre primeiros e segundos vizinhos. Utilizamos como ferramenta para esse estudo a Teoria Estatística Dinâmica de Campo Médio. Essa teoria mapeia o problema original em vários problemas de uma impureza de Anderson, que estão embebidos em meios determinados por uma relação de autoconsistência. O método que aplicamos para resolver esses problemas de uma impureza foi o Monte Carlo Quântico, que faz cálculos em temperatura finita. O nosso trabalho é a primeira implementação numérica da TEDCM que utiliza o Monte Carlo Quântico como método de solução dos problemas de uma impureza.

Um dos resultados interessantes que obtivemos foi a coexistência de “bolhas” de isolantes e metais ruins. Em sistemas maiores essas “bolhas” devem crescer, surgindo a possibilidade de estudarmos problemas de interface entre essas regiões com comportamentos diferentes. Uma série de perguntas interessantes aparecem, como por exemplo, de que maneira o metal (isolante) penetra no isolante (metal) [36]. Em temperaturas mais baixas do que as estudadas neste trabalho, em que existe uma região de coexistência, agora no sentido de que o sistema tem mais de uma solução estável possível, podemos estudar paredes de domínio definindo duas regiões da rede com valores de interação U diferentes,

um estando dentro e outro fora dessa região de coexistência. De maneira geral, poderemos estudar sistemas fortemente correlacionados não-homogêneos como, por exemplo, super-redes compostas por metais de transição [37, 38].

Além de observar essa coexistência de “bolhas”, conseguimos associar regiões mais (menos) condutoras com energias locais maiores (menores), essas energias locais atuando como um potencial químico local, que altera localmente a dopagem. Observamos também que as flutuações em torno da média da parte imaginária da função de Green na primeira frequência de Matsubara são maiores em algumas regiões, que parecem sugerir uma maior proximidade do ponto crítico de segunda ordem em que termina a região de coexistência. Finalmente, observamos o aumento do valor de U crítico com a desordem, resultado já conhecido.

Esse trabalho representa o primeiro esforço na utilização da combinação TEDCM e Monte Carlo Quântico no estudo de sistemas fortemente correlacionados não homogêneos.

Apêndice A

Algoritmo Hirsch-Fye

O algoritmo Hirsch-Fye [32, 2] foi desenvolvido para o estudo do modelo de Anderson, que descreve uma impureza magnética num banho fermiônico. O hamiltoniano modelo é dado por

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_0 c_{0\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} + \sum_{p>0, \sigma} [V_{0p} c_{0\sigma}^{\dagger} c_{p\sigma} + V_{0p}^* c_{p\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma}] + \sum_{p>0, \sigma} \varepsilon_p c_{p\sigma}^{\dagger} c_{p\sigma}, \quad (\text{A.1})$$

onde os dois primeiros termos descrevem apenas a impureza, o último descreve o banho em que a impureza está embebida e o penúltimo o acoplamento entre a impureza e o banho. Chamaremos de N o número total de orbitais presentes no hamiltoniano.

Vamos separar o hamiltoniano H em duas partes, uma não-interagente H^0 e outra interagente H^i , de modo que $H = H^0 + H^i$. Podemos realizar isso fazendo:

$$H^0 = \sum_{p, \sigma} (\varepsilon_p + \delta_{p,0} \frac{1}{2} U) c_{0\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + \sum_{p>0, \sigma} [V_{0p} c_{0\sigma}^{\dagger} c_{p\sigma} + V_{0p}^* c_{p\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma}] \quad (\text{A.2})$$

$$H^i = U [n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} - \frac{1}{2} (n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow})]. \quad (\text{A.3})$$

Consideremos agora a função partição do sistema

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau [H^0 + H^i]}, \quad (\text{A.4})$$

onde separamos o intervalo de tempo imaginário $[0, \beta]$ em L partes iguais de tamanho $\Delta\tau = \beta/L$.

O que dificulta o cálculo de Z é o termo que envolve quatro operadores (o termo de interação), já que um hamiltoniano quadrático pode ser facilmente diagonalizado. Então, vamos escrever o operador quártico em termos de operadores quadráticos.

