

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-graduação em Física

Nathan Giovanni Andrade Teixeira

**LOCALIZAÇÃO DE ANDERSON E TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE EM
SISTEMAS FORTEMENTE INTERAGENTES COM DOPAGEM**

Belo Horizonte
2022

Nathan Giovanni Andrade Teixeira

**LOCALIZAÇÃO DE ANDERSON E TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE EM
SISTEMAS FORTEMENTE INTERAGENTES COM DOPAGEM**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientadora: Prof. Dra. Maria Carolina de Oliveira Aguiar

Belo Horizonte
2022

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

T266I Teixeira, Nathan Giovanni Andrade.
Localização de Anderson e transição metal-isolante em sistemas fortemente interagentes com dopagem / Nathan Giovanni Andrade Teixeira. – 2022.
134f. : il.

Orientadora: Maria Carolina de Oliveira Aguiar.
Tese (doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais,
Departamento de Física.
Bibliografia: f. 102-113.

1. Sistemas desordenados. 2. Matéria condensada, teses. I. Título. II. Aguiar, Maria Carolina de Oliveira. III. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 669.018 (043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

FOLHA DE APROVAÇÃO

A presente tese, intitulada "**Localização de Anderson e transição metal-isolante em sistemas fortemente interagentes com dopagem**", de autoria de **NATHAN GIOVANNI ANDRADE TEIXEIRA** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **DOUTOR EM CIÊNCIAS**, em cinco de abril de 2022.

Belo Horizonte, 05 de abril de 2022.

Profa. Maria Carolina de Oliveira Aguiar

Prof. Ronald Dickman

Orientadora do estudante

Departamento de Física/UFMG

Departamento de Física/UFMG

Profa. Vivian Vanessa França Henn

Prof. Natanael de Carvalho Costa

Instituto de Química/UNESP
Física/UFRJ

Instituto de

Prof. Eric de Castro e Andrade

Instituto de Física de São Carlos/USP



Documento assinado eletronicamente por **Maria Carolina de Oliveira Aguiar, Professora do Magistério Superior**, em 06/04/2022, às 08:57, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ronald Dickman, Professor do Magistério Superior**, em 06/04/2022, às 09:47, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Natanael de Carvalho Costa, Usuário Externo**, em 06/04/2022, às 13:19, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Eric de Castro e Andrade, Usuário Externo**, em 06/04/2022, às 13:43, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Vivian Vanessa França Henn, Usuária Externa**, em 06/04/2022, às 22:02, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1365245** e o código CRC **E4444F7D**.

Agradecimentos

À Deus e tudo que vem do seu amor. Com Deus sou mais forte e vou mais longe em favor de um mundo melhor.

À minha família, pais, irmãos, tios, primos. Se hoje tenho algo bom em meu coração, certamente vem por influência da minha família.

Agradeço uma pessoa em especial, seu nome é Cristina. Em momentos de grande dificuldade ela esteve do meu lado e me ajudou muito.

Aos amigos que conheci nessa jornada e que de uma forma ou de outra me ajudaram. Em especial destaco os nomes: Flávio, Daniel, Jobson, Helena, Walber, Isaac, Vitor, Ricardo, Thiago, Jander e Bruno. É difícil mensurar toda a minha gratidão por eles.

Ao departamento de física e os que nele estão, como a professora Carol, grande exemplo para mim. Estendo esse agradecimento ao professo Marcello Civelli e todos que contribuíram para minha jornada no LPS.

Às pessoas da biblioteca e aos professores e funcionários.

À todo o ambiente da UFMG.

Ao CENAPAd-SP pelo recurso computacional oferecido.

Ao CNPq, FAPEMIG e CAPES, em particular ao programa CAPES/COFECUB, pelo apoio financeiro.

À Flávia por me inspirar profissionalmente e por ter me motivado a continuar.

Agradeço às pessoas que fazem desse mundo um mundo melhor. Em especial, agradeço aqueles que lutam por mais ciência e mais artes. Também agradeço às pessoas que ajudam a natureza, às que ajudam o próximo e às que lutam por diminuir o especismo com animais.

Resumo

Estudamos neste trabalho sistemas fortemente correlacionados, desordenados e dopados. A correlação U tratada aqui é entre elétrons que se repelem quando estão num mesmo sítio da rede. A desordem W causa variações nos níveis de energia dos sítios, onde sítios com diferentes energias possuem a mesma probabilidade de ocorrer ao longo da rede. A dopagem δ faz o sistema ter diferentes ocupações eletrônicas. Este trabalho analisa o que ocorre quando U , W e δ atuam simultaneamente em um sistema físico gerando uma pluralidade de fenômenos. A motivação para nosso estudo vem de diferentes resultados experimentais, não sendo analisado um material em específico. É conhecido que materiais como terras raras, actinídeos, metais de transição e seus óxidos possuem forte interação eletrônica local. Para estudar esses materiais pode ser útil acrescentar dopagem, fato que inevitavelmente pode provocar efeitos de desordem no material. Nesses sistemas podem ser encontradas fases líquido de Fermi, isolante de Mott, isolante de Anderson, isolante de bandas e também a combinação dos fenômenos que dão origem às fases citadas, o que nos motiva a fazer uma descrição de como cada parâmetro (U , W e δ) pode ser combinado um com o outro. Com o intuito de considerar tanto a correlação local U quanto a desordem W , trabalhamos com o modelo de Anderson-Hubbard, que leva em conta a energia cinética de elétrons, a interação coulombiana e a desordem na energia dos sítios. A metodologia que usamos no nosso trabalho para resolver o modelo de Anderson-Hubbard é a Teoria de Campo Médio Dinâmico, usada no tratamento de sistemas interagentes, combinada com a Teoria de Meio Típico, usada para tratar desordem. A dopagem pode ser alterada controlando o potencial químico. Nossos resultados se resumem em diagramas de fase de W por δ para diferentes valores de U , tendo dados calculados numericamente e analiticamente. Nós observamos uma transição do metal para um isolante de Anderson-Mott ao aumentar a desordem para todas as interações. Para interação fraca e pequena dopagem, o isolante de Anderson-Mott tem propriedades similares às encontradas quando há semipreenchimento. Em particular, essa fase é caracterizada pela presença de sítios vazios. Se a dopagem ou a interação crescem, a fase isolante de Anderson-Mott passa a ter propriedades diferentes para uma desordem pequena ou intermediária. Essa fase ocupa grande parte do diagrama de fase no regime de forte correlação e é caracterizada pela ausência de sítios vazios da rede. Assim, nosso trabalho contribuiu para um melhor entendimento a respeito de sistemas interagentes, desordenados e dopados.

Palavras-chave: forte interação eletrônica; isolante de mott; isolante de anderson; transição metal-isolante.

Abstract

In this thesis we study strongly correlated electrons systems in the presence of disorder and doping. The correlations treated here, denoted by U , are between electrons that repel each other when they are at the same site. Disorder W causes variations in the onsite energy levels sites with different energies have the same probability of occurring in the lattice. Doping δ causes the system to have different electronic occupancies. It can be changed by controlling the chemical potential. In this work we analyze what occurs when U , W and δ act simultaneously in a physical system, which originates a plurality of phenomena. The motivation for our study comes from different experimental results, and no specific material is analyzed. It is known that materials such as rare earths, actinides, transition metals and their oxides have strong local electronic interaction. To study these materials it can be useful to add doping, which inevitably can cause disorder effects in the material. These systems can be found in different phases such as Fermi liquid, Mott insulator, Anderson insulator, or a phase generated by a combination of phenomena, which motivates us to make a description of how each parameter (U , W and δ) can be combined with each other. To consider both the local correlation U and the disorder W , we work with the Anderson-Hubbard model, which takes into account the kinetic energy of electrons, the Coulomb interaction and the disorder in the onsite energy. The methodology we use to solve the Anderson-Hubbard model is the Dynamical Mean Field Theory, used to treat interacting systems, combined with the Typical Medium Theory, used to treat disorder. Our results are summarized in the phase diagrams of W versus δ for different values of U , built from numerically and analytically calculated data. We observe a transition from a metal to an Anderson-Mott insulator for increasing disorder strength at all interactions. In the weak correlation regime and rather small doping, the Anderson-Mott insulator displays properties which are similar to the ones found at half filling. In particular, this phase is characterized by the presence of empty sites. If we further increase either the doping or the correlation, however, an Anderson-Mott phase of a different kind arises for sharply weaker disorder strength. This phase occupies the largest part of the phase diagram in the strong-correlation regime and is characterized by the absence of the empty sites. Thus, our work has contributed to a better understanding of disorder and doping effects in strongly correlated systems.

Keywords: strongly correlated system; mott insulator; anderson insulator; metal-insulator transition.

Sumário

1	Introdução	10
2	Revisão da Literatura	18
2.1	Experimentos envolvendo interação eletrônica	18
2.2	Experimentos envolvendo desordem e interação	24
2.3	Revisão teórica para sistemas interagentes	29
2.4	Revisão teórica para sistemas interagentes desordenados	35
3	Metodologia	46
3.1	Tratando efeitos de interação	46
3.1.1	Teoria de Campo Médio Clássica	46
3.1.2	Teoria de Campo Médio Dinâmico (DMFT)	48
3.1.3	Rede de Bethe	56
3.2	Tratando efeitos da interação e da desordem	58
3.2.1	Teoria do Meio Típico (TMT)	58
3.2.2	Implementação numérica da DMFT-TMT	61
3.2.3	Cálculo analítico para estados localizados	63
3.2.4	Testes das metodologias usadas	65
4	Resultados	69
4.1	Regimes conhecidos do modelo de Anderson-Hubbard	71
4.1.1	Casos onde $\delta > 0$ e $W = 0$	71
4.1.2	Casos onde $\delta = 0$ e $W > 0$	73
4.2	Diagramas de fase	77
4.3	Transição metal-isolante	80
4.3.1	Dopagem e Interação favorecem efeitos da desordem	81
4.3.2	Parâmetro de ordem da transição metal-isolante	82
4.3.3	Invariância da desordem crítica W_c para grandes correlações	85
4.4	Regiões da fase isolante	86
4.4.1	Região AMI - isolante de Anderson-Mott	86

4.4.2	Região AMI-0 - isolante de Anderson-Mott com sítios vazios	88
4.4.3	Região <i>band</i> AMI	92
4.4.4	Região BI - isolante de banda	94
4.4.5	Região AI - isolante de Anderson com $\delta = 1$	95
5	Conclusão	98
	Referências Bibliográficas	102
	APÊNDICE A - Densidade de estados a partir da função de Green	114
	APÊNDICE B - Problema de uma impureza assimétrico	118
	APÊNDICE C - Transformada de Hilbert	123
	APÊNDICE D - Artigo publicado	125

Capítulo 1

Introdução

Por muitos anos, o estudo da matéria sólida foi visto como uma área onde podia-se aplicar os conceitos da mecânica quântica. Em torno de 1930-1940, com o avanço no estudo dos materiais, a Física do Estado Sólido ganhou o status de uma área de pesquisa própria, descrevendo sólidos, em geral cristalinos, e conseguindo explicar para vários materiais a diferença entre os isolantes e os condutores. Em 1940, F. Seitz publicou um dos primeiros livros fundamentais na área, *Modern Theory of Solids* [1]. Posteriormente, em 1947, organizações como *American Physical Society* (APS) começaram a criar divisões próprias para a divulgação de trabalhos de física sobre materiais no estado sólido. O estudo de materiais sólidos envolve conhecimentos de mecânica quântica, eletromagnetismo e mecânica estatística. Dentro desse campo de estudos são investigadas propriedades da matéria como supercondutividade, antiferromagnetismo, fases topológicas, transições de fases quânticas, cristais de Wigner, isolante de Mott, efeito Kondo e vários outros fenômenos que um material pode apresentar. Mais de 30 prêmios nobéis já foram concedidos nessa área, sendo atualmente o campo da física com maior número de pesquisadores e produções científicas no mundo.

Dentro da Física do Estado Sólido existem teorias para descrever diferentes propriedades de cada material. Normalmente, um sólido pode ser descrito pela teoria de bandas, que explicaremos de forma resumida a seguir. No limite em que os átomos estão distantes uns dos outros, seus níveis de energia são discretos. Na teoria de bandas, à medida que a distância interatômica diminui, existe uma sobreposição dos níveis de energia atômicos, formando bandas de energias permitidas para os elétrons ocuparem. As regiões entre essas bandas são chamadas de *gaps*, correspondendo à ausência de estados acessíveis para os elétrons excitarem. Podemos ver na figura 1.1 (a) um esquema de formação dessas bandas de energia. Quando a distância interatômica a diminui, os níveis discretos se deslocam e

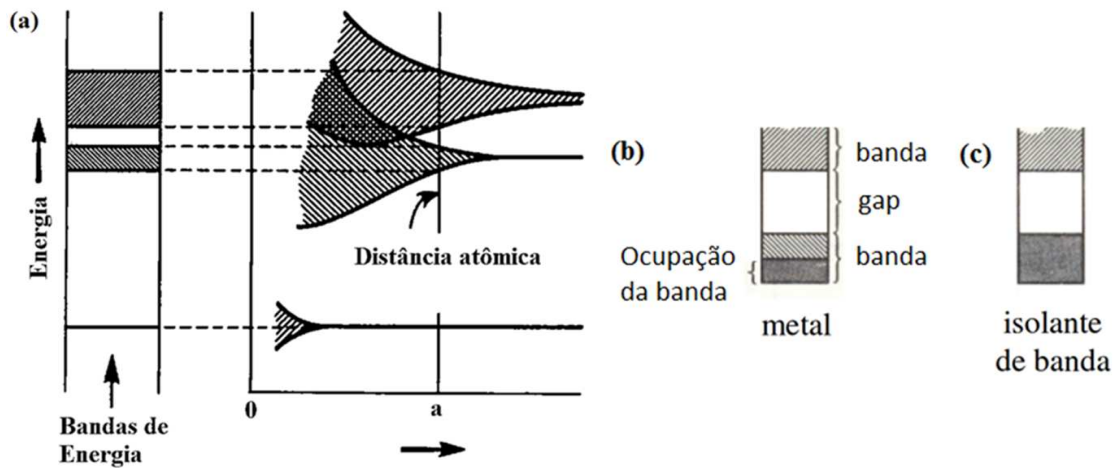


Figura 1.1: (a) Formação de bandas de energia num sólido quando a distância interatômica a diminui. (b) Estado metálico: o nível de Fermi está dentro de uma banda. (c) Estado isolante: um elétron precisa vencer um *gap* de energia para chegar no próximo estado excitado. Em (b) e (c) as regiões hachuradas correspondem a estados vazios. Figuras retiradas de [2].

passam a se superpor num contínuo de energia, formando regiões permitidas de energia, regiões hachuradas da figura 1.1 (a), separadas por *gaps*, que são regiões em branco na figura. Um material é considerado metal quando o nível de Fermi¹ está no interior de uma banda, figura 1.1 (b), de modo que uma pequena quantidade de energia pode levar um elétron a um estado excitado. Quando o nível de Fermi não está dentro de uma banda, ou seja, uma banda está totalmente preenchida e a outra vazia (figura 1.1 (c)), um elétron precisa ganhar uma quantidade de energia suficiente para transpor o *gap* e chegar num novo estado excitado. Isso diminui a mobilidade eletrônica, sendo o sistema considerado isolante (ou semicondutor, se o *gap* for pequeno).

Veremos que a classificação de metal ou isolante baseada na teoria de bandas de energia resumida acima não é abrangente para todos os materiais. Um material real tem vários fenômenos que podem influenciar no comportamento dos elétrons. Em materiais, como um semicondutor, os elétrons têm seu movimento modificado pelas interações com todos os outros elétrons e os núcleos atômicos. Os elétrons se comportam aproximadamente como se fossem um outro férmion de massa diferente da massa dos elétrons e que viajam através do espaço vazio. Esse férmion é um tipo de quase-partícula [3]. Podemos dizer que as quase-partículas são excitações coletivas da matéria. Essas excitações surgem quando há fenômenos emergentes no material, ou seja, quando um sistema microscópico complicado, tal como elétrons em um sólido, comporta-se como se fossem partículas fictícias fracamente

¹Quando a banda é preenchida com elétrons à temperatura nula, o estado de maior energia preenchido define o chamado nível de Fermi.

interagentes. Essas partículas fictícias emergem do comportamento de outras partículas do material. Quase-partículas são importantes em física do estado sólido, visto que é um dos poucos modos de simplificar um problema quântico complexo. Um importante trabalho que relata sobre esse assunto foi feito por P. Anderson na referência [4]. Um exemplo de quase-partícula está em como vemos os elétrons na banda de valência de diversos materiais. Nesse caso é como se existissem quase-partículas carregadas positivamente: os chamados buracos ou lacunas. Outras quase-partículas ou excitações coletivas são os fônons, partículas derivadas das vibrações dos átomos em sólidos, e os plasmons, partículas derivadas das oscilações em plasmas, dentre outras [3]. Usaremos o conceito de quase-partícula neste trabalho uma vez que lidaremos com fortes interações eletrônicas, que reescalam quantidades como a massa de elétrons. Veremos que essas interações fortes levarão o material a passar por transições de fase que não são descritas pela teoria de bandas.

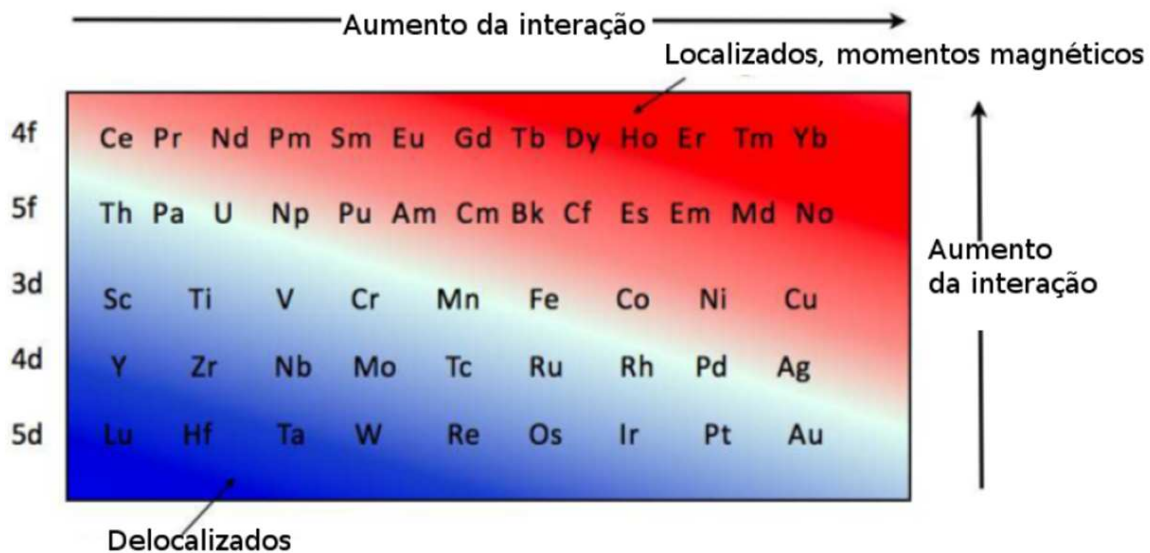


Figura 1.2: Diagrama de Kmetko-Smith [5]. Figura editada a partir de [6].

A teoria de bandas descreve bem diversos sistemas, mas é insuficiente para explicar propriedades de alguns materiais, que, segundo ela, seriam metais, mas experimentalmente possuem comportamentos de um isolante. Então, pode-se ir além desse tratamento, considerando, por exemplo, a interação entre elétrons, que pode dificultar a propagação eletrônica e que é tratada de forma aproximada na teoria de bandas. Alguns materiais onde a interação é relevante possuem átomos correspondentes aos metais de transição, actínídeos e terras-raras. Esses materiais têm orbitais d ou f semi-preenchidos e estreitos, nos quais a repulsão coulombiana entre elétrons é mais intensa que orbitais s e p . Na figura

1.2 é mostrado o diagrama de Kmetko-Smith [5], onde elementos da tabela periódica são organizados de acordo com seus orbitais eletrônicos e intensidade da interação eletrônica (maior interação implica em maior localização, indicada pelas setas na figura 1.2). Em geral, cada átomo desse diagrama tende a ter momentos localizados. Quando vários átomos são unidos para formar um material, os estados de cada átomo ficam sobrepostos uns aos outros, fazendo com que haja elétrons itinerantes entre eles. O orbital d possui estados mais estendidos que o orbital f . Por causa disso, os elementos na parte de baixo à esquerda da figura 1.2 terão elétrons mais itinerantes. Quando a interação é grande, principalmente em átomos com orbitais f semi-preenchidos, os elétrons serão menos itinerantes e haverá momentos magnéticos no sistema. Os elementos na diagonal principal da figura 1.2 dão origem a materiais onde a energia de propagação dos elétrons é comparável à repulsão coulombiana. Um exemplo é o óxido de vanádio, V_2O_3 , onde o vanádio V está próximo da diagonal principal da figura 1.2. Experimentalmente, é possível controlar a pressão no V_2O_3 [7,8], simulando o controle da energia cinética, fazendo esse material passar por uma transição metal-isolante quando a interação se tornar mais relevante que a energia cinética dos elétrons. O isolante em questão é o chamado isolante de Mott, que exploraremos a seguir e é fisicamente diferente do isolante de bandas definido anteriormente.

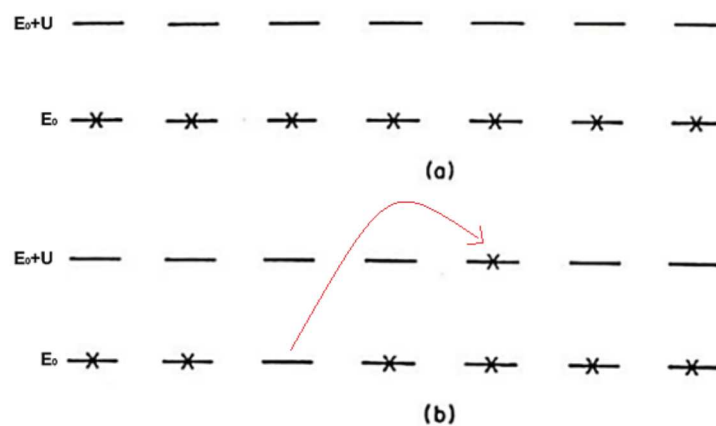


Figura 1.3: Rede cristalina onde cada sítio possui dois níveis de energia: o elétron tem energia E_0 no caso de ocupação simples e energia $E_0 + U$ em caso de ocupação dupla. (a) Em semi-preenchimento, ou seja, quando o número de elétrons é igual ao número de sítios, os elétrons, representados por "x", ocupam todos os sítios da rede no estado fundamental. (b) Estado excitado do sistema, em que um dos sítios tem dupla ocupação, ou seja, o segundo elétron desse sítio tem energia $E_0 + U$.

Veremos ao longo desta tese que é difícil tratar todas as interações em um material, sendo necessário fazer várias simplificações para entendermos o que está acontecendo. Seguindo esse pensamento, ao invés de tratarmos todos os acoplamentos entre os orbitais atômicos de um sólido, podemos considerar o limite atômico em que cada sítio tem a

energia do estado fundamental do átomo. Entender o que ocorre no limite atômico facilita entender fases como o isolante de Mott. Um meio de entender esquematicamente o isolante de Mott é mostrado na figura 1.3. Nessa figura é representado uma rede onde cada sítio tem dois níveis de energia com E_0 no caso de ocupação simples e $E_0 + U$ a energia de um segundo elétron em um sítio já ocupado. Para respeitar o princípio de exclusão de Pauli, cada estado em um sítio possui um elétron com spin contrário ao elétron de outro estado. Por simplicidade, estamos desconsiderando qualquer flutuação de energia em torno dos estados relatados, o que na prática seria considerar uma temperatura nula e desconsiderar hibridizações entre os sítios. Em semi-preenchimento, cada sítio da rede possui um elétron, representado por um “x”. Na figura 1.3 (a) todos os elétrons possuem menor energia E_0 , estando o sistema no estado fundamental. Quando consideramos a repulsão eletrônica entre elétrons no mesmo sítio, ao deslocar um elétron de um sítio para outro, que já está ocupado, o segundo elétron tem energia $E_0 + U$, como na figura 1.3 (b). Assim, é necessário vencer a repulsão U para ir do estado fundamental do sistema para o primeiro estado excitado. Com a repulsão coulombiana U grande, cada sítio tende a ter ocupações simples no estado fundamental, ou seja, cada elétron tende a ficar localizado em um sítio, sendo esse um isolante de Mott. Os efeitos da interação dos elétrons de uma rede cristalina pode ser entendido de uma maneira simplificada: é uma energia necessária para o sistema chegar num estado excitado. No caso, a energia de interação atua formando um *gap* de energia, que dificulta a excitação dos elétrons. Em outras palavras, a interação local, foco desta tese, pode provocar um estado onde os elétrons precisam ganhar uma energia U para excitar, estado este chamado de isolante de Mott [9].

Queremos ir além do limite atômico discutido acima, considerando o *hopping* entre os sítios. No entanto, devido à interação, sistemas fortemente correlacionados não possuem solução trivial. Um modelo simples de elétrons em um sólido que considera a competição entre energia cinética e energia de interação elétron-elétron quando estes estão em um mesmo sítio da rede é o modelo de Hubbard. Para resolver esse modelo pode-se fazer o uso da *Dynamical Mean Field Theory* (DMFT) [10]. Nessa metodologia, mapeamos o problema de uma rede com vários graus de liberdade em um modelo de uma impureza envolvida por um banho de elétrons livres, podendo reescrever as equações do sistema de forma autoconsistente. Quando essa metodologia foi proposta, o modelo de uma impureza tinha sido muito estudado para descrever impurezas magnéticas em metais não magnéticos. O mapeamento da DMFT torna-se exato no limite em que o número de coordenação da rede z , ou número de primeiros vizinhos de um sítio, vai a infinito. Trata-se de uma aproximação local, que não leva em consideração flutuações espaciais, porém mantém a dependência com a energia, levando em consideração flutuações temporais, justificando o termo “dinâmico” da DMFT. Tais flutuações são importantes porque os elétrons podem

“pular” da impureza para o banho e voltar. Para uma interação U pequena, a solução do modelo de Hubbard corresponde a um sistema metálico em que o termo de energia cinética domina sobre o de interação. À medida que U aumenta, o sistema passa por uma transição metal-isolante de Mott. A implementação da DMFT que usaremos permite o controle da dopagem do sistema, ao mudar o potencial químico da rede.

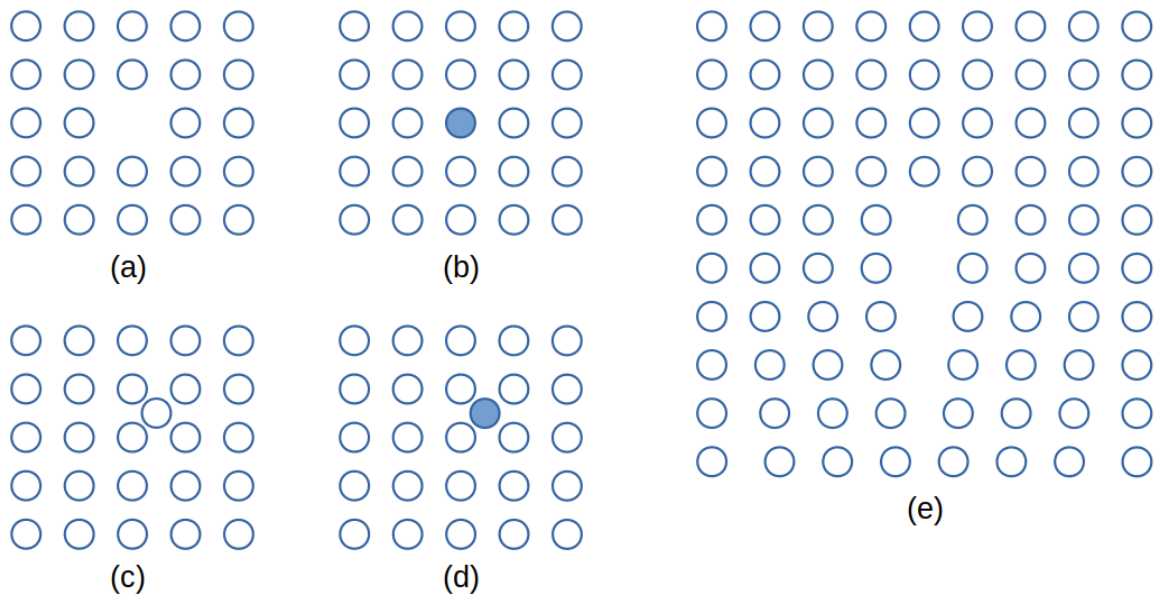


Figura 1.4: Diferentes configurações de uma estrutura cristalina. (a) Vacância. (b) Substituição. (c) Inserção de átomos do mesmo tipo da rede. (d) Inserção de átomos diferente do existente na rede. (e) Sequência incompleta de átomos gerando um reajuste dos outros átomos. Figura editada a partir de [2].

O modelo de Hubbard e a metodologia DMFT sozinhos não capturam todos os aspectos de um sólido. Na natureza é normal encontrar sólidos cristalinos que possuem várias imperfeições na escala atômica, sendo necessário técnicas além da formulação original do modelo de Hubbard ou da DMFT para o entendimento desses materiais. Essas imperfeições também podem ser provocadas propositalmente afim de permitir diferentes estados da matéria. Como exemplo, heterogeneidades espaciais fazem com que os elétrons tenham diferentes caminhos ao propagar, o que gera propriedades diferentes de um cristal sem imperfeições. Algumas dessas heterogeneidades são mostradas na figura 1.4. Quando geramos uma vacância no material, temos a figura 1.4(a). Ao trocarmos um átomo da rede por um átomo diferente, temos uma substituição, assim como descrito na figura 1.4(b). Uma rede pode possuir um átomo adicional entre os sítios, que pode ser do mesmo tipo que os outros átomos, assim como na figura 1.4(c), ou um outro tipo de átomo, assim como na figura 1.4(d). Existem também imperfeições quando uma carreira de átomos não existe

a partir de um ponto, fazendo com que os outros átomos se ajustem para que o cristal tenda a seguir sua organização natural (ver figura 1.4(e)). Algumas dessas imperfeições podem fazer com que o material tenha mais elétrons ou buracos. A dopagem normalmente vem acompanhada de efeitos de desordem, sendo difícil a distinção de ambos os efeitos do ponto de vista experimental. Nesse caso, a desordem pode ser gerada pela substituição de átomos de maneira aleatória na rede. De uma maneira geral, a desordem pode ser gerada por qualquer um dos tipos de imperfeições descritas na figura 1.4. Não é o foco deste trabalho estudar com profundidade todos os tipos de desordem existentes, o que seria um trabalho árduo. Então, vamos escolher um tipo de desordem que é possível de ser tratada com as ferramentas matemáticas ou numéricas que temos acesso. A desordem que vamos trabalhar nesta tese é tal que a energia de cada sítio é heterogênea. Uma maneira de visualizar isso é considerar variações de E_0 para cada sítio na figura 1.3. A variação de E_0 simula potenciais aleatórios no sistema [11]. Quando o potencial aleatório tem vários poços profundos, elétrons ficam localizados nesses poços. Como os poços estão distribuídos aleatoriamente na rede, sítios com energias E_0 próximas, por onde os elétrons poderiam propagar, em geral, estão espacialmente distantes. Dessa forma, a desordem é capaz de localizar os elétrons do material, fazendo o sistema passar por uma transição metal-isolante. Um dos primeiros modelos a descrever efeitos de desordem em um material foi proposto por P. Anderson [12] e por isso, hoje em dia, os materiais que são isolantes por efeito da desordem são conhecidos por isolantes de Anderson.

Ao modelo de Hubbard pode-se incluir um termo que trata a desordem, obtendo o chamado modelo de Anderson-Hubbard. Para descrever o efeito da desordem usando extensões da DMFT são considerados vários problemas de uma impureza com diferentes energias E_0 . Então é calculado o valor típico ou mais provável da densidade de estados local, que carrega informações sobre os estados estendidos do sistema. Essa metodologia em que valores típicos são calculados é conhecida como *Typical Medium Theory* (TMT) e pode ser facilmente combinada com a DMFT [13]. É possível calcular também a média aritmética da densidade de estados local e obter o comportamento dos estados localizados somados aos estados estendidos da rede, ou seja, com a TMT pode-se estudar como estados estendidos se tornam localizados por efeitos da desordem. Com essas metodologias, DMFT e TMT, pode-se descrever tanto os efeitos da interação U no sítio como efeitos da desordem, podendo-se observar um isolante de Anderson-Mott. Dependendo do jogo de parâmetros, a desordem pode fazer com que um isolante de Mott se torne um metal, ou a desordem pode atuar conjuntamente com os efeitos da interação formando um isolante de Anderson-Mott, ou a interação forte pode dominar e fazer o sistema se tornar um isolante de Mott. Ao acrescentar dopagem, todas essas mudanças de configurações do sistema irão ser modificadas. Do ponto de vista experimental é difícil ter o controle de todos

esses parâmetros. A própria identificação desses parâmetros já possui dificuldades, uma vez que a dopagem causa simultaneamente efeitos de desordem, sendo difícil a distinção de cada efeito. Do ponto de vista teórico é difícil tratar esse problema, seja porque não há tantas ferramentas matemáticas para tratar os efeitos da desordem, interação e dopagem simultaneamente, ou porque os cálculos existentes podem exigir muito recurso computacional.

De modo resumido, esta tese pretende tratar simultaneamente efeitos de interação, desordem e dopagem em materiais. Para isso, será usado o modelo de Anderson-Hubbard. Não exploraremos um material específico. Exploraremos uma rede conhecida por rede de Bethe, de onde podemos extrair os resultados de nosso interesse e que já será suficiente para extrair muita informação de sistemas interagentes desordenados dopados. Para tratar esse modelo usamos a metodologia DMFT junto com a metodologia TMT. Os resultados encontrados fornecem a distribuição de densidade de estados local, e seus valores típicos e médios, que consideram respectivamente, estados estendidos na rede e todos os estados, tanto estendidos quanto localizados. Com essas quantidades conseguimos extrair todas as informações pertinentes do nosso trabalho. Identificamos transições de fases e diversas regiões com características físicas diferentes entre si. Com todos esses resultados foi possível construir diagramas de fase que resumem todas as propriedades do modelo de Anderson-Hubbard encontradas nesta tese.

Este documento está organizado da seguinte forma:

1. No capítulo 2 apresentaremos uma revisão da literatura, incluindo motivações experimentais sobre o isolante de Mott, efeitos da dopagem e o isolante de Anderson, bem como trabalhos teóricos sobre o mesmo tema.
2. O capítulo 3 é destinado à descrição da metodologia utilizada no nosso trabalho, sendo apresentada a DMFT para o modelo de Hubbard e a DMFT junto com a TMT para o modelo de Anderson-Hubbard.
3. O capítulo 4 é destinado à discussão dos nossos resultados.

Por fim, apresentaremos nossas conclusões e perspectivas futuras.

Capítulo 2

Revisão da Literatura

Existem vários mecanismos capazes de fazer um material passar por uma transição metal-isolante. Como exemplo, temos a dopagem, que pode deslocar os estados para longe do nível de Fermi, a repulsão coulombiana entre os elétrons, que pode repelir portadores de carga próximos uns dos outros, ou até efeitos de desordem, que localiza a função de onda em cada sítio. Iremos ver neste capítulo resultados já conhecidos da literatura que serviram como motivação para o presente trabalho no estudo de diferentes fases da matéria. Começaremos com trabalhos experimentais de compostos que apresentam forte repulsão coulombiana e depois iremos estudar como esses efeitos de interação coexistem em materiais que também possuem efeitos de dopagem e desordem. Nas subseções posteriores será mostrado como o entendimento entre a interação, dopagem e a desordem se deu do ponto de vista teórico.

2.1 Experimentos envolvendo interação eletrônica

Nesta seção é feita uma revisão de trabalhos experimentais que envolvem efeitos da interação eletrônica em sólidos. O estudo da interação é importante uma vez que sua variação provoca transições de fase na matéria. Além disso, a interação é fundamental para a formação do isolante de Anderson-Mott, que será um alvo de estudo desta tese e daremos um foco maior em seções posteriores.

Em 1937, nos primórdios da Física do Estado Sólido, já era destacada a importância dos efeitos de interação após Boer e Verway chamarem a atenção para as surpreendentes propriedades de materiais com bandas 3d parcialmente preenchidas, tal como o NiO [14]. As classes de materiais onde a interação é forte são as que os elétrons passam mais tempo próximos espacialmente, como as que apresentam orbitais d ou f semi-preenchidos. Nesses

orbitais os elétrons são mais localizados e “sentem” mais fortemente a repulsão coulombiana. Alguns exemplos de materiais com tal comportamento são os que contêm terras raras, actínídeos, metais de transição e seus óxidos. Essas correlações eletrônicas podem gerar consequências relevantes como supercondutividade, fase isolante de Mott, ordenamento de carga, transições de fase não descritas pela teoria de bandas, entre outros [15]. Daremos um foco maior em efeitos de interação local, ou seja, quando se considera elétrons com forte repulsão no mesmo sítio, uma vez que com esse tipo de interação há a formação do isolante de Mott e é o tipo de interação que aparecerá neste trabalho. Interações de longo alcance podem dar origem a outros comportamentos na matéria, como ordenamento de carga, que deixaremos para trabalhos posteriores. No isolante de Mott existe um *gap* no nível de Fermi com um tamanho relacionado ao valor da interação eletrônica local [15].

Trabalhos da década de 50 já identificavam transições metal-isolante em óxidos, relacionadas com a interação elétron-elétron pela presença de orbitais *d* semi-preenchidos [16]. Um exemplo pode ser visto na figura 2.1: há uma variação de várias ordens de grandeza da condutividade em função da temperatura em óxidos de vanádio e titânio, ambos metais com orbitais *d* semi-preenchidos, representando uma transição metal-isolante. Pode-se ver também histereses na condutividade, representando que houve transição de fase descontínua ao variar a temperatura. Apesar de uma descrição mais precisa desses compostos requerer considerar especificidades de sua estrutura eletrônica, a variação brusca da condutividade possui como fator relevante a interação elétron-elétron forte presente nesses materiais.

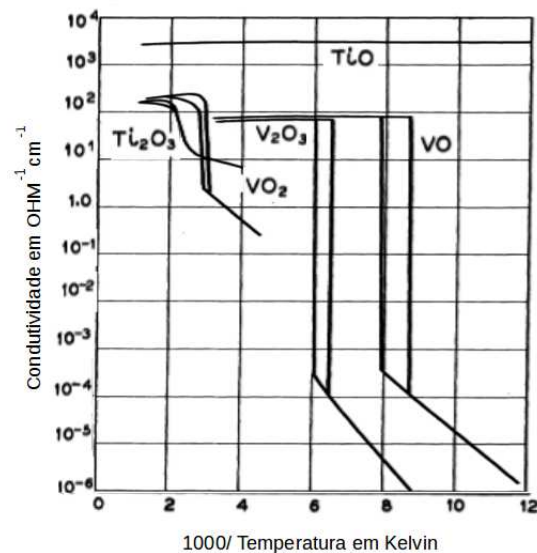


Figura 2.1: Condutividade em função do inverso da temperatura para óxidos de vanádio e titânio. Figura retirada de [16].

Há compostos que apresentam um pico de quase-partícula na densidade de estados próximo ao nível de Fermi na fase metálica. A formação desse pico e seu desaparecimento,

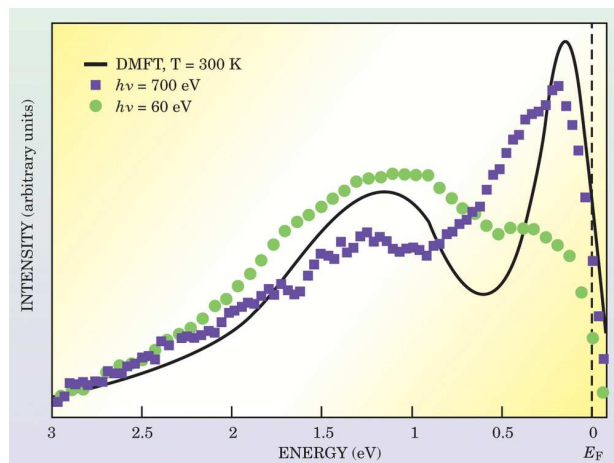


Figura 2.2: Espectro de fotoemissão próximo do nível de Fermi para o V_2O_3 . $h\nu$ representa a energia do fóton incidente no material. As curvas pontilhadas são resultados experimentais e a curva contínua é uma descrição da DMFT. Figura retirada de [19], que é baseado nos resultados da referência [17].

abrindo um *gap*, estão ligados à presença de interação entre os elétrons na rede. Experimentalmente, a primeira observação desse pico foi apresentada no início dos anos 2000 no trabalho [17] para o composto V_2O_3 , em que mediu-se o espectro de fotoemissão na fase metálica para vários valores de energia do fóton incidente. Podemos ver a formação desse pico na figura 2.2. É conhecido que um pico como esse existe quando há um acoplamento de uma impureza com os elétrons em seu entorno, formando um estado singleto entre seus momentos magnéticos, pelo efeito Kondo [18]. No caso apresentado, o sistema se comporta como se existisse uma impureza acoplada com os férmions em sua volta, mesmo não havendo uma impureza real na rede cristalina. A medição desse pico é um indicativo de que o sistema está se comportando como um metal correlacionado, podendo se tornar um isolante com o aumento da interação entre elétrons. Também podemos ver na figura 2.2 a formação de uma banda em torno de 1.25 eV, afastada do nível de Fermi. Essa é uma banda de Hubbard que representa os estados preenchidos de mais baixa energia do material. Para fins comparativos, é mostrado na mesma figura um cálculo teórico da DMFT (*Dynamical Mean Field Theory*), metodologia que estudaremos com maior detalhe posteriormente, tendo um bom acordo qualitativo com as previsões dos picos encontrados experimentalmente.