Primeiramente, vamos separar as exponenciais através da decomposição de Suzuki-Trotter, que nos dá

$$\begin{aligned} e^{-\Delta\tau[H^0+H^i]} &= e^{-\Delta\tau H^0} e^{-\Delta\tau H^i} + O(\Delta\tau^2[H^0, H^i]) \\ &= e^{-\Delta\tau H^0} e^{-\Delta\tau H^i} + O(\Delta\tau^2 U) \\ &\simeq e^{-\Delta\tau H^0} e^{-\Delta\tau H^i}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Podemos utilizar o resultado anterior para aproximar a função de partição por $Z \simeq Z^{\Delta\tau}$, com

$$Z^{\Delta\tau} = Tr \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H^0} e^{-\Delta\tau H^i} \quad (\text{A.6})$$

O próximo passo é introduzirmos uma transformação de Hubbard-Stratonovich

$$e^{-\Delta\tau U[n_{0\uparrow}n_{0\downarrow} - \frac{1}{2}(n_{0\uparrow}+n_{0\downarrow})]} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\lambda s(n_{0\uparrow}-n_{0\downarrow})}, \quad (\text{A.7})$$

com λ determinado pela equação $\cosh\lambda = e^{-\Delta\tau U/2}$. É fácil verificar que isso é verdade, bastando aplicar os dois lados da equação aos quatro estados possíveis de ocupação do orbital da impureza. Podemos agora substituir isso em cada intervalo de tempo da equação A.6 e chegamos a

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

onde $\{s\} \equiv (s_1, s_2, \dots, s_L)$. Separando agora H^0 em suas componentes de spin de modo que $H^0 = \sum_{\sigma} H_{\sigma}^0$ e definindo o operador $V^{\sigma}(l) = \sum_{pp'} c_{p\sigma}^{\dagger} V_{pp'}^{\sigma}(l) c_{p'\sigma}$, com $V_{pp'}^{\sigma}(l) =$

$\delta_{pp'}\delta_{0p}\lambda\sigma s_l$, podemos escrever

$$\begin{aligned} Z^{\Delta\tau} &= \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} Tr \prod_{l=1}^L \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} e^{-\Delta\tau H_\sigma^0} e^{V^\sigma(l)} \\ &= \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} Tr \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H_\sigma^0} e^{V^\sigma(l)}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Por conveniência vamos definir a seguinte quantidade

$$Z[\{s\}] = \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} Tr \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H_\sigma^0} e^{V^\sigma(l)}, \quad (\text{A.9})$$

a função de partição para uma dada configuração de spins de ising $\{s\}$, de modo que $Z^{\Delta\tau} = \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} Z[\{s\}]$.

O traço em $Z[\{s\}]$ pode ser calculado diretamente, como se pode ver em [39].

Utilizando esse resultado, temos que

$$Z[\{s\}] = \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \det[1 + B_1^\sigma \dots B_L^\sigma], \quad (\text{A.10})$$

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

Podemos definir funções de Green dentro da mesma aproximação que utilizamos para $Z^{\Delta\tau}$, tomando $U_{\Delta\tau} \equiv e^{-\Delta\tau H^0} e^{-\Delta\tau H^i}$ como operador de evolução entre intervalos de tempo:

$$g_{\sigma,p_1p_2}^{\Delta\tau}(l_1, l_2) = \langle T_\tau c_{p_1\sigma}(\tau_{l_1}) c_{p_2\sigma}^\dagger(\tau_{l_2}) \rangle \quad (\text{A.11})$$

$$= \frac{1}{Z^{\Delta\tau}} \frac{1}{2^L} \sum_{\{s\}} Tr [T_\tau c_{p_1\sigma}(\tau_{l_1}) c_{p_2\sigma}^\dagger(\tau_{l_2}) \prod_{l=1}^L \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} e^{-\Delta\tau H_\sigma^0} e^{V^\sigma(l)}]. \quad (\text{A.12})$$

De acordo com a literatura em Monte Carlo Quântico definimos a função de Green sem o sinal negativo.

Vamos agora introduzir a função de Green para uma dada configuração de spins de ising $\{s\}$:

$$g_{\sigma,p_1p_2}^{\Delta\tau,\{s\}}(l_1, l_2) = \frac{1}{Z[\{s\}]} Tr [T_\tau c_{p_1\sigma}(\tau_{l_1}) c_{p_2\sigma}^\dagger(\tau_{l_2}) \prod_{l=1}^L \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} e^{-\Delta\tau H_\sigma^0} e^{V^\sigma(l)}], \quad (\text{A.13})$$

de modo que

$$g_{\sigma, p_1 p_2}^{\Delta\tau}(l_1, l_2) = \frac{\sum_{\{s\}} g_{\sigma, p_1 p_2}^{\Delta\tau, \{s\}}(l_1, l_2) Z[\{s\}]}{\sum_{\{s\}} Z[\{s\}]}. \quad (\text{A.14})$$

Podemos tirar o traço da equação A.13, como descrito na referência [40], e encontramos que

$$g_{\sigma, p_1 p_2}^{\Delta\tau, \{s\}}(l_1, l_2) = \begin{cases} \left[B_{l_1-1}^\sigma \dots B_{l_2}^\sigma (1 + B_{l_2-1}^\sigma \dots B_1^\sigma B_L^\sigma \dots B_{l_2}^\sigma)^{-1} \right]_{p_1 p_2} & \text{se } l_1 \geq l_2 \\ \left[-B_{l_1-1}^\sigma \dots B_1^\sigma B_L^\sigma \dots B_{l_2}^\sigma (1 + B_{l_2-1}^\sigma \dots B_1^\sigma B_L^\sigma \dots B_{l_2}^\sigma)^{-1} \right]_{p_1 p_2} & \text{se } l_1 < l_2 \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

Para simplificar um pouco a notação definiremos a partir de agora a matriz $g_{\{s\}}^\sigma$, que é uma matriz $L \times L$ de matrizes $N \times N$, ou seja, uma matriz $(N * L) \times (N * L)$, cujos elementos são dados por $g_{\{s\}(p_1 p_2), (l_1 l_2)}^\sigma = g_{\sigma, p_1 p_2}^{\Delta\tau, \{s\}}(l_1, l_2)$.

As aproximações feitas acima são muito boas desde que $\Delta\tau^2 U \ll 1$. Se estivermos interessados em valores de U pequenos ou em temperaturas altas o L será pequeno. Nesse caso, a somatória sobre as configurações de ising $\{s\}$, que são poucas, pode ser feita diretamente através do “Gray code” [2]. Mas em geral esse não é o caso e precisamos utilizar o método Monte Carlo para realizá-la. Abaixo vamos obter algumas relações úteis e depois descrever o método como proposto originalmente por Hirsch e Fye.

Vamos agora introduzir a matriz $(N * L) \times (N * L)$ $\mathcal{O}_\sigma(\{s\})$:

$$\mathcal{O}_\sigma(\{s\}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & B_L^\sigma \\ -B_1^\sigma & 1 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -B_2^\sigma & 1 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 1 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & B_{L-1}^\sigma & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.16})$$

Podemos calcular diretamente o determinante de $\mathcal{O}_\sigma(\{s\})$ e obtemos que ele é dado por $\det[1 + B_1^\sigma \dots B_L^\sigma]$, e ainda que $\mathcal{O}_\sigma^{-1}(\{s\}) = g_{\{s\}}^\sigma$.

Apesar das matrizes descritas acima serem grandes, não precisamos manipulá-las diretamente, como notaram Hirsch e Fey. Eles observaram que as funções de Green para duas configurações de ising diferentes $(s_1 \dots s_L)$ e $(s'_1 \dots s'_L)$ estão relacionadas por uma equação de Dyson. Para encontrar essa equação vamos fazer