Existem várias regiões num diagrama de fase de um material com forte interação eletrônica. Um método de observar como um sistema vai mudar em função das interações é aplicando uma pressão no material. Nessa situação, é assumido que existe uma competição entre a probabilidade de um elétron propagar pelos sítios da rede e a repulsão que um elétron terá em um sítio, caso esse sítio já esteja ocupado. A pressão atuará aproximando

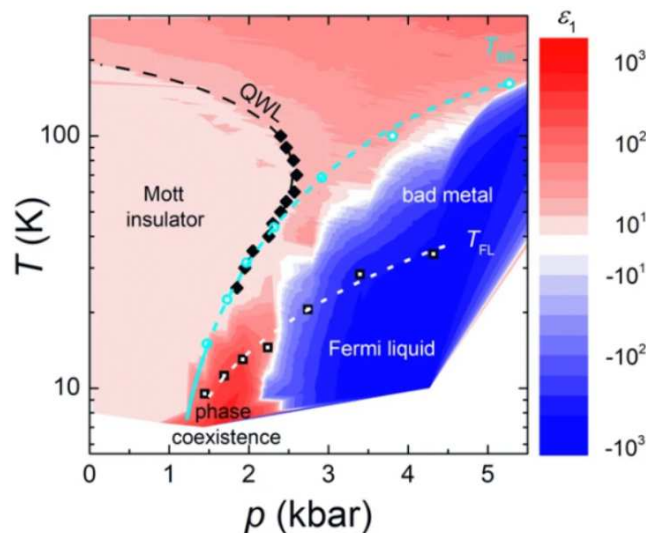


Figura 2.3: Diagrama de fase da temperatura em função da pressão para o κ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu $_2$ (CN) $_3$. O código de cor é a resposta dielétrica do material. Figura retirada de [27].

os sítios de um material, fazendo ser mais provável que um elétron propague, o que seria equivalente a diminuir a repulsão eletrônica em um sítio. Dessa maneira, com o controle da pressão, é possível ter uma intuição do que acontece ao mudar a interação eletrônica de um material. Experimentalmente é possível construir um diagrama de fase onde são identificadas várias fases de um material que possui forte interação coulombiana. Na figura 2.3 podemos ver a formação do isolante de Mott e um líquido de Fermi para baixas temperaturas T . Considerando T pequeno, existe uma região que pode ser interpretada como uma região de coexistência entre o isolante de Mott e o líquido de Fermi [15, 20, 21]. Quando a temperatura aumenta, a região de coexistência desaparece. Nesse caso, a separação entre o isolante de Mott e outras regiões é contínua e delimitada pela linha de Widon [20–24], representada por QWL na figura 2.3. No lado metálico, a curva em cian mostra a temperatura de Brinkman-Rice T_{BR} que sinaliza a destruição térmica de quasipartículas do estado metálico do material [25, 26]. T_{FL} separa o regime não líquido de Fermi, representado na figura 2.3 por *bad metal*, do regime líquido de Fermi. As diferentes cores correspondem à resposta dielétrica do material, que possui valores diferentes dependendo da região do diagrama. Em seções posteriores iremos ver que esse diagrama de fase pode ser calculado numericamente.

Tratando de materiais bidimensionais, é possível identificar uma relação estreita entre o mecanismo que descreve a transição metal-isolante e a interação elétron-elétron em vários materiais [28]. Para isso vamos verificar primeiro a relevância da interação eletrônica em sistemas como 2DEG (*two-dimensional electron gas*), existentes em MOSFET's (*Metal*

Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) de Si. Quando a densidade de elétrons n_s diminui muito, a interação elétron-elétron E_{e_e} torna-se dominante quando comparada à energia de Fermi E_F . Para MOSFET's de Si temos [28]

$$E_{e_e} \approx \frac{e^2}{2\epsilon} (\pi n_s)^{1/2}, \quad (2.1)$$

enquanto

$$E_F = \frac{\pi \hbar^2 n_s}{2m_b}, \quad (2.2)$$

onde e é a carga do elétron, ϵ é a constante dielétrica e m_b é a massa efetiva do elétron na banda. Ou seja, para essas amostras, a razão adimensional $r_s = E_{e_e}/E_F$ é proporcional a $1/\sqrt{(n_s)}$, o que significa que a interação se torna mais importante à medida que n_s diminui. Assim, a interação eletrônica pode ser relevante no estudo do comportamento desses sistemas.

Até a década de 90, eram discutidos se sistemas 2DEG passariam por uma transição metal-isolante e qual seria o mecanismo necessário para a ocorrência desse efeito, como a interação entre as partículas ou então se seria causado por desordem, ou seja, se seria devido a impurezas presentes no composto. Em 1995, S. V. Kravchenko e colaboradores publicaram a observação de transição em 2DEG para o caso de concentração baixa de impurezas e com campo magnético nulo [29]. Com tal fato, a hipótese de transição causada por desordem foi reavaliada, reforçando a possibilidade da transição ser gerada por interação. Isso motivou a realização de experimentos e teorias que buscassem um melhor entendimento de 2DEG, além do obtido até então.

Na figura 2.4, vemos o comportamento da resistividade com a temperatura ao variar a densidade eletrônica e o campo magnético em amostras de MOSFETs. Para uma alta densidade de elétrons do 2DEG, a resistividade cresce com a temperatura, sendo isso característico de um metal; o decréscimo da resistividade com o crescimento da temperatura, que ocorre para densidade eletrônica baixa, é característica de um isolante (figura 2.4 (a)). Na figura 2.4 (a), há uma curva destacada que representa uma densidade crítica de elétrons igual a $n_c = 9.6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ e ela está próxima da transição metal-isolante. Na figura 2.4 (b) foi fixada a densidade de elétrons em $n_s = 8.83 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ e medida a resistividade em função da temperatura para diferentes valores do campo magnético externo, aplicado paralelamente ao sistema de elétrons bidimensionais [30]. A resistividade decresce com o aumento da temperatura a partir de $T > T^* \approx 2\text{K}$, possuindo um fraco comportamento isolante independente do campo magnético do sistema. Para T crescente quando $T < T^*$, a resistividade cresce, para um campo magnético nulo, e é decrescente, para campo magnético de 1.4T. Esses experimentos indicam uma transição entre estados metálicos e isolantes num sistema 2DEG, com baixo nível de impureza ou fazendo o controle do

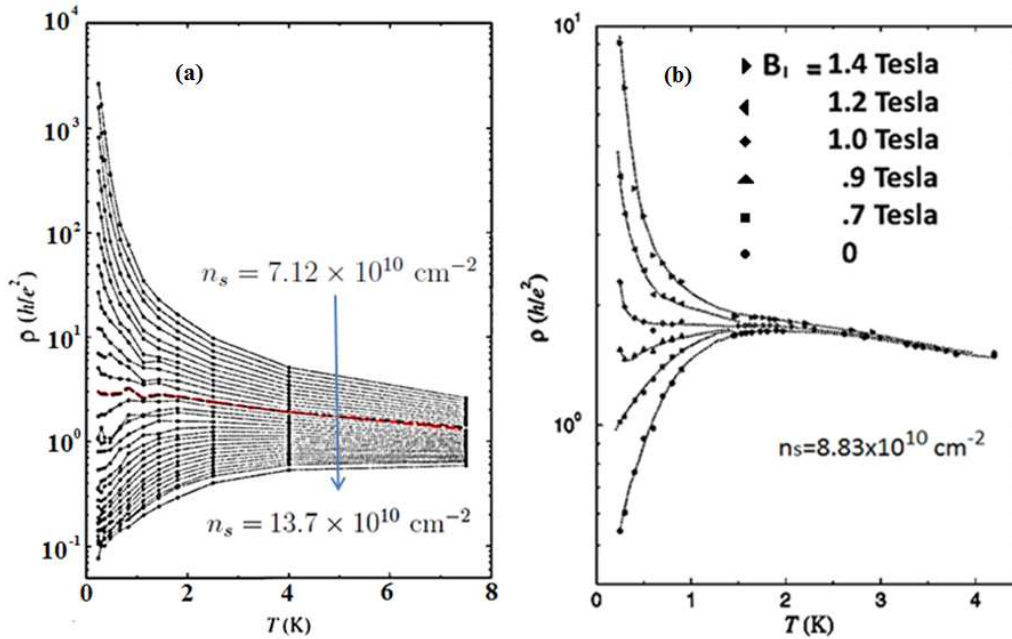


Figura 2.4: Gráficos de resistividade em função da temperatura. Em (a), cada curva representa uma densidade de elétrons n_s , que cresce das curvas superiores até as curvas inferiores. Em (b), cada curva representa um campo magnético diferente. Em (a) o campo magnético é nulo, enquanto em (b) a densidade de elétrons é mantida em $n_s = 8.83 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. As figuras foram retiradas de [29] e [30], respectivamente.

campo magnético.

Em 1997, Dragana Popović e colaboradores confirmaram tais resultados identificando uma transição ao se reduzir a concentração de impurezas do 2DEG, juntamente com o controle do campo magnético em MOSFETs de Si [31]. No ano seguinte, Y. Hanein e colaboradores obtiveram resultados semelhantes que indicam transições em 2DEG formados em heteroestruturas de GaAs, sendo buracos os portadores de carga [32].

Em alguns casos, para temperaturas baixas, pode-se descrever um sistema correlacionado pela teoria do líquido de Fermi, em que as excitações do sistema interagente são mapeadas nas excitações de um sistema não interagente [33]. Nessa teoria as variáveis dinâmicas do sistema, como o momento magnético ou a massa dos portadores de carga, são renormalizadas. É como se existisse um novo conjunto de quase-partículas não interagentes, associadas a novos parâmetros, propagando-se no meio.

Na referência [34], Shashkin e colaboradores apresentam medidas de massa efetiva m^* em função da densidade dos portadores de carga para 2DEG. Para valores de densidade eletrônica acima de um valor crítico n_c , o sistema se comporta como um líquido de Fermi sendo m^* finito, como pode ser visto na figura 2.5; quando $n_s \rightarrow n_c$, há uma divergência de m^* , mostrando que há localização dos elétrons já que as partículas estariam muito pesadas

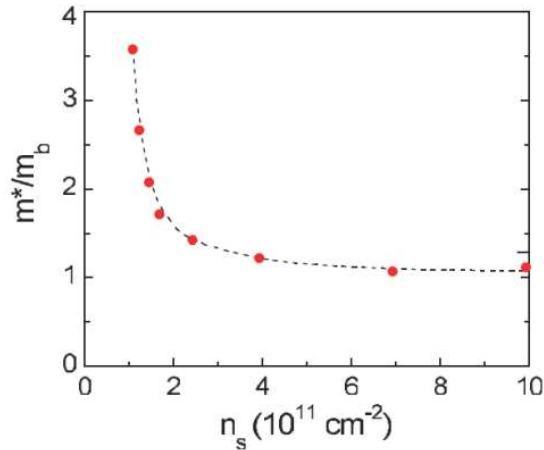


Figura 2.5: Massa efetiva em função da densidade de elétrons n_s . m_b é a massa do elétron na banda de condução que nesse material vale $0.19m_e$, onde m_e é a massa do elétron livre. Figura retirada de [34].

para propagar. A diminuição da densidade de portadores implica em uma maior interação entre as partículas, em comparação com a energia cinética, resultando na divergência da massa efetiva e na transição metal-isolante.

Estudamos até aqui resultados experimentais que mostram como a interação eletrônica atua em diversos compostos. Nas próxima seção estudaremos materiais que além da interação também possuem efeitos de desordem.

2.2 Experimentos envolvendo desordem e interação

A dopagem também tem grandes influências nas propriedades eletrônicas de um material fortemente correlacionado. Ao variar a ocupação eletrônica é possível fazer surgir bandas de energia em torno do nível de Fermi. Em um isolante, como o de Mott, isso pode preencher com estados o *gap* em torno do nível de Fermi e fazer o material conduzir portadores de carga assim como em um metal. Podemos ver isso na figura 2.6 onde é mostrado o espectro de fotoemissão para diferentes valores de dopagem. Em baixas energias podemos ver que na ausência de dopagem existe um *gap* em uma grande faixa do espectro, havendo apenas uma banda em energias mais altas. Essa banda é preenchida com buracos por estar acima do nível de Fermi. Nessa configuração o sistema é um isolante. À medida que a dopagem com elétrons aumenta surge uma banda em torno do nível de Fermi e o sistema deixa de ser um isolante. Isso demonstra ser possível fazer um material passar por uma transição metal-isolante ao acrescentar dopagem no sistema. Experimentalmente é difícil desassociar a dopagem de outros fenômenos como a desordem, que será detalhado mais adiante.

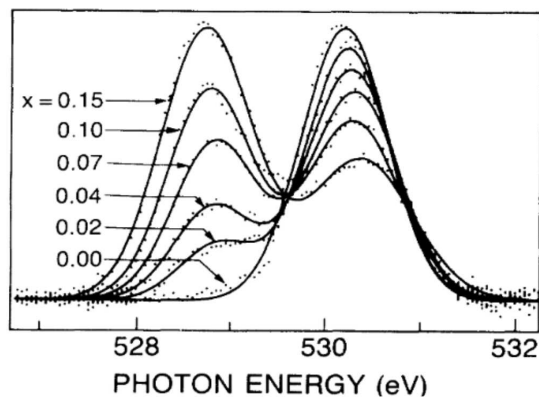


Figura 2.6: Medidas de fotoemissão em $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ mostrando a dopagem x deslocando os níveis de energia do sistema. Isso faz surgir uma banda de energia devido à dopagem. Figura retirada de [35].

Efeitos de desordem podem ocorrer de diversas maneiras e em diversos sistemas na natureza. Alguns tipos de desordem são a topológica, macromolecular, magnética, dentre vários outros [36]. Esses tipos de desordem podem ser medidos experimentalmente em diferentes sistemas como ondas de luz [37–41], micro-ondas [42, 43], ondas de som [44], ondas de matéria [45] e gases de elétrons [46]. O tipo de desordem que temos interesse neste trabalho é tal que consegue alterar os níveis de energia em cada sítio de uma rede cristalina, simulando poços de potenciais por onde elétrons podem se localizar. Devemos considerar que o estudo de desordem em um sistema dificilmente é feito de maneira isolado. Isso ocorre pois num sistema real as partículas já estão envolvidas com outros efeitos, como a interação entre elas. Então, estudaremos materiais que, apesar de terem vários fatores para determinar seu comportamento, a desordem terá importante papel ao determinar suas propriedades.

De modo geral, qualquer desordem localiza um sistema 1D ou 2D. Para um metal com propriedades tridimensionais, existe um limite de desordem a partir do qual este comportamento metálico não é possível. Nessa situação, o aumento da desordem faz o livre caminho médio dos elétrons diminuir até que o livre caminho médio se torne comparável à distância interatômica [47]. Quando isso ocorre o sistema passa por uma transição metal-isolante [9]. Nesse caso, o isolante gerado pela presença de desordem é conhecido como isolante de Anderson. Uma outra forma de notar esse problema está em entender que a desordem não localiza todos os estados do sistema igualmente. Quando não existe desordem (figura 2.7(a)), a densidade de estados de um metal, por exemplo, representa estados estendidos do material. Para pequenas desordens alguns estados do sistema são localizados e outros são estendidos (figura 2.7(b)). Os primeiros estados a se localizarem são aqueles que se encontram nas bordas das bandas. O limite entre os dois

tipos de estados é conhecido como borda de mobilidade [48]. À medida que a desordem aumenta, mais estados se localizam e as bordas de mobilidade se movem para o centro da banda, até que todos os estados tornam-se localizados. O sistema passa assim por uma transição de fase metal-isolante de Anderson, induzida pela desordem. Diferentemente do isolante de Mott, o isolante de Anderson não necessita ter *gap* no nível de Fermi e toda a sua densidade de estados é relacionada a estados localizados do sistema. Um método de observar experimentalmente a borda de mobilidade pode ser através da geração de desordem em sistemas de átomos frios [49].

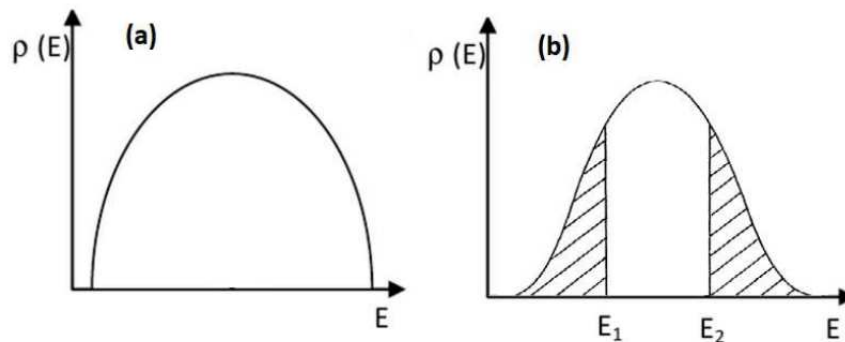


Figura 2.7: Densidade de estados em função da energia. (a) Caso sem desordem onde todos os estados são estendidos. (b) Caso com desordem: E_1 e E_2 são fronteiras onde os estados estendidos (região não riscada) estão se tornando localizados (região riscada). Figura retirada de [48].

Como vimos, assim como a interação, a desordem pode induzir uma transição metal-isolante. Pode-se esperar que a presença simultânea desses dois efeitos seja ainda mais eficaz na localização de elétrons. No entanto, não é necessariamente assim. Por exemplo, a desordem fraca é capaz de enfraquecer o efeito das correlações, uma vez que redistribui os estados de um sítio, fazendo surgir estados onde antes era um *gap* formado por efeitos da interação. Isso pode fazer um isolante de Mott se tornar um metal já que o *gap* será preenchido por estados. Por outro lado, as interações de curto alcance geram uma transferência de peso espectral para as sub-bandas de Hubbard e o *gap* entre as bandas aumenta. Assim será necessário mais desordem para fazer surgir estados ao longo do *gap*. Na prática, apesar dos dois efeitos sozinhos localizarem a função de onda eletrônica, eles combinam entre si para formar vários outros fenômenos [50–56]. Isso representa desafios fundamentais para a teoria e experimentos do tema, até mesmo além da física da matéria condensada [28, 50, 51]. Então, faz-se necessário um estudo detalhado de como a interação e a desordem atuam em um material separadamente e de que forma esses efeitos podem se combinar. Uma vez que já falamos da interação na seção anterior vamos focar essa seção nos trabalhos de desordem.

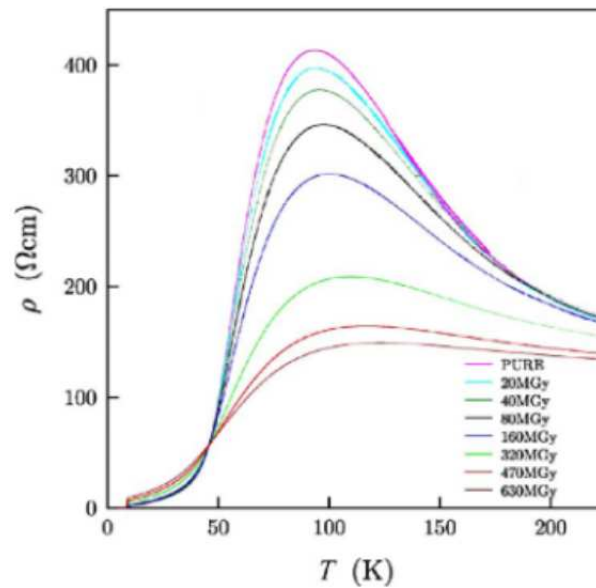


Figura 2.8: Resistividade em função da temperatura para diferentes valores de desordem. Uma amostra de κ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu(SCN) $_2$ é irradiada por raios X mudando os estados eletrônicos da rede. A desordem é inferida de acordo com a intensidade da radiação que o material recebe, ou seja, quanto mais radiação maior é a desordem eletrônica. Figura retirada de [57].

Apesar da desordem localizar os estados de um material ela atuará de maneira diferente dependendo do sistema. Num material que já é isolante por outro mecanismo ela pode contribuir para dificultar ainda mais a passagem dos elétrons. Isso ocorre pois além dos mecanismos para o material já ser isolante os elétrons estarão presos em poços de potenciais. Por outro lado, existem materiais onde a presença de desordem pode favorecer algum tipo de metalização do sistema, uma vez que a desordem pode diminuir a resistividade de um material. Podemos ver isso na figura 2.8 onde é mostrada a resistividade em função da temperatura para vários valores de desordem. Para temperaturas baixas, um pouco menor que 50 K, a resistividade é pequena. Nesse caso, existe uma leve tendência do aumento da desordem fazer crescer a resistividade ou até manter ela inalterada. Já para o caso de temperaturas mais altas o processo é diferente. Ao fixar uma temperatura podemos ver que quando a desordem cresce a resistividade é cada vez menor indicando que a desordem pode fazer com que um material tenda a algum tipo de metalização.

É difícil do ponto de vista experimental saber com precisão qual fenômeno está determinando o comportamento de uma medição. A própria dopagem, que já tem seus efeitos característicos, também pode ser capaz de gerar efeitos de desordem, dificultando saber se algum fenômeno medido é gerado pela dopagem ou pela desordem. É possível ter uma noção de como a dopagem gera desordem em materiais. Podemos ver isso na

figura 2.9 que considera diferentes concentrações de Mn em $Ga_{1-x}Mn_xAs$. Nesse caso, átomos são acrescentados de maneira não periódica numa rede cristalina, alterando o nível de energia de um sítio. Ao fazer medições da DOS local nesse material é possível ver que os estados do sistema podem se manifestar de maneira desordenada. Para pouca dopagem, 1,5% de Mn , os estados ainda se manifestam de maneira ordenada, caracterizado pelo excesso de cor azul na DOS local. Quando a dopagem aumenta, para 3% ou 5% de Mn , cresce o número de flutuações da DOS local, caracterizado pelo excesso de picos em vermelho da figura. Ou seja, quando a desordem ou a dopagem é pouca a DOS local tende a não variar tanto ao longo da rede. À medida que a concentração de impurezas aumenta, a DOS local passa a variar muito de um sítio para o outro.

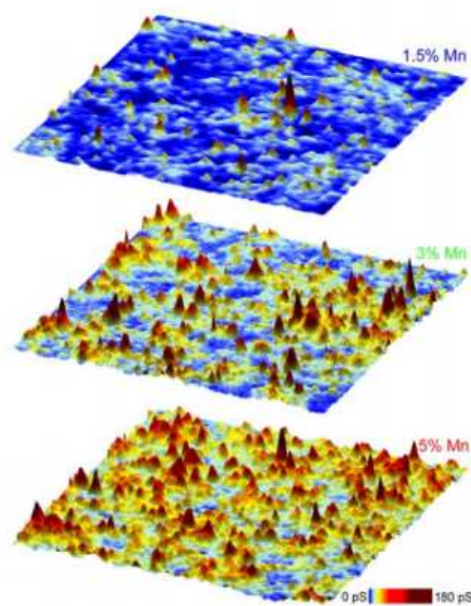


Figura 2.9: Densidade de estados local próximo ao nível de Fermi, medida usando STM (*Scanning tunneling microscope*) quando é aumentada a concentração de Mn em amostras de $Ga_{1-x}Mn_xAs$. Figura retirada de [58].

Em experimentos, efeitos de correlação e desordem atuam de forma conjunta, por exemplo, em transição metal-isolante observada em semicondutores dopados tais como Si:P e SiB, [59] e em MOSFETs ou heteroestruturas semicondutoras [28,60]. Mais recentemente, a observação de desordem fazendo um isolante ir para uma fase metálica tem sido reportada em sistemas de Mott, tal como 1T-TaS₂ [61] ou Sr₃Ir₂O₇ [62]. Podemos olhar para a figura 2.10 para entendermos mais como é a atuação da desordem em sistemas do tipo de Mott. A figura 2.10(a) mostra esquematicamente o que acontece com um sistema de Mott quando existe desordem e simetria partícula-buraco. Quando a desordem é pouca haverá um *gap* na densidade de estados e cada sítio terá uma ocupação simples de elétrons, o que

é característico de um isolante de Mott. Podemos ver isso na curva preta da figura 2.10(b) onde existe um *gap* em torno do nível de Fermi. Para valores de desordem intermediária o sistema será um metal (ver figura 2.10(a)). O *gap* de Mott será ocupado por estados (ver curva vermelha da figura 2.10(b)) e os sítios poderão ter vários tipos de ocupações. Quando a desordem é grande os elétrons estarão localizados nos diferentes sítios da rede, podendo haver vários tipos de ocupações nos sítios, devido a poços de potenciais, sem os elétrons poderem propagar assim como num isolante. A figura 2.10(c) mostra a resistividade para as duas situações descritas na figura 2.10(b) onde também é observado que a desordem diminui a resistividade ao fixar a temperatura do sistema assim como é visto na figura 2.8. Podemos ver na figura 2.10(c) que ambas as curvas se comportam de maneira similar a um isolante para baixas temperaturas, mas com propriedades diferentes, sendo uma maior que a outra.

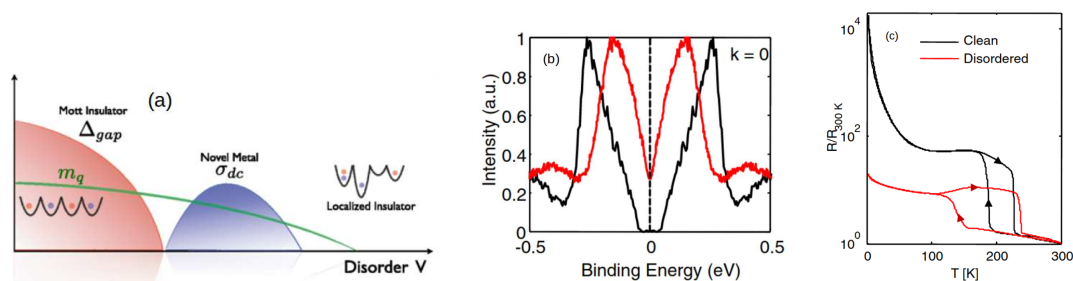


Figura 2.10: (a) Diagrama mostrando que quando a desordem cresce o material passa de um isolante de Mott para um metal e depois para um isolante desordenado. Para fins didáticos, a região vermelha representa que o isolante de Mott tem muitos estados estendidos, na curva azul vários desses estados se tornaram localizados e para alta desordem o sistema não possui estados estendidos. (b) Densidade de estados onde a curva preta é o caso sem desordem e a vermelha é com desordem. (c) Resistividade em função da temperatura fazendo correspondência com a figura (b). Figuras retirada de [61].

Os resultados experimentais estudados até aqui mostram como podem ser identificados efeitos da desordem, interação e dopagem na matéria. Nas próximas seções iremos ver ferramentas usadas para descrever os fenômenos medidos experimentalmente, dando um maior entendimento no que está acontecendo nesses materiais.

2.3 Revisão teórica para sistemas interagentes

Nesta seção é feita uma revisão de trabalhos teóricos envolvendo efeitos de interação em sólidos. Aqui mostramos como os efeitos da interação são calculados tendo como foco o desenvolvimento da metodologia DMFT aplicada no modelo de Hubbard que é usado neste trabalho.

Uma área de grande aplicação tecnológica ou importância científica é o tratamento de sólidos dentro da matéria condensada. Em 1928, F. Bloch desenvolveu um método para tratar sólidos ao considerar átomos inicialmente distantes, tendo níveis de energia discretos, e depois os átomos são aproximados até surgir bandas de energia no material [63]. Esse método apesar de importante não descreve todos os resultados experimentais dos diversos materiais existentes na natureza, como os que possuem forte interação eletrônica. Em 1937, materiais com bandas 3d parcialmente preenchidos, tal como o NiO [14], já eram estudados, tendo várias propriedades ainda não conhecidas na época. Isso levou Mott e Peierls a conjecturarem que uma explicação teórica dessas propriedades precisaria incluir a interação eletrostática entre os elétrons [64]. Já em 1949, Mott explicou que a fase isolante de vários materiais pode ocorrer levando em conta o efeito da repulsão coulombiana gerado por um elétron que vai ocupar um sítio já ocupado por outro elétron [9]. Nesse caso, um elétron que propaga na rede será fortemente impedido de estar em outro sítio que já estiver ocupado com um elétron. Caso o sistema esteja em semi-preenchimento, ou seja, todos os sítios tenham a mesma quantidade de elétrons e buracos, cada sítio impedirá que outro elétron passe por ele. No limite em que a interação seja forte e que proíba a propagação dos elétrons em cada sítio surgirá o isolante de Mott.

Um método de estudar o isolante de Mott do ponto de vista teórico está em estudar modelos, ou seja, hamiltonianas que capturam algumas informações do material trabalhado. Isso é importante pois um material normalmente possui vários mecanismos que controlam suas propriedades como a estrutura cristalina, a interação entre os elétrons, presença de impureza, campos externos, dentre outros. Tratar todas as propriedades em conjunto pode ser uma tarefa complexa e às vezes inviável. Ao utilizar um modelo podemos selecionar os parâmetros mais relevantes que desejarmos e fazer o tratamento do material ser mais simples. Em 1954, J. Slater e G. Koster desenvolveram o modelo *Tight Binding*, que é um método mais simples de tratar um sólido do que o método anterior desenvolvido por Bloch [65]. O método *Tight Binding* permite o cálculo de estrutura de bandas de um sólido sem usar todo o rigor considerado por Bloch uma vez que é possível fazer cálculos apenas em pontos de alta simetria, sendo a estrutura de banda interpolada sobre o restante da zona de Brillouin entre esses pontos. Apesar de considerar dados da rede cristalina e o *hopping*, o modelo *Tight Binding* ainda não é suficiente para tratar fortes interações entre os elétrons.

Para tratar efeitos de interação em vários metais em baixa temperatura, em 1956, L. Landau propôs uma teoria que ficou conhecida como teoria do Líquido de Fermi de Landau [66]. Essa teoria foi originalmente usada para explicar a fase líquida do ^3He . Na teoria do líquido de Fermi de Landau é considerada interação coulombiana entre os elétrons que faz a propagação deles ser mais difícil. Esse sistema de elétrons interagentes pode ser

reescrito em termos de férmions não interagentes propagando no material, sendo que a massa efetiva, campo magnético e outras quantidades, serão renormalizadas [67]. Um dos modelos que conseguem capturar como os elétrons propagam num sólido, assim como no líquido de Fermi, e também os efeitos de forte interação foi proposto por Hubbard em 1963 [68]. O modelo de Hubbard leva em conta a energia cinética dos elétrons numa rede cristalina, similar ao modelo *tight binding*, e interações eletrônicas em cada sítio, sendo possível descrever fases da matéria como um metal e o isolante de Mott. Para algumas condições, esse modelo possui solução analítica em uma dimensão [69], mas, apesar de simples, pode possuir difícil resolução em qualquer dimensão.

Neste trabalho será usado o modelo de Hubbard, que pode ser escrito na forma

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}, \quad (2.3)$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação para elétrons com spin σ no sítio i , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador número, que conta os elétrons com spin σ no sítio i . O primeiro termo de H é relacionado à energia cinética de elétrons, havendo probabilidade t dele mudar de um sítio i para um sítio vizinho j . O segundo termo é relacionado a uma energia de interação de elétrons quando estão no mesmo sítio da rede, tendo uma repulsão coulombiana U . μ é o potencial químico de onde podemos controlar a dopagem.

O avanço do poder computacional favoreceu tratamentos numéricos para esse modelo, como no trabalho da referência [70], em que é usada a Diagonalização Exata, que parte do método de Lanczos que calcula as energias mais baixas de um sistema [71], sendo aplicada a sistemas pequenos, e trabalhos que utilizam Monte Carlo Quântico [72], sendo este restrito a altas temperaturas. Em 1989 W. Metzner e D. Vollhardt [73] observaram que, no limite em que a coordenação da rede vai a infinito, a função que captura toda informação referente à interação dos elétrons (auto-energia) é local. Usando esse resultado, A. Georges e G. Kotliar identificaram, em 1992, que uma teoria de campo médio, análoga à teoria de campo médio clássico [10], pode ser aplicada ao modelo de Hubbard. Nesta teoria mapeia-se elétrons interagentes em uma rede num problema efetivo de uma impureza, que guarda informações da interação dos elétrons e é acoplada a um banho de elétrons não interagentes. Essa metodologia é chamada de *Dynamical Mean Field Theory* (DMFT). O mapeamento da DMFT torna-se exato no limite em que o número de coordenação da rede z , ou número de primeiros vizinhos de um sítio, vai a infinito. Trata-se de uma aproximação local, que não leva em consideração flutuações espaciais, porém mantém a dependência com a energia, ou seja, são consideradas flutuações temporais, justificando o termo “dinâmico” da DMFT. Tais flutuações são importantes porque os elétrons podem “pular” da impureza para o banho e voltar. A DMFT foi aplicada inúmeras vezes ao estudo

da transição de Mott, que pode ser descrita pelo modelo de Hubbard [15, 74–80].

Um resultado numérico para a densidade de estados do modelo de Hubbard, obtido usando a DMFT, é mostrada na figura 2.11. Quando a interação eletrônica U é nula, temos uma densidade de estados semi-circular; o nível de Fermi está em zero de energia ($E_F = 0$) e o sistema é metálico. Para U intermediário podemos notar a formação de uma estrutura de três picos na densidade de estados. Essa estrutura de três picos pode ser comparada com o resultado experimental descrito na figura 2.2 onde podemos ver uma banda de energia abaixo do nível de Fermi e um pico no nível de Fermi. Também existirá uma banda de densidade de estados acima do nível de Fermi uma vez que está sendo considerada simetria partícula-buraco, ou seja, há um elétron e um buraco para cada sítio da rede. O crescimento de U induz uma transição metal-isolante e faz aparecer um *gap* no nível de Fermi, como pode ser visto na figura 2.11(d). Na descrição da DMFT, o *gap* da figura 2.11(d) surge com o desaparecimento de um pico no nível de Fermi, que experimentalmente é mostrado na figura 2.2. A formação desse pico está relacionada com o efeito Kondo, descrito primeiramente por J. Kondo em 1964 [81]. Esse efeito faz com que haja um mínimo na resistividade com a diminuição da temperatura, em alguns metais com impurezas magnéticas. De maneira simplificada, podemos considerar que os elétrons livres do metal ficam em torno da impureza magnética e isso gera uma “nuvem” de elétrons. O momento magnético da “nuvem” acopla ao momento magnético da impureza formando um estado singleto. Em nosso problema não estamos considerando impurezas magnéticas, mas, ao utilizarmos a DMFT, mapeamos o problema da rede em um problema de uma impureza acoplada a um banho de elétrons não interagentes. É essa impureza do nosso problema auxiliar que participa do efeito Kondo, dando origem ao pico central na figura 2.11. Também é possível mostrar analiticamente que a altura do pico no nível de Fermi, como na figura 2.11, independe da interação U ao manter parâmetros como a temperatura ou o número de ocupação da rede constantes [18].

Podemos ver um pouco mais os efeitos de interação na matéria ao olhar para o diagrama de fase da figura 2.12, que pode ser construído a partir do modelo de Hubbard resolvido com a DMFT. Para temperatura baixa existe uma transição descontínua, representada por uma região de coexistência, entre o isolante de Mott e o metal, denominado líquido de Fermi. Para altas temperaturas o metal deixa de ter comportamento de líquido de Fermi e os elétrons possuem uma maior dificuldade para propagar devido a agitação de todo o meio, gerado pelo aumento da temperatura. Esse metal é chamado de *bad metal*. Já o isolante de Mott terá cada vez mais estados eletrônicos em torno do *gap* de energia, devido à flutuações térmicas. A região de coexistência entre o líquido de Fermi e o isolante de Mott diminui com o crescimento da temperatura. Quando a região de coexistência desaparece, haverá um “crossover” entre a região *bad metal* e o isolante de Mott. O diagrama da

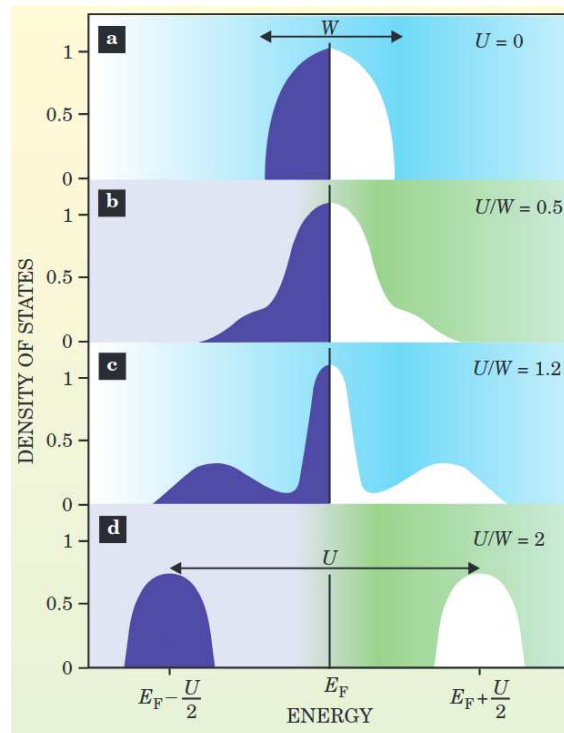


Figura 2.11: Densidade de estados em função da energia para várias interações U . É considerado o caso com simetria partícula-buraco. Quando a interação U cresce surgem duas subbandas de Hubbard distanciadas por um *gap* de energia. O valor de W desta figura representa a unidade de energia usada. Figura retirada de [19].

figura 2.12 calculada teoricamente possui um bom acordo com o diagrama encontrado experimentalmente na figura 2.3, onde também é identificado um isolante de Mott, um líquido de Fermi, uma região de coexistência e a região *bad metal*.

Até agora vimos como são os efeitos de interação para um sistema que possui simetria partícula-buraco. Mas é comum dentro da matéria condensada observarmos fenômenos em materiais por meio da dopagem com portadores de carga, saindo da simetria partícula-buraco. Para entender como a dopagem atua num material fortemente interagente vamos olhar para a figura 2.13. Na figura 2.13(a) estão representados sítios de uma rede que estão todos ocupados com um elétron cada. Considerando uma forte interação, a densidade de estados para essa configuração é representada por duas bandas de energia separadas por U mostrando os elétrons abaixo do nível de Fermi e os buracos acima do nível de Fermi. Essa configuração está mostrada na figura 2.11(d) e na 2.13(a). Na figura 2.13(b), ao dopar com elétron o material, há pelo menos um sítio da rede com dupla ocupação. Isso faz com que exista mais densidade de estados abaixo do nível de Fermi do que acima. A dopagem com elétrons faz com que a banda relacionada aos buracos seja deslocada para próximo do nível de Fermi até que uma parte da densidade de estados forme uma banda de energia

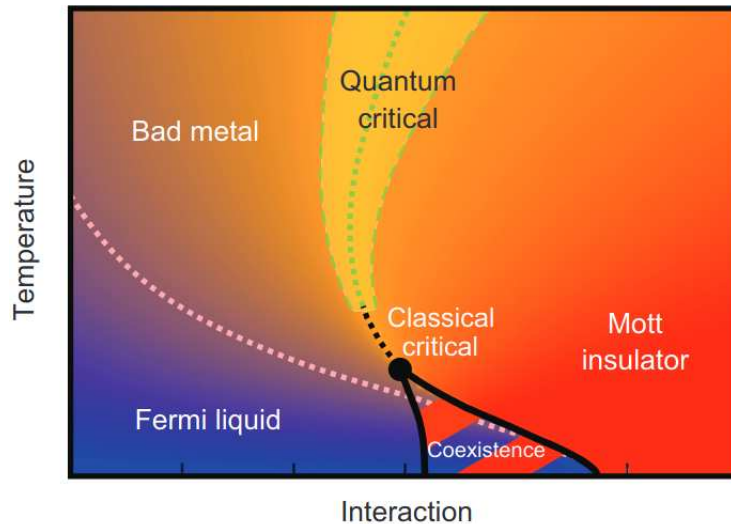


Figura 2.12: Diagrama de fase do modelo de Hubbard indicando a temperatura em função da interação. Figura retirada de [20].

abaixo do nível de Fermi. Nessa configuração, o isolante de Mott torna-se um metal com a presença da dopagem. Esse efeito da dopagem fazendo surgir bandas abaixo do nível de Fermi e fazendo um isolante ser um metal pode ser visto em resultados experimentais tais como apresentados na figura 2.6. Então, a dopagem atua no sistema deslocando a densidade de estados em relação ao nível de Fermi, criando bandas de energia relacionadas aos dopantes e até podendo fazer um isolante se tornar um metal. Nessa situação, um elétron a mais pode propagar na rede através de níveis de energia excitados de cada sítio.