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_\sigma(\{s\})e^{-\mathcal{V}^\sigma(\{s\})} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & B_L^\sigma \\ -B_1^\sigma & 1 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -B_2^\sigma & 1 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 1 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & B_{L-1}^\sigma & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-\mathcal{V}^\sigma(1)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\mathcal{V}^\sigma(2)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\mathcal{V}^\sigma(3)} & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 0 & e^{-\mathcal{V}^\sigma(L)} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} e^{-\mathcal{V}^\sigma(1)} & 0 & \dots & 0 & B_L^\sigma e^{-\mathcal{V}^\sigma(L)} \\ -B_1^\sigma e^{-\mathcal{V}^\sigma(1)} & e^{-\mathcal{V}^\sigma(2)} & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -B_2^\sigma e^{-\mathcal{V}^\sigma(2)} & e^{-\mathcal{V}^\sigma(3)} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & e^{-\mathcal{V}^\sigma(L-1)} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & -B_{L-1}^\sigma e^{-\mathcal{V}^\sigma(L-1)} & e^{-\mathcal{V}^\sigma(L)} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.17}) \end{aligned}$$

onde introduzimos a matriz $(N * L) \times (N * L)$ $e^{-\mathcal{V}^\sigma(\{s\})}$ definida a partir das matrizes $N \times N$ $e^{\mathcal{V}^\sigma(l)}$. Os elementos fora da diagonal não dependem da configuração de spin pois $B_l^\sigma e^{-\mathcal{V}^\sigma(l)} = e^{-\Delta\tau\mathcal{H}^0} e^{\mathcal{V}^\sigma(l)} e^{-\mathcal{V}^\sigma(l)} = e^{-\Delta\tau\mathcal{H}^0}$. É evidente então que para duas configurações distintas $\{s\}$ e $\{s'\}$ vale a relação

$$\mathcal{O}_\sigma(\{s\})e^{-\mathcal{V}^\sigma(\{s\})} - \mathcal{O}_\sigma(\{s'\})e^{-\mathcal{V}^\sigma(\{s'\})} = e^{-\mathcal{V}^\sigma(\{s\})} - e^{-\mathcal{V}^\sigma(\{s'\})}. \quad (\text{A.18})$$

Após alguma manipulações chegamos a

$$g_{\{s'\}}^\sigma - g_{\{s\}}^\sigma = (g_{\{s\}}^\sigma - 1)(e^{\mathcal{V}^\sigma(\{s'\}) - \mathcal{V}^\sigma(\{s\})} - 1)g_{\{s'\}}^\sigma. \quad (\text{A.19})$$

$(e^{\mathcal{V}^\sigma(\{s'\}) - \mathcal{V}^\sigma(\{s\})} - 1)_{(p_1 p_2), (l_1 l_2)} \propto \delta_{l_1 l_2} \delta_{0 p_1} \delta_{0 p_2}$ e, devido a esse fato, surge a possibilidade de “integrarmos” os graus de liberdades do banho, pois a equação A.19 permanece válida

no subespaço definido por $p_1 = 0$ e $p_2 = 0$. Vamos então nos concentrar na função de Green do orbital da impureza $g_{\sigma,00}^{\Delta\tau,\{s\}}(l_1, l_2)$, que chamaremos por enquanto de G_{l_1, l_2} , e reescrever A.19 de uma maneira mais útil para computação:

$$G' = \mathcal{A}^{-1}G, \quad (\text{A.20})$$

com

$$\mathcal{A} = 1 + (1 - G)(e^{\nu' - \nu} - 1) \quad \text{e} \quad (\text{A.21})$$

$$\nu' - \nu = \begin{bmatrix} \lambda\sigma(s_{1'} - s_1) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda\sigma(s_{2'} - s_2) & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda\sigma(s_{L'} - s_L) \end{bmatrix}. \quad (\text{A.22})$$

Se considerarmos duas configurações $\{s\}$ e $\{s'\}$ que diferem apenas por um spin, s_l , teremos que

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & \mathcal{A}_{1l} & \dots & 0 \\ \dots & 0 & \dots & \mathcal{A}_{2l} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathcal{A}_{ll} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathcal{A}_{Ll} & \dots & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.23})$$

Nesse caso, podemos calcular diretamente a inversa de $\mathcal{A}$ utilizando a fórmula de Woodbury [39] e obtemos que