Para calcular os efeitos da dopagem via DMFT, metodologia de nosso interesse, em 1996 H. Kajueter e G. Kotliar resolveram o modelo de Hubbard fora de semi-preenchimento [83]. Eles obtiveram resultados da densidade de estados para diferentes preenchimentos de buracos δ na rede ao alterar μ . Na figura 2.14 são apresentados resultados para alguns preenchimentos, sendo o nível de Fermi colocado em zero de energia, ou seja, os sistemas da figura são metálicos. A interação coulombiana usada para obter os resultados da figura 2.14 é grande o suficiente para que, no caso de simetria partícula-buraco, o sistema esteja relativamente distante da transição metal-isolante, sendo um isolante (ver figura 2.11). Um importante aspecto da transição de Mott, descrita pelo modelo de Hubbard, é que a dopagem induz uma redistribuição espectral na densidade de estados e estados de baixa energia são criados no nível de Fermi [84–86]. Nessa situação, a dopagem faz o isolante de Mott se tornar um metal fora de semi-preenchimento.

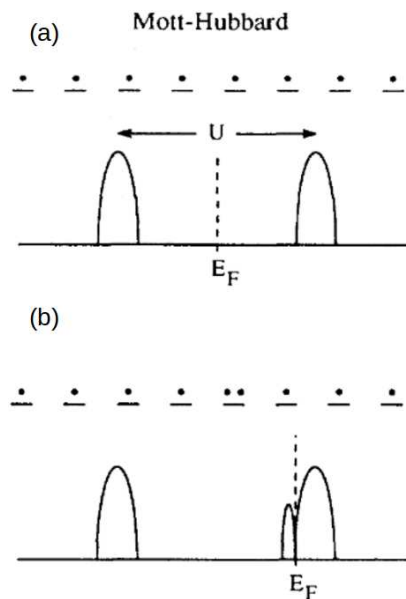


Figura 2.13: Densidade de estados em função da energia quando há ou não simetria partícula-buraco. Os traços representam os sítios e os pontos representam elétrons no sítio. Figura retirada de [82].

2.4 Revisão teórica para sistemas interagentes desordenados

Iremos dar continuidade nesta seção nos estudos do ponto de vista teórico que envolvem interação e desordem. Como na seção anterior foi falado de interação vamos agora dar um foco em desordem e explicar como ela é descrita.

Em 1958 foi publicado um trabalho do P. Anderson com o título “*Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*” [12]. Esse trabalho ganhou destaque por estudar fenômenos que envolvem desordem, abrindo caminho para os primeiros modelos que descrevem a localização de partículas em sistemas desordenados. A importância desse trabalho só foi reconhecida posteriormente [60]. Dez anos após sua publicação o trabalho do Anderson tinha apenas 23 citações, incluindo 3 do Mott que trabalhava junto com Anderson. Nos cinco anos seguintes houve mais 20 citações onde 7 foram feitas por Mott. Hoje em dia esse artigo do Anderson possui mais de quatorze mil citações. O modelo que Anderson estudou envolvia uma rede na qual um elétron poderia saltar de um determinado sítio para um sítio vizinho, com alguma variação de energia em cada sítio produzida por alguma fonte de desordem, como um potencial eletrostático aleatório. Anderson mostrou que para grande desordem os estados dos elétrons são localizados enquanto para desordem fraca, longe das bordas da banda, o sistema pode ser tratado como um metal.

Partindo do trabalho de Anderson um novo impulso foi tomado para aumentar a

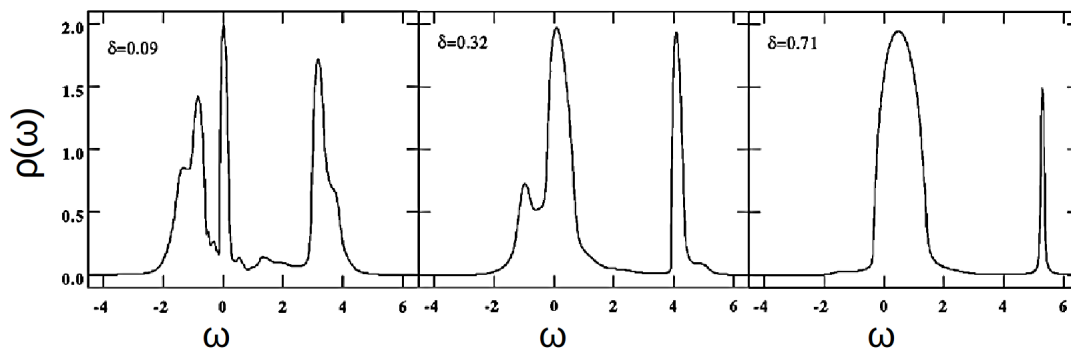


Figura 2.14: Densidade de estados em função da energia para diferentes preenchimentos de buracos δ na rede, ou seja, sem simetria partícula-buraco. O nível de Fermi está em zero de energia. Figura retirada de [83].

profundidade nos estudos de materiais. Kohn [87] argumentou que a diferença entre um metal e um isolante deve levar em conta a presença de funções de onda localizadas dos elétrons à medida que o sistema se torna um isolante. Isso é diferente de considerar somente a formação de estados em torno do nível de Fermi como num metal descrito pela teoria das bandas ou com a necessidade de um *gap* no nível de Fermi para se tornar um isolante. Em torno dessa época também houve trabalhos que destacaram a importância tecnológica de efeitos de desordem, como em semicondutores amorfos [88]. Na mesma linha de pensamento, Mott e colaboradores também estudaram propriedades elétricas de sistemas com grande desordem [89,90]. Além disso foi estabelecido que a transição gerada pelo efeito de desordem é do tipo contínuo, ou seja, de segunda ordem [91].

Em 1967 já havia metodologia para considerar efeitos de desordem em materiais como a CPA (do inglês, *Coherent Potential Approximation*) [92]. Essa metodologia mapeia uma rede desordenada em um problema de uma rede efetiva onde um sítio é acoplado com um banho. Esse banho representa uma média aritmética dos potenciais de todos os outros sítios da rede. Apesar de descrever alguns efeitos de desordem essa metodologia não é suficiente para descrever o isolante de Anderson. Veremos mais adiante que uma metodologia que considera valores típicos é mais apropriada do que uma que considera média aritmética.

A maioria dos estudos realizados a partir de trinta anos do trabalho do Anderson focou no limite de desordem fraca [50], nos quais avanços consideráveis foram alcançados. Para elétrons não interagentes, singularidades ou divergências em medidas de condutância já eram encontradas em materiais com uma ou duas dimensões [50,93]. Tal comportamento foi associado a algum nível de desordem no material e ficou conhecido como localização fraca. De acordo com esses resultados, para dimensões $d \leq 2$ a condutividade diminuiria monotonicamente à medida que a temperatura diminuía e, em última análise, levaria o

material a um estado isolante em $T = 0$. Curiosamente, um comportamento semelhante era conhecido em ímãs de Heisenberg [94–96] onde $d = 2$ é a dimensão crítica inferior para o problema.

Esta analogia com fenômenos críticos foi primeiramente enfatizada no trabalho [93] onde foi desenvolvida a teoria da escala de localização. Essa teoria oferece uma visão profunda, embora qualitativa, de como a localização eletrônica aparece em meios finitos. Ela prevê que, próximo à borda da mobilidade, a condutividade de um material depende de seu tamanho, conforme mostrado na figura 2.15. A localização de Anderson é um fenômeno crítico, pelo menos em três dimensões ao fazer a rede deixar de ter estados estendidos e ter apenas estados localizados. A função de escala $\beta(g)$ descreve com qual expoente a condutância média g cresce com o tamanho do sistema L . Em geral, não conhecemos $\beta(g)$. Em 1979, E. Abrahams, P. Anderson, D. Licciardello e T. Ramakrishnan, também conhecidos como “*gang of four*”, propuseram a equação $\beta(g) = \frac{d \ln(g)}{d \ln(L)}$ para o caso de um hiper cubo de dimensão D . Para um condutor ôhmico normal em dimensão D , a condutância varia como L^{D-2} ; conseqüentemente, $\beta(g) \approx D - 2$ para g grande. Assim, a função $\beta(g)$ é positiva para condutores tridimensionais, zero para condutores bidimensionais e negativa em uma dimensão. No regime localizado, g decai exponencialmente com o tamanho da amostra, de modo que $\beta(g)$ é negativo. Em três dimensões, há um ponto crítico em que β deixa de ser negativo e passa a ser positivo, significando que o sistema passou por uma transição de fase. Os sistemas de dimensão inferior não passam por uma transição de fase porque a condutância sempre diminui com o tamanho do sistema. Um pequeno condutor 2D, por exemplo, parecerá um metal no regime quase estendido, mas todos os seus estados serão eventualmente localizados se o meio for grande o suficiente.

Essas formulações que dependem da escala foram posteriormente generalizadas para elétrons interagentes por Finkelshtein [98], e estudadas usando métodos de grupo de renormalização em $2 + \epsilon$ dimensões [53, 98, 99]. Esse modelo que já considerava efeitos de desordem e interação foi usado por vários autores [51, 100]. Pode-se pensar que esse modelo que envolvia interação e desordem descreve o sistema como um tipo de líquido de Fermi em baixa energia [101]. As excitações de baixa energia são vistas como um gás de quase-partículas diluídas que, pelo menos para desordem fraca, podem ser descritas por um pequeno número de parâmetros do líquido de Fermi, como a constante de difusão, a massa efetiva e as amplitudes de interação. Nessa abordagem, investiga-se a evolução desses parâmetros do líquido de Fermi à medida que a desordem fraca é introduzida. Uma mudança de comportamento do sistema pode ser identificada quando já não se é observado o líquido de Fermi, podendo ser um indicativo de que há uma transição metal-isolante.

A partir do momento que o conhecimento a respeito da desordem e da interação começou a ficar mais consolidado foram desenvolvidas metodologias para capturar ambos

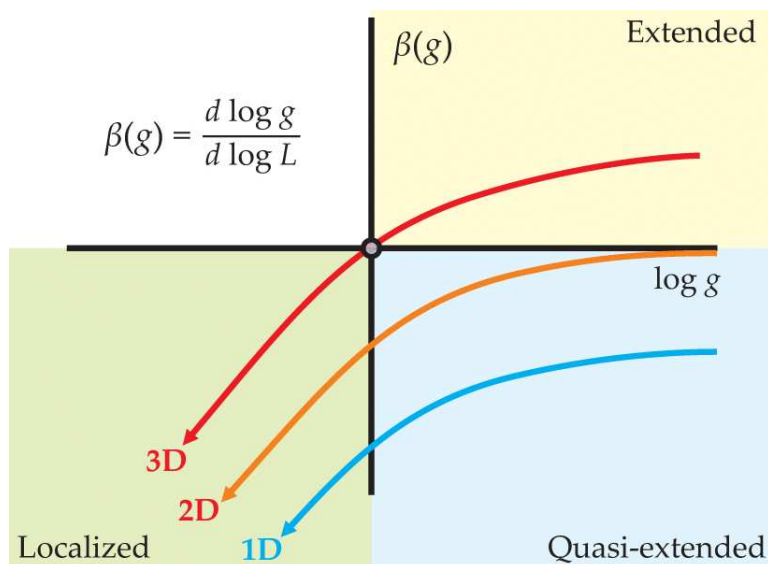


Figura 2.15: Função de escala $\beta(g)$ em função da condutância média g . D é a dimensão do condutor e L é o tamanho do sistema. Figura retirada de [97] e originalmente publicada em [93].

os efeitos [13, 59, 102–107]. A formulação original da DMFT, metodologia já bem aplicada para estudar fenômenos interagentes e exata no limite de infinitas dimensões, não é suficiente para lidar com fortes efeitos de desordem. Ainda assim podemos usá-la para verificar efeitos de desordem fraca e comparar com resultados experimentais. Na figura 2.16 é mostrada a resistividade em função da temperatura para vários valores de desordem. Esses resultados, onde a desordem é colocada ao variar a energia de cada sítio, são comparáveis ao resultado experimental da figura 2.8. Esse cálculo foi feito com auxílio da DMFT, que usa uma média aritmética da densidade de estados de cada sítio onde, para sistemas desordenados, o problema da rede é mapeado em um ensemble de problemas de uma impureza, similar ao que é feito na CPA. Podemos ver que o comportamento experimental descrito na figura 2.8 possui um bom acordo com o cálculo teórico da figura 2.16 ao capturar a metalização de um isolante.

Até o momento vimos como a interação pode ser estudada junto com efeitos de desordem fraca. O modelo de Hubbard mostrado na equação 2.3 pode ser incrementado para tratar efeitos de desordem. Para isso é adicionado um termo que controla o nível de energia dos sítios, onde ε_i é a energia de um elétron no sítio i . O valor de ε_i pode variar aleatoriamente para cada sítio i , gerando desordem na rede. Vamos usar um parâmetro W para controlar a desordem. Dessa forma, ε_i pode mudar estando dentro de um intervalo $-W/2 < \varepsilon_i < W/2$. Usando as mesmas definições anteriores, o hamiltoniano fica

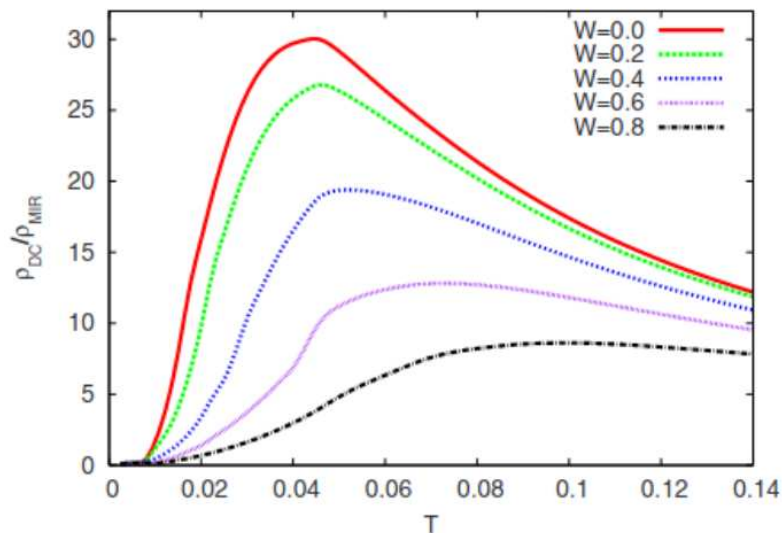


Figura 2.16: Resistividade em função da temperatura para diferentes valores de desordem W . Figura retirada de [108].

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \mu) n_{i\sigma}. \quad (2.4)$$

Como a DMFT não é suficiente para tratar a transição de Anderson podemos combiná-la com a metodologia chamada *Typical Medium Theory* (TMT) para tratar a desordem [13]. A TMT é baseada numa média geométrica da densidade de estados local associada a impurezas com energias distribuídas aleatoriamente numa rede. Com a DMFT-TMT é possível observar transições metal-isolante devido à interação e à desordem. A TMT lembra a CPA, já conhecida desde a década de 60, com a diferença que é calculado o valor típico (estimado pela média geométrica) das diferentes densidades de estados locais ao longo da rede. Essa metodologia parte dos trabalhos de Anderson baseados em uma observação local de uma rede [12], a partir da qual são extraídas as informações necessárias.

A média aritmética da densidade de estados no nível de Fermi não vai a zero na transição de Anderson, não sendo uma boa quantidade para ser olhada se queremos descrever uma transição de fase onde um parâmetro de ordem é anulado. Isso ocorre pois a média aritmética captura todos os estados do sistema, não fazendo distinção sobre se o estado é localizado ou não. A densidade de estados local mede diretamente a amplitude da função eletrônica. Quando os elétrons se localizam o espectro local deixa de ser contínuo e passa a ser discreto, ou seja, a densidade de estados passa a ser descrita por picos de largura infinitamente pequena centrados nas energias dos sítios, caso a temperatura do sistema tenda a zero. Isso significa que o valor típico ou mais provável da DOS na energia de Fermi é nulo, embora o valor médio seja finito. Para ficar mais claro, podemos olhar

para a figura 2.17. Nela podemos ver que para uma determinada distribuição assimétrica o valor típico é conhecido como aquele que terá a maior probabilidade de acontecer no sistema, não coincidindo com a média aritmética. Assim, quando os estados se tornam localizados, o valor típico da DOS local no nível de Fermi é mais apropriado para descrever o sistema, pois se torna nulo.

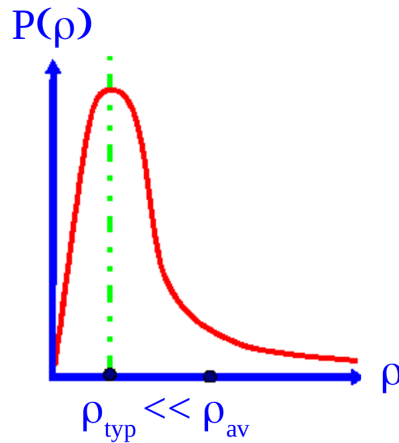


Figura 2.17: Em uma distribuição assimétrica, o valor típico ρ_{typ} apresentará maior probabilidade $P(\rho)$ de acontecer, o que não ocorre com o valor médio ρ_{av} .

Para conhecer um pouco mais a TMT podemos olhar para a figura 2.18. Nessa figura são mostradas densidades de estado no nível de Fermi $\rho(\omega = 0)$ em função da desordem W . No caso, o valor típico de $\rho(\omega = 0)$ é escolhido como um candidato para ser parâmetro de ordem do nosso problema uma vez que ele é diferente de zero quando o sistema é um metal e é zero quando o sistema é um isolante. Os círculos representam cálculos numéricos de primeiros princípios para uma rede cúbica tridimensional com energias locais aleatórias usando funções de Green exatas. Foi calculada tanto a média aritmética quanto a geométrica das densidades de estados locais. A curva tracejada foi calculada numericamente pelo método CPA e a curva contínua foi calculada usando a TMT. Podemos ver que uma boa concordância entre essas diferentes metodologias onde é demonstrado que o valor típico vai a zero a partir de um valor crítico de desordem.

A fim de entender um pouco como a densidade de estados muda no caso interagente para diferentes valores de desordem podemos olhar para a figura 2.19. Nessa figura são mostradas a $\rho_{av}(\omega)$ (linha tracejada) e $\rho_{typ}(\omega)$ (linha contínua). Para o caso metálico, $U = 1.25$, os estados ficam mais localizados à medida que a desordem W cresce fazendo $\rho_{typ}(\omega)$ diminuir. Num limite em que a desordem cresce mais, $\rho_{typ}(\omega = 0)$ vai a zero assim como acontece na figura 2.18. Quando a interação é intermediária, $U = 1.75$, existe um *gap* no nível de Fermi no caso limpo ($W = 0$) e o sistema é um isolante de Mott. À medida que a desordem cresce o *gap* é preenchido com estados e com isso há um metal. Para

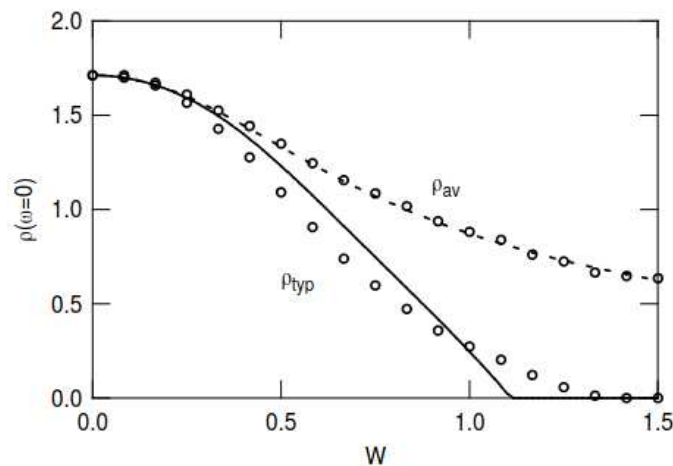


Figura 2.18: Densidade de estados no nível de Fermi em função da desordem. Os círculos foram calculados por primeiros princípios em uma rede cúbica onde foi feita tanto uma média típica quanto uma média aritmética dos estados. A linha contínua é uma previsão da TMT e a linha tracejada é uma previsão da CPA. Figura retirada de [13].

valores ainda maiores de W , $\rho_{typ}(\omega)$ diminui, até se tornar nulo. Para U ainda maior o sistema pode ir do isolante de Mott diretamente para um isolante em que tanto os efeitos da interação como da desordem são relevantes. Esse isolante é conhecido como isolante de Anderson-Mott.

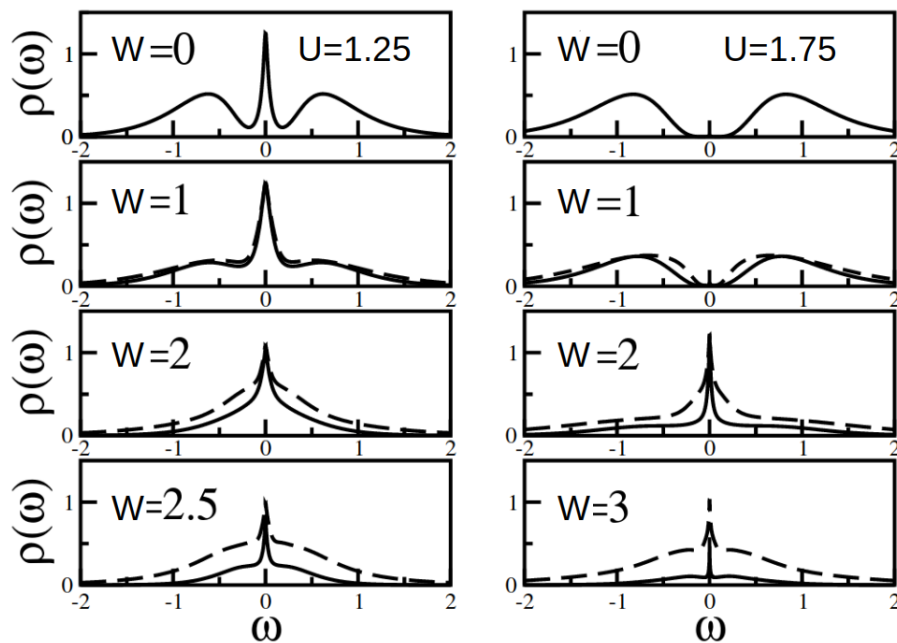


Figura 2.19: Densidade de estados média (linha tracejada) e densidade de estados típica (linha contínua) em função da energia ω para diferentes valores de desordem W e dois valores de interação U . Figura retirada de [109].

Podemos aprofundar mais no estudo da fase isolante de Anderson-Mott segundo a DMFT-TMT ao olhar para o peso de quase partícula $Z(\varepsilon_i)$. Na teoria do líquido de Fermi, o peso de quase-partícula é uma grandeza proporcional ao inverso da massa efetiva dos portadores de carga na rede [110]. Para uma temperatura nula esse parâmetro tende a zero no isolante de Mott uma vez que a interação forte faz a massa efetiva dos portadores de carga divergir. Quando o peso de quase-partícula vai a zero significa que ao olharmos para um sítio da rede vemos uma ocupação de apenas um elétron [111]. O caso em que $Z \rightarrow 1$ corresponde a um sítio que é essencialmente não interagente e pode estar duplamente ocupado ou vazio. Ao colocar desordem na rede existirá sítios com $Z(\varepsilon_i) \rightarrow 0$ e $Z(\varepsilon_i) \rightarrow 1$ assim como mostrado na figura 2.20. Nesse caso, $Z(\varepsilon_i) \rightarrow 0$ para $|\varepsilon_i| < U/2$, enquanto $Z(\varepsilon_i) \rightarrow 1$ se $|\varepsilon_i| > U/2$. Assim, na região $W > U$, os sítios onde $|\varepsilon_i| < U/2$ se comportarão como um isolante de Mott, enquanto os sítios com $|\varepsilon_i| > U/2$ seguirão a localização de Anderson. A imagem que surge é a de um sistema espacialmente não homogêneo, composto de regiões localizadas pela descrição de Mott e mescladas com regiões seguindo o isolante de Anderson. O isolante com essas duas características é o isolante de Anderson-Mott.

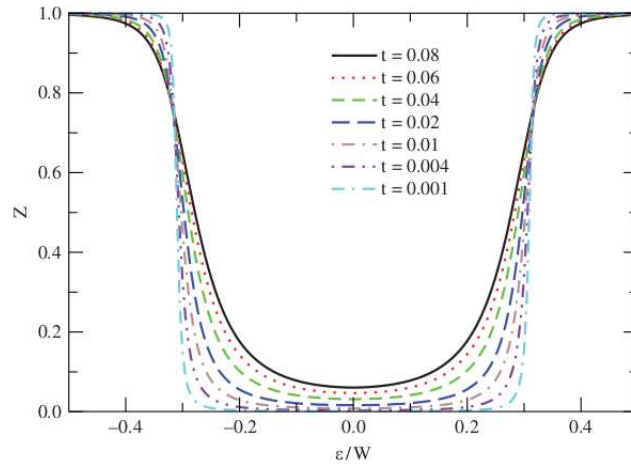


Figura 2.20: Peso de quasi-partícula Z , quantidade inversamente proporcional à massa efetiva dos portadores de carga, em função da energia ε . Quanto menor é o valor de t mais próximo do limite atômico o sistema está. Figura retirada de [112].

Um diagrama de fase da desordem W versus interação eletrônica U para semi preenchimento foi primeiramente construído no trabalho [109]. Na figura 2.21(a) é mostrado esse diagrama construído com dados mais recentes da literatura [113] em que outro método para resolver o problema de uma impureza é utilizado. Nesse trabalho foi usada a DMFT-TMT considerando desordem local nos sítios para o caso de simetria partícula-buraco, $\mu = U/2$. No caso não interagente, quando a desordem cresce, o sistema tende a ser um isolante de Anderson, enquanto o isolante de Mott surge ao aumentar a interação eletrônica no

caso limpo. Quando interação e desordem estão presentes, podemos ver que para um pequeno valor de W , a transição metal-isolante em função de U é descontínua, por haver uma região de coexistência, até um ponto crítico a partir do qual a transição é contínua. Podemos ver também que uma desordem intermediária pode destruir o isolante de Mott, fazendo o sistema ser metálico antes de existirem efeitos da localização de Anderson. Além de parâmetros de ordem que definem as linhas de transição da figura 2.21(a) mostrada no trabalho [113], podemos entender melhor como é a configuração eletrônica por sítios em um sistema desordenado olhando para a ocupação de elétrons ao longo da rede. A figura 2.21(b) mostra a ocupação n_i de cada sítio com energia ε_i para $U = 1.75$. Podemos ver que na fase isolante de Mott, quando a desordem é pequena, os sítios possuem a metade do enchimento de elétrons por spin para qualquer energia ε_i . Na fase metálica com desordem, a ocupação n_i dos sítios muda suavemente com os níveis de energia ε_i já que agora existe uma probabilidade dos elétrons propagarem para sítios com mais ou menos estados acessíveis. No isolante de Anderson-Mott os elétrons irão se localizar de forma que o sistema tenderá a ter sítios com ocupação máxima, sítios com ocupação simples e sítios sem ocupação eletrônica.

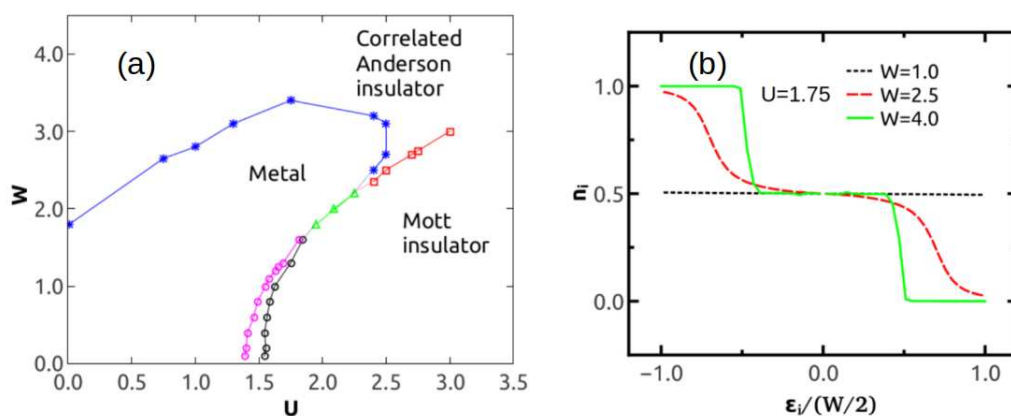


Figura 2.21: (a) Diagrama de fase para o modelo de Hubbard obtido via DMFT-TMT na presença de desordem W e interação U para o caso de simetria partícula-buraco. A desordem é considerada na energia local dos elétrons, que segue uma distribuição uniforme de largura W . (b) Ocupação n_i dos sítios por spin para cada energia ε_i . A temperatura usada foi de $T = 0.008$. Figuras retiradas de [113].

Assim como no caso experimental, também é possível tratar teoricamente sistemas em duas dimensões onde efeitos da interação, desordem e dopagem atuam simultaneamente. No caso, podemos ter um melhor controle de como a densidade de estados média irá mudar quando controlamos a interação e a desordem ao utilizar um modelo. Podemos ver na figura 2.22 a densidade de estados média para o modelo de Anderson-Hubbard em uma rede quadrada tratado com Monte Carlo Quântico e Diagonalização Exata. O valor de

interação $U = 8$ é grande de forma que o sistema é um isolante de Mott quando a desordem Δ é pequena. Nessa situação o sistema está em semi-preenchimento ($\rho = 1$). Podemos ver que o *gap* no nível de Fermi vai continuar existindo até que o valor da desordem se torne comparável ao valor da interação, $U = \Delta$. Nessa situação, com o aumento da desordem, o *gap* será preenchido de estados localizados fazendo existir o isolante de Anderson-Mott. Para desordens grandes onde $U < \Delta$, haverá uma supressão no nível de Fermi que está diretamente ligada aos efeitos da desordem nesses sistemas bidimensionais. A metodologia usada nesse trabalho é a *determinant Quantum Monte Carlo* (DQMC), conhecida por gerar resultados próximos do analítico, conferindo confiabilidade à metodologia.

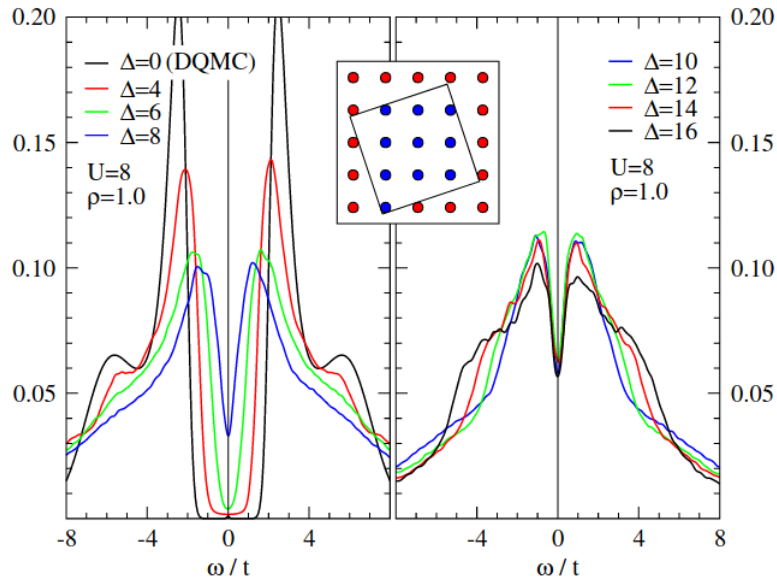


Figura 2.22: Densidades de estados média para uma rede quadrada calculadas usando a metodologia *determinant Quantum Monte Carlo* (DQMC). À esquerda é mostrado o caso onde a interação U é maior ou igual a desordem Δ . À direita é mostrado o caso onde $U < \Delta$. O sistema está em semi-preenchimento $\rho = 1$. Figuras retiradas de [114].

Para o caso da combinação da interação U , desordem Δ e dopagem ρ no modelo de Anderson-Hubbard bidimensional de uma rede quadrada, podemos olhar para a figura 2.23. Nessa figura está representada a densidade de estados média para diversas combinações de U , Δ e ρ . Podemos notar que quando o sistema é dopado com buracos, $\rho = 0.6$, não haverá *gap* em torno do nível de Fermi por mais que a interação seja maior que a desordem $U > \Delta$. Ao fixar a interação em $U = 8$ e a dopagem fora de semi-preenchimento em $\rho = 0.6$ e aumentar a desordem Δ , a densidade de estados em torno do nível de Fermi tende a ter valores menores, tornando a supressão do nível de Fermi mais profunda. Longe do nível de Fermi a densidade de estado média pode crescer. Ao fixar a interação $U = 5$ e desordem $\Delta = 8$ e diminuir a dopagem podemos ver que a supressão no nível de

Fermi praticamente não mudará sua profundidade. A dopagem fará com que haja uma transferência de densidade de estados de energias abaixo do nível de Fermi para energias acima. Para o cálculo assimétrico foi usado tanto DQMC quanto a metodologia *Exact Diagonalization* (ED).

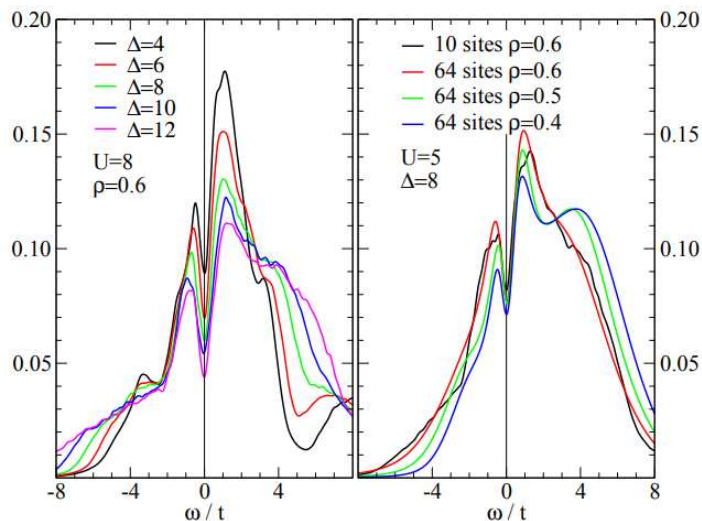


Figura 2.23: Densidades de estados média para uma rede quadrada calculadas usando ED para 10 sítios e $\delta = 0.6$ e a metodologia DQMC para 64 sítios. À esquerda é mostrado o caso onde a interação é fixa $U = 8$ e o sistema está fora de semi-preenchimento ($\rho = 0.6$). À direita a interação $U = 5$ e a desordem $\Delta = 8$ são fixas enquanto a dopagem ρ possui vários valores. Figuras retiradas de [114].

Vimos neste capítulo que existem métodos para tratar efeitos de desordem, interação e dopagem do ponto de vista teórico e experimental. Mas ainda existem muitas perguntas a serem respondidas de como esses efeitos atuam em conjunto. Algumas dessas perguntas são: como é a transição metal-isolante ao considerar a interação, a desordem e a dopagem simultaneamente? Como é o diagrama de fase completo para esses sistemas? Como é a organização eletrônica em cada região do diagrama de fase e qual o mecanismo responsável por essa organização eletrônica? A busca pelas respostas a essas perguntas é dificultada uma vez que os parâmetros envolvidos nesses problemas competem entre si numa descrição teórica e que são de difícil controle numa descrição experimental. Nesta tese nós nos propomos a contribuir com o conhecimento desta área de pesquisa ao descrever diagramas de fase que relatam o que acontece para diferentes jogos de parâmetros deste problema. Será descrito neste trabalho o isolante de Anderson-Mott bem como outras regiões ainda pouco estudadas envolvendo os fenômenos aqui apresentados. Usaremos como base o modelo de Hubbard desordenado resolvido com a metodologia DMFT-TMT.

Capítulo 3

Metodologia

Neste capítulo apresentamos a metodologia Teoria de Campo Médio Dinâmico para o modelo de Hubbard aplicado à rede de Bethe. Apresentamos também o modelo de Anderson-Hubbard bem como adaptações necessárias para usar a Teoria de Meio Típico, tratando assim problemas interagentes e desordenados. Além disso, também será visto como controlar a dopagem com essas metodologias.

3.1 Tratando efeitos de interação

Afim de melhorar a afinidade com a metodologia usada nesta tese, iniciaremos esta seção com a Teoria de Campo Médio Clássica, aplicada ao modelo de Ising. Depois, será discutida a metodologia de nosso interesse, Teoria de Campo Médio Dinâmico aplicada no modelo de Hubbard. As principais referências seguidas são [15] e [115].

3.1.1 Teoria de Campo Médio Clássica

Um método para trabalhar com uma rede de muitos graus de liberdade é usar a Teoria de Campo Médio Clássica, também conhecida por Teoria de Weiss [116], que mapeia os graus de liberdade da rede em um problema mais simples que possui menor quantidade de graus de liberdade. Esse problema mais simples conserva informações sobre diversas interações que podem existir entre partículas num sítio de uma rede acoplado a um banho externo, onde tal acoplamento descreve a dinâmica do sítio com seu entorno.

Para poder exemplificar como funciona a Teoria de Campo Médio Clássica vamos falar de sistemas que passam por transições ferromagnéticas. Alguns materiais como Fe, Co e Ni apresentam uma magnetização espontânea abaixo de uma temperatura crítica T_c ,

chamada de temperatura de Curie (abaixo da qual os spins não variam suas direções). Um modelo microscópico para descrever materiais como esses é o modelo de Heisenberg, que foi proposto por Werner Heisenberg e quase simultaneamente por Paul Dirac, em 1926 [117]. O modelo de Heisenberg é mostrado a seguir:

$$H_H = - \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - h \sum_i S_i, \quad (3.1)$$

onde as constantes de troca J_{ij} são positivas, favorecendo o alinhamento dos spins nos sítios i ou j , e S_i é o spin no sítio i . A componente h representa um campo magnético externo na rede.

Alguns materiais como YFeO_3 , CrBr_3 ou o LiHoF_4 apresentam configurações ainda mais simples onde os spins estão em apenas uma direção. Por simplicidade, também vamos considerar um modelo seguindo essa mesma configuração de spin. Nesse caso, as componentes de spin do modelo de Heisenberg só atuarão em uma direção e as constante de troca J_{ij} só atuarão em primeiros vizinhos. Com essas simplificações recaímos no modelo de Ising [118]:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (3.2)$$

onde o fator $1/2$ promove uma única contagem do mesmo par de spin interagindo. Esse modelo descreve um conjunto de variáveis discretas que representam momentos de dipolo magnéticos, como os spins de elétrons, tendo dois estados $+1$ ou -1 . Cada spin interage com sítios vizinhos podendo haver fases com propriedades magnéticas como o ferromagnetismo.

A Teoria de Campo Médio Clássica parte da suposição de que cada spin pode ser escrito como seu valor médio mais flutuações em torno da média:

$$S_i = \langle S_i \rangle + \delta S_i. \quad (3.3)$$

Assim, a interação entre dois primeiros vizinhos fica

$$S_i S_j = [\langle S_i \rangle + \delta S_i][\langle S_j \rangle + \delta S_j] = \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + \delta S_i \langle S_j \rangle + \langle S_i \rangle \delta S_j + \mathcal{O}[\delta S^2]. \quad (3.4)$$

Substituindo δS_i por $S_i - \langle S_i \rangle$ e desprezando o termo quadrático na interação, temos a equação

$$S_i S_j \approx -\langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + S_i \langle S_j \rangle + \langle S_i \rangle S_j. \quad (3.5)$$

Concentraremos no caso uniforme, em que $\langle S_j \rangle = m$, independente do sítio j . Nesse

caso, temos o Hamiltoniano

$$H_W = N \frac{Jz}{2} m^2 - h_W \sum_i S_i, \quad (3.6)$$

em que N é o número de partículas e $h_W = zJm + h$ é o campo efetivo de Weiss. Podemos encontrar a função de partição do sistema sendo d a dimensão do sistema e $z = 2d$ o número de primeiros vizinhos [119]:

$$Z(T, h) = \text{Tr}[e^{-\beta H_W}] = e^{-N\beta Jz m^2/2} 2^N \cosh^N(\beta h_W). \quad (3.7)$$

Já a energia livre por spin é:

$$f(T, h) = -\frac{1}{\beta N} \ln Z(h) = \frac{Jz}{2} m^2 - \frac{1}{\beta} \ln[2 \cosh(h_W)], \quad (3.8)$$

e a magnetização é portanto

$$m(T, h) = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle = -\frac{\partial f(T, h)}{\partial h} = \tanh[\beta h + \beta z J m(T, h)], \quad (3.9)$$

que é uma equação autoconsistente para m . Podemos descobrir m para dados T e h por modo gráfico, plotando as curvas $y = m(T, h)$ e $x = \tanh[\beta h + \beta z J m(T, h)]$ como função de m e verificando suas intercessões, ou através de cálculo numérico iterativo [120], resolvendo esse problema. Na figura 3.1 é mostrado o resultado do cálculo iterativo da equação 3.9 onde os parâmetros envolvidos possuem unidades de zJ . Quando $|m| > 0$ significa que existe uma magnetização no sistema apontando para um sentido dito positivo (figura 3.1(a)) ou para um sentido negativo (figura 3.1(b)). Isso ocorre até um valor T_c onde toda a magnetização passa a ser nula. Também é mostrado o que acontece ao mudar o campo magnético h . À medida que temos um $|h|$ maior o sistema tende a se orientar para algum dos sentidos, sendo necessário a temperatura ser cada vez maior para eliminar a magnetização do sistema.