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{-1} &= 1 + (A_{ll})^{-1}(1 - \mathcal{A}) \\ &= 1 + (A_{ll})^{-1}(G - 1)(e^{\nu' - \nu} - 1). \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Substituindo A.24 em A.20 temos

$$G'_{l_1 l_2} = G_{l_1 l_2} + (G - 1)_{l_1 l}(e^{\nu' - \nu} - 1)_l (A_{ll})^{-1} G_{ll_2}, \quad (\text{A.25})$$

que é uma fórmula simplificada do “update” da função de Green para um flip de spin. O determinante de $\mathcal{A}$ também pode ser obtido diretamente,

$$\det \mathcal{A} = \mathcal{A}_{ll} = 1 + (1 - G_{ll})(e^{\lambda \sigma(s_{l'} - s_l)} - 1). \quad (\text{A.26})$$

Finalmente,

$$\frac{\det \mathcal{O}_\sigma(\{s'\})}{\det \mathcal{O}_\sigma(\{s\})} = \frac{\det g_{\{s\}}^\sigma}{\det g_{\{s'\}}^\sigma} = \det \mathcal{A}^\sigma \quad (\text{A.27})$$

Vamos agora juntar as peças e explicar como funciona o algoritmo:

Como dito anteriormente, para obtermos $g_{\sigma,00}^{\Delta\tau} = G_\sigma$ temos de somar em praticamente todos os casos de interesse sobre um número muito grande de configurações de ising,

$$G_\sigma = \frac{\sum_{\{s\}} G_\sigma^{\{s\}} Z[\{s\}]}{\sum_{\{s\}} Z[\{s\}]}, \quad (\text{A.28})$$

o que é impraticável. Podemos, no entanto, utilizar o método Monte Carlo, que soma sobre as configurações importantes. Começamos fazendo todos os spins iguais a zero ($s_1 \dots s_L = 0$). Olhando para as expressões A.8 e A.12, podemos ver que isso nos dá a função de Green não-interagente. Geramos então uma configuração aleatória de spins de ising e, utilizando a expressão A.20, obtemos a função de Green correspondente a essa configuração. Depois escolhemos aleatoriamente um intervalo de tempo imaginário l e flipamos ou não o spin correspondente com uma certa probabilidade P . Se o spin mudar utilizamos A.25 ou A.20 para atualizar a função de Green. Depois escolhemos outro spin aleatoriamente e aplicamos o mesmo procedimento. Fazendo isso várias vezes podemos obter a soma A.28. Se utilizarmos a equação A.25 para atualizar as funções de Green muitas vezes os erros de arredondamento se amplificam e, por isso, é preciso intercalá-la com a equação A.20 que é mais cara computacionalmente.

Temos alguma liberdade para escolher essa probabilidade P , no entanto ela deve satisfazer à propriedade do balanço detalhado:

$$\frac{P(s \rightarrow s')}{P(s' \rightarrow s)} = \frac{\prod_\sigma \det \mathcal{O}_\sigma(\{s'\})}{\prod_\sigma \det \mathcal{O}_\sigma(\{s\})}. \quad (\text{A.29})$$

Duas formas muito utilizadas para P são :

$$P(s \rightarrow s') = \frac{\Pi_\sigma \det \mathcal{O}_\sigma(\{s'\})}{[\Pi_\sigma \det \mathcal{O}_\sigma(\{s'\}) + \Pi_\sigma \det \mathcal{O}_\sigma(\{s\})]} \quad (\text{Banho térmico}), \quad (\text{A.30})$$

$$P(s \rightarrow s') = \begin{cases} 1 & \text{se } \Pi_\sigma \det \mathcal{O}_\sigma(\{s'\}) > \Pi_\sigma \det \mathcal{O}_\sigma(\{s\}) \\ \frac{\Pi_\sigma \det \mathcal{O}_\sigma(\{s'\})}{\Pi_\sigma \det \mathcal{O}_\sigma(\{s\})} & \text{de outro modo} \end{cases} \quad (\text{Metropolis}). \quad (\text{A.31})$$

Em ambos os casos a probabilidade de transição está em função da razão entre determinantes que pode ser calculada de maneira simples, como podemos ver em A.26 e A.27.