3.1.2 Teoria de Campo Médio Dinâmico (DMFT)

Assim como é possível usar uma teoria de campo médio para um caso clássico, num sistema quântico de muitos corpos pode-se aplicar a Teoria de Campo Médio Dinâmico (do inglês, *Dynamical Mean Field Theory* - DMFT). A ideia básica da DMFT é o mapeamento do problema da rede em um problema de uma impureza local acoplada a um banho, como pode ser visto na figura 3.2. Dessa forma, a resolução do problema se faz em mostrar que as quantidades da rede podem ser reescritas em termos da impureza e do banho. Para isso,

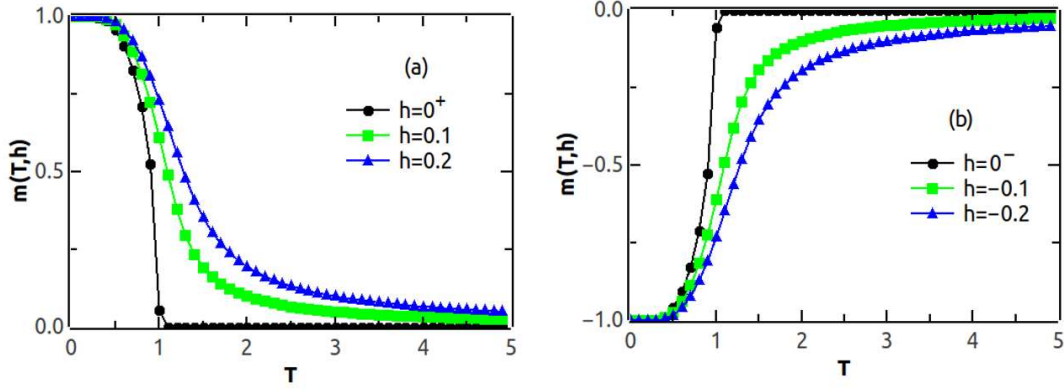


Figura 3.1: Solução numérica da equação 3.9. (a) Magnetização $m(T, h)$ em função de T quando $h > 0$. (b) Magnetização $m(T, h)$ em função de T quando $h < 0$. T e h foram escalados por um fator zJ . $h = 0^\pm$ significa $h = \lim_{x \rightarrow 0^\pm} x$.

deixaremos aqui um caminho de como encontrar a ação efetiva para o problema da rede, que resulta em uma equação similar ao encontrado para o problema de uma impureza, sendo possível fazer o mapeamento da DMFT.

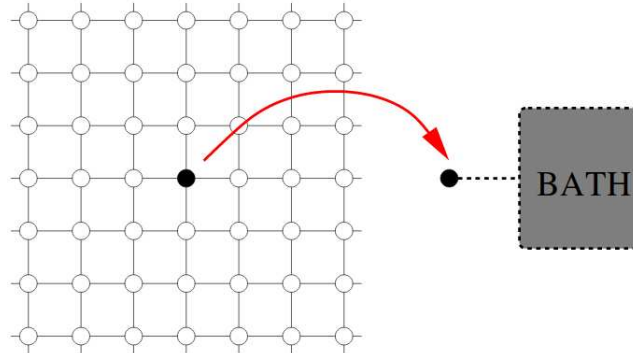


Figura 3.2: Ilustração esquemática da DMFT, em que uma rede com vários sítios interagentes é mapeada em um problema de uma impureza interagente acoplado a um banho de elétrons livres. Figura extraída de [115].

Problema da rede

Iremos considerar uma rede onde os elétrons podem se propagar ao longo dos sítios e também interagir uns com os outros localmente. Um hamiltoniano que descreve essa situação é o modelo de Hubbard, dado por [68]:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + (\varepsilon_0 - \mu) \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}, \quad (3.10)$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{j\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação para elétrons com spin σ no sítio i , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador número que conta os elétrons com spin σ no sítio i , U é a energia de interação elétron-elétron local, ε_0 é a energia local de um elétron em um sítio e μ é o potencial químico da rede. Com essa equação, podemos descrever uma coleção de orbitais atômicos nos sítios de uma estrutura periódica. Os orbitais se sobrepõem, para que os férmions possam pular de um sítio para outro com uma amplitude $t_{\langle ij \rangle}$ entre primeiros vizinhos. Na ausência de *hopping*, cada “átomo” tem 4 auto-estados: $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$ com energias 0 , $\varepsilon_0 - \mu$, sendo esse degenerado, e $U + 2\varepsilon_0 - \mu$, respectivamente. Por ora, iremos desconsiderar ε_0 por ser uma energia somada em todos os sítios, e que, sendo constante, não altera a dinâmica do sistema. Posteriormente iremos considerar diferentes valores de ε_0 quando estivermos falando de desordem. O modelo de Hubbard é um modelo simples que considera a competição entre a energia cinética e a energia de interação entre elétrons num mesmo sítio, podendo apresentar uma transição metal-isolante chamada de transição de Mott [121].

A função de partição Z do modelo de Hubbard, equação 3.10, é calculada com uma integral funcional [122], usando operadores de criação e aniquilação¹, $c_{i\sigma}(\tau)$ e $c_{i\sigma}^\dagger(\tau)$, onde τ é escrito de forma que um operador que dá a evolução da função de onda a partir de um tempo t qualquer é substituído por uma evolução no intervalo de tempo imaginário ($\frac{it}{\hbar} \rightarrow \tau$) [6]:

$$Z = \int \prod_{i\sigma} dc_{i\sigma}^\dagger dc_{i\sigma} e^{-S}, \quad (3.11)$$

onde a ação S é dada por

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) (\partial_\tau - \mu) c_{i\sigma} + H(c_{i\sigma}^\dagger(\tau), c_{i\sigma}(\tau)) \right]. \quad (3.12)$$

Para obter a ação efetiva de um sítio arbitrário, como em $i = 0$, é preciso integrar todos os graus de liberdade que vão além desse sítio escolhido. Essa ideia é expressada por:

$$\frac{1}{Z_{eff}} e^{-S_{eff}(c_{0\sigma}^\dagger, c_{0\sigma})} = \frac{1}{Z} \int \prod_{i \neq 0, \sigma} dc_{i\sigma}^\dagger dc_{i\sigma} e^{-S}, \quad (3.13)$$

onde Z_{eff} é a função partição de S_{eff} . Podemos separar S nas partes $S = S_0 + S^{(0)} + \Delta S$, de forma que

¹Que também são conhecidos como variáveis de Grassmann. Para entender mais sobre essas variáveis consulte a referência [123].

$$\begin{aligned}
S_0 &= \int_0^\beta d\tau \left(\sum_\sigma c_{0\sigma}^\dagger(\tau)(\partial_\tau - \mu)c_{0\sigma}(\tau) + Un_{0\uparrow}(\tau)n_{0\downarrow}(\tau) \right) \\
S^{(0)} &= \int_0^\beta d\tau \left(\sum_{i \neq 0, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau)(\partial_\tau - \mu)c_{i\sigma}(\tau) - t \sum_{\langle i, j \neq 0 \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger(\tau)c_{j\sigma}(\tau) + H.c.) + Un_{i\uparrow}(\tau)n_{i\downarrow}(\tau) \right) \\
\Delta S &= - \int_0^\beta d\tau \sum_{i\sigma} t_{i0}(c_{i\sigma}^\dagger(\tau)c_{0\sigma}(\tau) + H.c.), \tag{3.14}
\end{aligned}$$

onde S_0 é a ação relacionada ao sítio $i = 0$ desacoplada do resto da rede, $S^{(0)}$ é a ação da rede onde todos os vínculos com o sítio $i = 0$ foram removidos (deixando uma “cavidade”) e ΔS é a ação que descreve a hibridização entre o sítio $i = 0$ e a rede. Para considerar a integração da equação 3.13 podemos usar ΔS com $\eta_i \equiv t_{i0}c_{0\sigma}$ nos férmions que estão em $i \neq 0$:

$$\begin{aligned}
S_{eff} &= cte + S_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i_1 \dots i_n, j_1 \dots j_n} \int_0^\beta d\tau_{i_1} \dots d\tau_{i_n} d\tau_{j_1} \dots d\tau_{j_n} \\
&\quad \times \eta_{i_1}^\dagger(\tau_{i_1}) \dots \eta_{i_n}^\dagger(\tau_{i_n}) \eta_{j_1}(\tau_{j_1}) \dots \eta_{j_n}(\tau_{j_n}) \\
&\quad \times G_{i_1 \dots i_n, j_1 \dots j_n}^{(0)}(\tau_{i_1}, \dots, \tau_{i_n}, \tau_{j_1}, \dots, \tau_{j_n}). \tag{3.15}
\end{aligned}$$

A função $G^{(0)}$ descreve o processo de um elétron que deixa o sítio $i = 0$ para propagar na rede e então retorna para o sítio $i = 0$. Até o momento nós não temos a função $G^{(0)}$. Ao desconsiderar aproximações, encontrar funções que descrevem a cavidade é tão difícil quanto resolver o problema original em si. No entanto, no limite de grandes dimensões d , o *hopping* t é reescalado em $t \propto 1/\sqrt{d}^{|i-j|}$, em que $|i - j|$ é a distância de Manhattan² entre os sítios i e j . Com isso a interação e energia cinética tornam-se da mesma ordem de grandeza [73]. Uma consequência desta mudança de escala é que $G^{(0)} \approx 1/\sqrt{d}^{|i-j|}$ [15]. Portanto, apenas o termo de ordem principal precisa ser considerado e é de ordem 1, desde que $i = j$. Todas as ordens superiores dessa função desaparecem nos limites de dimensão infinita à medida que decaem, pelo menos tão rápido quanto $1/d$. Esta simplificação dramática reduz a ação efetiva em:

$$\begin{aligned}
S_{eff} &= \int_0^\beta d\tau \left(\sum_\sigma c_{0\sigma}^\dagger(\tau)(\partial_\tau - \mu)c_{0\sigma}(\tau) + Un_{0\uparrow}(\tau)n_{0\downarrow}(\tau) \right) \\
&\quad - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{0\sigma}^\dagger(\tau)c_{0\sigma}(\tau') \sum_{\langle i, j, 0 \rangle} t_{i0}t_{0j} G_{ij\sigma}^{(0)}(\tau, \tau'), \tag{3.16}
\end{aligned}$$

²A distância de Manhattan entre os vetores $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ e $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ é definida como $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| = |x_1 - y_1| + |x_2 - y_2| + \dots + |x_n - y_n|$.

onde a notação $\langle ij, 0 \rangle$ corresponde aos primeiros vizinhos da cavidade e os elétrons podem propagarem da rede para a cavidade num tempo τ ou propagarem da cavidade até a rede no tempo τ' .

Conexão com o problema de uma impureza

Agora, ao invés de considerar o problema de uma rede por onde os elétrons podem se propagar em vários sítios, vamos considerar um problema onde uma impureza pode trocar elétrons com um banho acoplado a ela. Esse problema é conhecido como problema de uma impureza de Anderson [124] e seu hamiltoniano é dado por:

$$H_{AIM} = H_{\text{átomo}} + H_{\text{banho}} + H_{\text{hibridização}} \quad (3.17)$$

em que

$$\begin{aligned} H_{\text{átomo}} &= U n_{\uparrow}^d n_{\downarrow}^d - \mu (n_{\uparrow}^d + n_{\downarrow}^d) \\ H_{\text{banho}} &= \sum_{l\sigma} \tilde{\varepsilon}_l c_{l\sigma}^{\dagger} c_{l\sigma} \\ H_{\text{hibridização}} &= \sum_{l\sigma} V_l (c_{l\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{\dagger} c_{l\sigma}). \end{aligned} \quad (3.18)$$

O termo $H_{\text{átomo}}$ descreve a impureza em que o problema está sendo mapeado. Nele está contida toda a informação da interação coulombiana quando dois elétrons estão num mesmo sítio da rede. O termo H_{banho} guarda informações dos outros sítios em torno da impureza e o termo $H_{\text{hibridização}}$ relaciona o banho com a impureza. Aqui, um conjunto de férmions não-interagentes (descritos pelo c_l^{\dagger} 's) foi introduzido, que corresponde aos graus de liberdade do banho efetivo. Os $\tilde{\varepsilon}_l$'s e V_l 's são parâmetros que devem ser escolhidos de tal modo que o problema original dado pela equação (3.10) possa ser mapeado no problema auxiliar dado pela equação (3.17). Na verdade, esses parâmetros entram apenas através de uma função de hibridização:

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \varepsilon_l}, \quad (3.19)$$

onde ω_n corresponde às frequências de Matsubara³, para férmions dado por $\omega_n = (2n+1)\pi T$, onde T é a temperatura, $i = \sqrt{-1}$ e n é um número inteiro não negativo.

A ação do Hamiltoniano 3.17 é dada por:

³As frequência de Matsubara ω_n são usadas quando o sistema é descrito no formalismo de temperatura finita. Uma função descrita com ω_n é a transformada de Fourier da função escrita em termos de um tempo imaginário τ . τ é escrito de forma que um operador que dá a evolução da função de onda a partir de um tempo t qualquer é substituído por uma evolução no intervalo de tempo imaginário ($\frac{it}{\hbar} \rightarrow \tau$) [6]. Em síntese, ω_n depende da temperatura e está relacionado com energias que os elétrons podem ter.

$$S_{eff} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_\sigma^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_\sigma(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_\uparrow(\tau) n_\downarrow(\tau), \quad (3.20)$$

em que $\beta = 1/T$, onde T é a temperatura, e

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n). \quad (3.21)$$

Essa ação é compatível com o que é encontrado para a equação 3.16, mostrando ser possível fazer o mapeamento da rede num problema de uma impureza.

Uma informação importante é que a ação local da equação (3.20) representa a dinâmica efetiva do sítio em consideração (ou da impureza), em que, fisicamente, $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ representa a amplitude de ocorrência do processo em que um elétron é criado em um sítio no tempo τ (vindo do “banho externo”, isto é, a partir de outros sítios da rede) e é destruído no tempo τ' (indo de volta para o banho). Sempre que dois férmions com spins opostos estão presentes no sítio, ao mesmo tempo, um custo de energia dado por U é incluído devido à repulsão coulombiana. Assim, esta ação efetiva descreve as flutuações entre os 4 estados atômicos $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$, induzidas pelo acoplamento com o banho. Podemos interpretar $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ como a generalização quântica do campo efetivo de Weiss no caso clássico. A principal diferença com o caso clássico é que o “campo médio dinâmico” é uma função de energia (ou tempo), em vez de um único número. Isso é necessário, a fim de se levar em conta as flutuações quânticas locais, que é o principal objetivo da DMFT. $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ contém informação sobre todos os outros sítios da rede que formam um banho, acoplado a impureza. Seu valor não deve ser confundido com a de uma função local não-interagente ($U = 0$) do modelo original da rede.

Relação de autoconsistência

A quantidade central em que se concentra a DMFT é a função de Green⁴ do problema de uma impureza, que é local:

$$G_{ii}^\sigma(\tau - \tau') \equiv -\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{i\sigma}^\dagger(\tau') \rangle_{Seff} \quad (3.22)$$

onde T_τ é o operador de ordenamento temporal.

Na teoria de campo médio clássica, a magnetização local m_i é aproximada como a de um único spin em i acoplado a um campo de Weiss efetivo, que leva em conta os demais

⁴Um tratamento de funções de Green em sistemas fortemente correlacionados pode ser visto na referência [6]. Através da função de Green, pode-se calcular quantidades de interesse físico como mostrado no apêndice 5, em que é calculada a densidade de estados para elétrons num sólido.

sítios. Analogamente, temos aqui a função de Green interagente local que corresponde a de um único átomo acoplado a um banho efetivo.

Introduzimos então a generalização quântica do campo efetivo de Weiss, e a função de Green local G_{ii} é interpretada como a de um único átomo acoplado a um banho efetivo. Agora temos de generalizar para o caso quântico a aproximação de campo médio para a função de Weiss \mathcal{G}_0 . Isso fará com que haja uma equação equivalente ao caso clássico, relação de autoconsistência da equação (3.9)).

Para o modelo de impureza efetiva da equação (3.20), podemos definir uma auto-energia local $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$ a partir da Função de Green interagente $G(i\omega_n)$ e do campo médio dinâmico de Weiss $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)$ como:

$$\begin{aligned}\Sigma_{imp}(i\omega_n) &\equiv -G^{-1}(i\omega_n) + \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) \\ &= -G^{-1}(i\omega_n) + i\omega_n + \mu - \varepsilon_0 - \Delta(i\omega_n).\end{aligned}\quad (3.23)$$

A equação 3.23 é conhecida como equação de Dyson [125] que advém de relações gerais entre funções de Green através de somas de diagramas de Feynman. Uma forma de obter $\Sigma_{imp}(i\omega)$ a partir de $\Delta(i\omega)$ é resolvendo o problema de uma impureza de Anderson usando a metodologia teoria de perturbação iterada (do inglês, *Iterated Perturbation Theory* - IPT). O apêndice 5 apresenta mais detalhes de como resolver o problema de uma impureza de Anderson através da metodologia IPT.⁵ Embora este método seja uma solução aproximada do problema de impureza, ele fornece a descrição correta da transição do metal-isolante, que é o objetivo deste estudo. Fora de semipreenchimento, a IPT descreve uma teoria de perturbação em U onde sua contribuição de segunda ordem para a auto-energia é dada pela interpolação dos resultados conhecidos para altas e baixas frequências e de valores grandes e pequenos da interação [83, 126]. A comparação com outros métodos como diagonalização exata [126] e Monte Carlo [127] nos dá confiança na implementação de IPT.

Para o modelo de rede inicial, a auto-energia é definida a partir da função de Green $G_{ij}(\tau - \tau') \equiv -\langle T_\tau c_{i,\sigma}(\tau) c_{j,\sigma}^\dagger(\tau') \rangle$, que pode ser escrita como

$$G(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n)}, \quad (3.24)$$

onde $\varepsilon_{\vec{k}}$ é a transformada de Fourier do *hopping*, isto é, a relação de dispersão de banda de condução não interagente com \vec{R}_j a posição de um sítio j :

$$\varepsilon_{\vec{k}} \equiv \sum_j t_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}. \quad (3.25)$$

⁵O problema de uma impureza será resolvido no eixo real para a obtenção direta da densidade de estados, necessária no tratamento que utilizaremos para tratar a desordem, como mostrado na seção 3.2.

Note que a auto-energia $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$ da equação (3.23) não depende do número de onda \vec{k} , diferentemente da auto-energia $\Sigma(\vec{k}, i\omega)$ do modelo de rede presente na equação (3.24). Nesse caso, a DMFT considera, de forma aproximada, que a auto-energia da rede coincide com a da impureza. Negligenciamos todas as componentes não-locais de Σ_{ij} e aproximamos a componente local pela do problema de impureza eliminando a dependência com \vec{k} na auto-energia, ou seja

$$\Sigma_{ii} \simeq \Sigma_{imp}, \quad \Sigma_{i \neq j} \simeq 0. \quad (3.26)$$

Além disso, a DMFT impõe que a função de Green local da rede seja igual à função de Green do problema de uma impureza. Somando a equação (3.24) em \vec{k} e usando as equações (3.23) e (3.26), chega-se à condição de autoconsistência

$$\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\Delta(i\omega_n) + G(i\omega_n)^{-1} + \varepsilon_0 - \varepsilon_{\vec{k}}} = G(i\omega_n). \quad (3.27)$$

Definindo a densidade de estados não-interagente

$$\rho_0(\varepsilon) \equiv \sum_{\vec{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}}), \quad (3.28)$$

a equação (3.27) pode ser reescrita como

$$\int d\varepsilon \frac{\rho_0(\varepsilon)}{\Delta(i\omega_n) + G(i\omega_n)^{-1} + \varepsilon_0 - \varepsilon} = G(i\omega_n). \quad (3.29)$$

Esta condição de autoconsistência relaciona, para cada frequência, o campo médio dinâmico $\Delta(i\omega)$ com a função de Green local, $G(i\omega)$. Além disso, $G(i\omega)$ é a função de Green interagente do modelo de uma impureza efetivo dado pela equação (3.20). Portanto, temos um conjunto fechado de equações que determinam totalmente, em princípio, as duas funções Δ e G (ou \mathcal{G}_0 e G). Na prática, utiliza-se um processo iterativo para resolver a equação (3.29).