Em geral utiliza-se da ordem de 10^5 passos de flips de spin. Desses, aproximadamente os primeiros 10^3 são descartados para equilibrarmos os spins. Depois, tomamos medidas separadas por um certo número de passos para evitar correlações entre essas medidas.

Referências Bibliográficas

- [1] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [2] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth e M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [3] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, e T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [4] E. Abrahams S. V. Kravchenko e M. P. Sarachik, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 251 (2001).
- [5] E. Abrahams S. V. Kravchenko e M. P. Sarachik, *Rep. Prog. Phys.* **67**, 1 (2004).
- [6] T. V. Ramakrishnan, *Chance and Matter, Les Houches XLVI* (1986).
- [7] P. W. Anderson, *Rev. Mod. Phys.* **50**, 191 (1978).
- [8] P. W. Anderson, *Comments Solid State Phys.* **2**, 193 (1970).
- [9] D. J. Thouless, *J. Phys. C* **3**, 1559 (1970).
- [10] P. A. Lee e T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
- [11] N.F. Mott e W. D. Twose, *Adv. Phys.* **10**, 107 (1961).
- [12] R. E. Borland, *Phil. Trans R. Soc. lond. A* **274**, 529 (1963)
- [13] G. Schubert, A. Weibe, G. Wellein e H. Fehske, *arXiv:cond-mat/0309015v3* (2005).

- [14] N. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor and Francis, London (1990).
- [15] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. (Londo) A* **276**, 238 (1963).
- [16] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. (Londo) A* **277**, 237 (1964).
- [17] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. (Londo) A* **281**, 401 (1964).
- [18] W. F. Brinkman e T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **2**, 4302 (1970).
- [19] B. L. Altshuler, A. G. Aronov e P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1288 (1980)
- [20] S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov e M. D'Iorio, *Phys. Rev. B* **50**, 8039 (1994).
- [21] S. V. Kravchenko, Whitney E. Mason, G. E. Bowker, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, e M. D'Iorio, *Phys. Rev. B* **51**, 7038 (1995).
- [22] W. Metzner e D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 384 (1989).
- [23] A. Georges e G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **45**, 6479 (1992).
- [24] J. W. Negele e H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems*, Addison-Wesley, London (1988).
- [25] P. Limelette, A. Georges, D. Jérôme, P. Wzietek, P. Metcalf e J. M. Honig, *Science* **302**, 89 (2003).
- [26] M. C. O. Aguiar, V. Dobrosavljević, E. Abrahams e G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **71**, 205115 (2005).
- [27] M. C. O. Aguiar, Tese de Doutorado, IFGW-UNICAMP, Campinas, Maio de 2003.
- [28] V. Dobrosavljević e G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3943 (1997).
- [29] V. Dobrosavljević e G. Kotliar, *Phil. Trans R. Soc. lond. A* **356**, 57 (1998).

- [30] E. C. Andrade, E. Miranda, and V. Dobrosavljević, Proceedings of the SCES 2008, *arXiv:0811.0320v2* (2008).
- [31] E. C. Andrade, E. Miranda, and V. Dobrosavljević, *arXiv:0808.0913v1* (2008).
- [32] J. E. Hirsch e R. M. Fye, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2521 (1986).
- [33] M. J. Rozenberg, R. Chitra e G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3498 (1999).
- [34] M. Y. S. Villagran, Dissertação de Mestrado em fase final, IFGW-UNICAMP, Campinas.
- [35] G. Kotliar e D. Vollhardt, *Phys. Today* **57(3)**, 53 (2004)
- [36] R. H. Helmes, T. A. Costi e A. Rosch, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 066802 (2008).
- [37] S. Okamoto e A. J. Millis, *Nature* **428**, 630 (2004).
- [38] A. Ohtomo, D. A. Muller, J. L. Grazul e H. Y. Hwang *Nature* **419**, 378 (2002).
- [39] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 865 (2006)
- [40] R. R. dos Santos, *Braz. J. Phys.* **33**, 36 (2003).