Caso clássico	Caso quântico	
$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i$	$-\sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_i H_{\text{átomo}}(i)$	Hamiltoniano
$m_i = \langle S_i \rangle$	$G_{ii}(i\omega_n) = \langle c_i^\dagger(i\omega_n) c_i(i\omega_n) \rangle$	Observável local
$H_W = -h_W S$	$H_W = H_{\text{átomo}} + \sum_{j\sigma} \tilde{\varepsilon}_j a_{j\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \sum_{j\sigma} V_j (a_{j\sigma}^\dagger c_\sigma + c_\sigma^\dagger a_{j\sigma})$	Hamiltoniano efetivo de um sítio
h_W $h_W = Jmz$	$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n)$, onde $\Delta(i\omega_n) = \sum_j \frac{ V_j ^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_j}$	Campo/Função de Weiss
$m = \tanh[\beta h + \beta Jmz]$	$G(i\omega_n) = \sum_{\vec{k}} [\Delta(i\omega_n) + G(i\omega_n)^{-1} - \varepsilon_{\vec{k}}]^{-1}$	Relação de autoconsistência

Tabela 3.1: Correspondência entre a teoria de campo médio de um sistema clássico e a teoria de campo médio dinâmico de um sistema quântico. Baseada em tabela de [15].

Em muitos casos, este processo iterativo converge para uma única solução, independentemente da escolha inicial de $\Delta(i\omega)$. Em alguns casos, no entanto, podem ser encontradas mais do que uma solução estável (por exemplo, perto da transição de Mott). A estreita analogia entre a construção de campo médio clássico e seu caso quântico é resumida na tabela 3.1.

3.1.3 Rede de Bethe

Até aqui, não fizemos uso de especificidades de redes cristalinas. Essa informação é capturada pela densidade de estados não interagente $\rho_0(\epsilon)$, que aparece na relação autoconsistente da equação (3.29).

O tipo de rede deve ser levada em consideração nos cálculos uma vez que pode haver propriedades que dependem do material. Uma rede que não inclua nenhum caminho fechado é, segundo Kurata, Kikuchi e Watari [128], a rede que fornece resultados exatos para o método de aproximação de Bethe-Peierls [129] usado na descrição de ligas cristalinas ou modelos de Ising; daí, ser chamada rede de Bethe. Como a rede de Bethe não coincide com nenhuma rede real, exceto para uma cadeia linear quando a conectividade da rede é $z = 2$, ela é, na realidade, uma pseudo-rede. Segundo Thorpe [130], o uso da rede de Bethe é útil quando se investiga propriedades locais, ou propriedades que não são afetadas pela superfície, já que a superfície da rede de Bethe é comparável a seu volume. Já que nosso objetivo é verificar como ocorrem transições de fase para os modelos trabalhados nesta tese, usaremos a rede de Bethe por ser uma rede mais simples de lidar. Deixaremos o estudo de outras redes, como uma rede quadrada ou até uma rede triangular, onde a frustração magnética pode influenciar na condutividade do material, para um trabalho posterior a este.

A figura 3.3 mostra uma rede de Bethe onde cada sítio é ligado a outros $z = 3$ sítios. Nessa rede, para sair de um sítio e ir para outro, existe apenas um único caminho para percorrer.

A rede de Bethe, mesmo não sendo encontrada em sólidos, pode ser usada para observarmos a transição metal-isolante, sendo esse um dos objetivos deste trabalho. Um motivo para usarmos ela é que, ao considerarmos sua estrutura, pode-se calcular analiticamente a densidade de estados não interagente $\rho_0(\epsilon)$, diminuindo o uso de aproximações numéricas, podendo ser estudado com maior clareza como os efeitos da interação alteram um material. Para isso, é necessário considerar que $z \rightarrow \infty$, limite em que a DMFT é exata e a auto-energia $\Sigma(i\omega_n)$ não depende do vetor de onda \vec{k} mas apenas da frequência ω_n [73]. Nesse caso a densidade de estados é semicircular

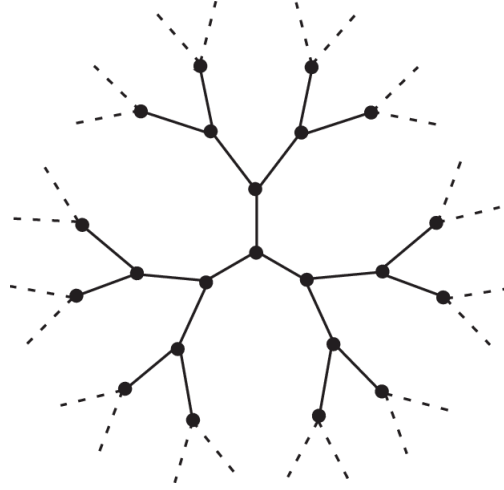


Figura 3.3: Rede de Bethe com conectividade $z = 3$. Figura retirada de [131].

$$\rho_0(\epsilon) = \begin{cases} \frac{2}{\pi D} \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon}{D}\right)^2} & |\epsilon| < D \\ 0 & |\epsilon| > D \end{cases}, \quad (3.30)$$

sendo que $D = 2t$ corresponde à metade da largura da banda de energia.

Resolvendo a equação (3.29) para essa densidade e aplicando o resultado na equação (3.21), encontramos

$$\mathcal{G}_0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - t^2 G(i\omega_n)}. \quad (3.31)$$

Podemos comparar a equação (3.31) com a equação (3.21), obtendo:

$$\Delta(i\omega_n) = t^2 G(i\omega_n). \quad (3.32)$$

Assim, pela DMFT, o modelo de Hubbard na rede de Bethe com $z \rightarrow \infty$ é mapeado em um problema auxiliar de uma impureza embebida em um banho de elétrons de condução dada pela equação (3.32). Pela equação (3.23), temos ainda que

$$G(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n) - \Sigma(i\omega_n)}, \quad (3.33)$$

que é uma relação autoconsistente para $G(i\omega_n)$. Assim como a equação (3.9), $G(i\omega_n)$ pode ser calculado de maneira autoconsistente. Para isso, com um valor de interação U e $\Delta(i\omega_n)$ pode-se calcular $\Sigma(i\omega_n)$ resolvendo o problema de uma impureza com um dos métodos disponíveis na literatura. Depois, $G(i\omega_n)$ é obtido pela equação (3.33) e $\Delta(i\omega_n)$ pela equação (3.32). Com um novo $\Delta(i\omega_n)$, $\Sigma(i\omega_n)$ é calculado até que o cálculo convirja.

3.2 Tratando efeitos da interação e da desordem

Desenvolveremos nesta seção a Teoria do Meio Típico, metodologia que usamos para tratar problemas desordenados. Tendo os sistemas desordenados e interagentes bem fundamentados será mostrada a parte computacional do nosso trabalho, onde explicaremos nosso algoritmo e testes que fizemos. A principal referência usada para estudar a metodologia aqui apresentada foi [13].

3.2.1 Teoria do Meio Típico (TMT)

Um valor de energia ε_0 fixo para todos os sítios i de uma rede cristalina significa que todos os sítios possuem a mesma energia local. Como os sítios são idênticos, basta uma função auto-energia $\Sigma(i\omega_n)$ para descrever o problema de uma impureza da DMFT. Queremos estudar efeitos de desordem e para isso a energia em cada sítio não será mais fixa. A diferença em relação ao Hamiltoniano descrito pela equação (3.10) está em considerar ε_i ao invés de ε_0 , sendo agora chamado de modelo de Anderson-Hubbard:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \mu) n_{i\sigma}. \quad (3.34)$$

Neste trabalho, nós usaremos que todos os valores de ε_i são igualmente prováveis. Isso significa que num intervalo entre $-W/2$ e $W/2$, onde W é o parâmetro que usaremos para controlar o tamanho da desordem, teremos a probabilidade $P(\varepsilon_i) = \frac{1}{W}$ de um sítio ter energia ε_i , assim como descrito na figura 3.4. Outras distribuições de impurezas podem fornecer diferentes resultados do que encontramos neste trabalho. Focamos apenas na distribuição uniforme pois ela já é suficiente para observar todos os fenômenos de nosso interesse. Apesar de simples, com essa distribuição já é possível observar vários comportamentos da matéria, compondo um diagrama de fase rico em informações. Veremos mais detalhes disso no capítulo de resultados.

O processo básico envolvido na transição metal-isolante induzida por desordem é a localização da função de onda, ou localização de Anderson, sem que haja a formação de um *gap* de energia próximo ao nível de Fermi. A Teoria do Meio Típico (do inglês, *Typical Medium Theory* - TMT) considera o valor típico ou mais provável das grandezas, produzindo uma descrição de campo médio da localização de Anderson e, conseqüentemente, da transição metal-isolante devido à desordem [13]. No caso, como os sítios possuem diferentes energias ε_i entre si, será necessário calcular um *ensemble* de problemas de uma impureza com cada impureza associada a um valor de ε_i e a uma auto-energia $\Sigma_i(i\omega_n)$. Essa teoria pode ser incorporada à DMFT, de forma que podemos tratar sistemas desordenados e fortemente correlacionados ao mesmo tempo.

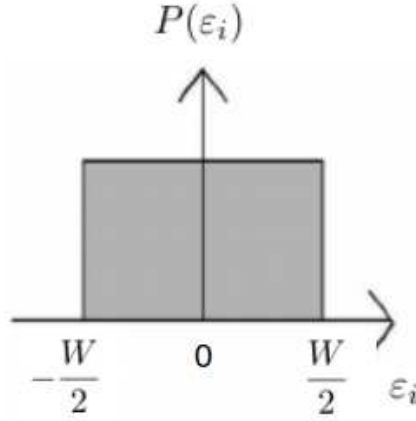


Figura 3.4: Probabilidade $P(\varepsilon_i)$ constante de um sítio ter energia ε_i no intervalo entre $-W/2$ e $W/2$.

O ponto de partida da TMT é motivado pela formulação original de Anderson em adotar um ponto de vista local da densidade de estados. A densidade de estados local muda qualitativamente e apresenta comportamento crítico na transição de Anderson. No caso, quando o elétron se localiza, o espectro local vai de contínuo a discreto e o valor típico da densidade de estados local vai para zero.

Tendo em vista que na TMT é necessário calcular a densidade de estados local diversas vezes, é interessante que as variáveis obtidas sejam calculadas no eixo real, uma vez que nesse eixo a densidade de estados é obtida de maneira simples ao tomar a parte imaginária da função de Green, assim como mostrado no apêndice 5, diminuindo a propagação de erros numéricos ao longo de cada iteração da DMFT. No eixo real, a frequência ω_n discreta é substituída por um ω contínuo ao fazermos continuação analítica, podendo usar $\omega + i\eta$, quando $\eta \rightarrow 0$. A combinação da DMFT com a TMT, onde o problema de uma impureza de Anderson é resolvido com a metodologia IPT, possui a vantagem de ser numericamente rápida, sendo suficiente para nos permitir construir o diagrama de fases de problemas interagentes desordenados.

Para o modelo de Anderson-Hubbard descrito na equação (3.34) podemos construir uma função de Green similar à da equação (3.33), sendo agora considerados os diferentes valores de ε_i :

$$G(\omega, \varepsilon_i) = \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon_i - \Delta(\omega) - \Sigma_i(\omega)}, \quad (3.35)$$

onde $\Delta(\omega)$ representa o banho típico que as impurezas vêm e será obtido de forma autoconsistente como na DMFT e detalhado a seguir. Com essa função de Green pode-se obter a densidade de estados local através da equação $\rho(\omega, \varepsilon_i) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\omega, \varepsilon_i)$.

O valor típico da densidade de estados pode ser estimado por uma média geométrica, que, para uma rede de N_{imp} impurezas, é dada por

$$\rho_{typ}(\omega) = [\rho(\omega, \varepsilon_1) \cdot \rho(\omega, \varepsilon_2) \cdot \rho(\omega, \varepsilon_3) \cdot \dots \cdot \rho(\omega, \varepsilon_{N_{imp}})]^{1/N_{imp}}, \quad (3.36)$$

Podemos escrever então

$$\begin{aligned} \ln \rho_{typ}(\omega) &= \frac{1}{N_{imp}} \sum_{i=1}^{N_{imp}} \ln \rho(\omega, \varepsilon_i) = \langle \ln \rho(\omega, \varepsilon_i) \rangle, \\ \rho_{typ}(\omega) &= \exp \langle \ln \rho(\omega, \varepsilon_i) \rangle. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Fazendo o número de impurezas tender a infinito $N_{imp} \rightarrow \infty$ haverá um contínuo de valores ε_i . Nesse caso a equação (3.37) fica:

$$\rho_{typ}(\omega) = \exp \left[\int P(\varepsilon) \ln \rho(\omega, \varepsilon_i) d\varepsilon \right]. \quad (3.38)$$

Queremos calcular a função de Green típica $G_{typ}(\omega)$ e sabemos que a parte imaginária pode ser obtida por uma relação do tipo $\rho_{typ}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{typ}(\omega)$. Já a parte real pode ser obtida por via da transformada de Hilbert⁶:

$$\text{Re} G_{typ}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{typ}(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega'. \quad (3.39)$$

Tendo a função $G_{typ}(\omega)$ podemos encontrar a função hibridização $\Delta(\omega)$ e fechar a relação de autoconsistência. Para a rede de Bethe isso pode ser feito usando a equação

$$\Delta(\omega) = t^2 G_{typ}(\omega), \quad (3.40)$$

que é semelhante ao que vimos no caso sem desordem.

Com o cálculo convergido podemos verificar se o sistema possui estados eletrônicos localizados olhando para $\rho_{typ}(\omega)$. Se $\rho_{typ}(\omega = 0)$ for igual a zero, o sistema é isolante, caso contrário é um metal. Mesmo convergindo $\rho_{typ}(\omega)$, que é baseada numa média geométrica, podemos calcular a média aritmética da densidade de estados, que não vai a zero com o aumento da desordem. Essa função representa os estados estendidos e localizados do sistema [132]. Para isso basta fazer

$$\rho_{av} = \frac{1}{N_{imp}} [\rho(\omega, \varepsilon_1) + \rho(\omega, \varepsilon_2) + \dots + \rho(\omega, \varepsilon_{N_{imp}})] = \frac{1}{N_{imp}} \sum_i^{N_{imp}} \rho(\omega, \varepsilon_i). \quad (3.41)$$

⁶Uma explicação mais detalhada da transformada de Hilbert é mostrada no apêndice 5

Numa versão onde $N_{imp} \rightarrow \infty$ temos

$$\rho_{av} = \int P(\varepsilon) \rho(\omega, \varepsilon_i) d\varepsilon. \quad (3.42)$$

O cálculo autoconsistente é realizado conforme descrito a seguir. Partimos de uma função inicial para o banho e resolvemos N_{imp} problemas de uma impureza, obtendo as funções de Green locais $G(\omega, \varepsilon_i) = [\omega - \varepsilon_i - \Delta(\omega) - \Sigma_i(\omega)]^{-1}$. Das funções de Green locais, obtemos $\rho(\omega, \varepsilon_i)$, a partir das quais encontramos $\rho_{typ}(\omega)$ como apresentado na equação (3.36). Por meio de uma transformada de Hilbert (equação (3.39)), obtemos então a função de Green típica. Para a rede de Bethe, o cálculo autoconsistente é fechado pela relação $\Delta(\omega) = t^2 G_{typ}(\omega)$, que fornece-nos um novo banho.

O cálculo feito até então não mostra detalhes referentes à dopagem eletrônica δ da rede. Para considerar a dopagem é necessário variar o potencial químico μ , que já é considerado nas equações apresentadas até aqui. O valor de δ desejado pode ser calculado pela equação

$$\delta = 2 \langle n_{i\sigma} \rangle_{av} - 1, \quad (3.43)$$

onde $\langle n_{i\sigma} \rangle_{av} = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \rho_{av}(\omega) d\omega$ é a integral da densidade de estados média até o nível de Fermi.

Outras quantidades também podem ser extraídas desse cálculo como a ocupação por sítio e por spin $\langle n_{i\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \rho(\omega, \varepsilon_i) d\omega$, que nos mostra dados de configurações possíveis dos elétrons em um sítio, e o somatório sobre todos os estados estendidos da rede $\zeta = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{typ}(\omega) d\omega$, que nos mostra se existem estados estendidos para algum valor de ω .

3.2.2 Implementação numérica da DMFT-TMT

Em síntese, vimos neste capítulo que o modelo de Hubbard pode ser tratado via DMFT mapeando uma rede de elétrons que interagem localmente, possuindo assim muitos graus de liberdade, num problema auxiliar de uma impureza acoplada a um banho não interagente. Essa metodologia resulta em equações autoconsistentes que são resolvidas numericamente. No modelo de Anderson-Hubbard é considerado que a energia local ε_i muda em cada sítio, gerando várias impurezas no mapeamento da DMFT, sendo agora utilizada a metodologia DMFT-TMT (união da DMFT com a TMT) para resolver esse problema. Na DMFT-TMT a rede é mapeada num *ensemble* de problemas de uma impurezas acopladas a um banho não interagente.

Na figura 3.5 é mostrado um fluxograma que resume o cálculo iterativo da DMFT-TMT para o modelo de Anderson-Hubbard, usado na implementação numérica deste trabalho. Abaixo estão escritos os passos para essa implementação.

- (I): Escolhe-se uma função inicial para a hibridização $\Delta_0(\omega)$, um valor para o potencial químico μ_0 e usamos N_{imp} valores de ε_i que seguem a distribuição $P(\varepsilon_i) = 1/W$ no intervalo $\{-W/2, W/2\}$;
- (II): Calcula-se as autoenergias $\Sigma_i(\omega)$, via teoria de perturbação iterativa (apêndice 5);
- (III): Calcula-se a função de Green $G(\omega, \varepsilon_i)$ para cada impureza;
- (IV): Calcula-se a densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ para cada impureza;
- (V): Calcula-se a média geométrica $\rho_{typ}(\omega)$ sobre todas as densidades de estados calculadas no item (IV);
- (VI): Com a transformada de Hilbert constroe-se a função de Green típica $G_{typ}(\omega)$;
- (VII): Calcula-se parâmetros como o número de ocupação por sítio e por spin $\langle n_{i\sigma} \rangle$ ou a soma das densidades de estados sobre todos os estados estendidos ζ ;
- (VIII): Uma nova função de hibridização $\Delta(\omega)$ é obtida e volta-se para o passo (II), até que haja convergência da função de Green típica $G_{typ}(\omega)$, ou seja, até que seu valor em uma iteração seja próximo do valor da iteração anterior;
- (IX): Tendo a função de Green típica convergida, calcula-se $\rho_{av}(\omega)$;
- (X): A dopagem auxiliar⁷ δ' é calculada;
- (XI): Atualiza-se o potencial químico μ e depois retorna-se para o item (II). O potencial químico é modificado até que a dopagem δ' calculada numericamente seja igual à dopagem δ escolhida;

Dado que a função de Green $G_{typ}(\omega)$ e o potencial químico μ estão convergidos, é gerado um arquivo de saída do código. Esse arquivo possui as quantidades de interesse desta tese: Densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$, densidade de estados típica $\rho_{typ}(\omega)$, densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$, ocupação por sítio e por spin $\langle n_{i\sigma} \rangle$, soma da densidade de estados sobre estados estendidos ζ e o potencial químico μ . O primeiro retângulo da figura 3.5, com numeração indo de (II) até (VIII), contém as equações básicas da DMFT-TMT. Já o segundo retângulo, com numeração indo de (IX) até (XI), corresponde às mudanças necessárias para considerar efeitos da dopagem no cálculo.

⁷A dopagem auxiliar é definida para fins de convergência do programa. Ela é calculada a partir de $\delta' = 2\langle n'_{i\sigma} \rangle_{av} - 1$, onde $\langle n'_{i\sigma} \rangle_{av} = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \rho'_{av}(\omega) d\omega$ e $\rho'_{av}(\omega)$ é a densidade de estados média de cada iteração do programa. δ' tende a ser idêntico ao valor desejado δ à medida que o cálculo converge.

É importante ressaltar que para o cálculo numérico obter os resultados com maior velocidade os valores de $\Delta_0(\omega)$ e μ_0 devem ser estimados como valores relativamente próximos do que queremos obter. Um método de fazer isso é usar soluções de cálculos já conhecidos dentro de uma fase, como um resultado que originou um metal por exemplo, e a partir desse cálculo mudar os parâmetros suavemente para encontrar novos resultados dentro da mesma fase.

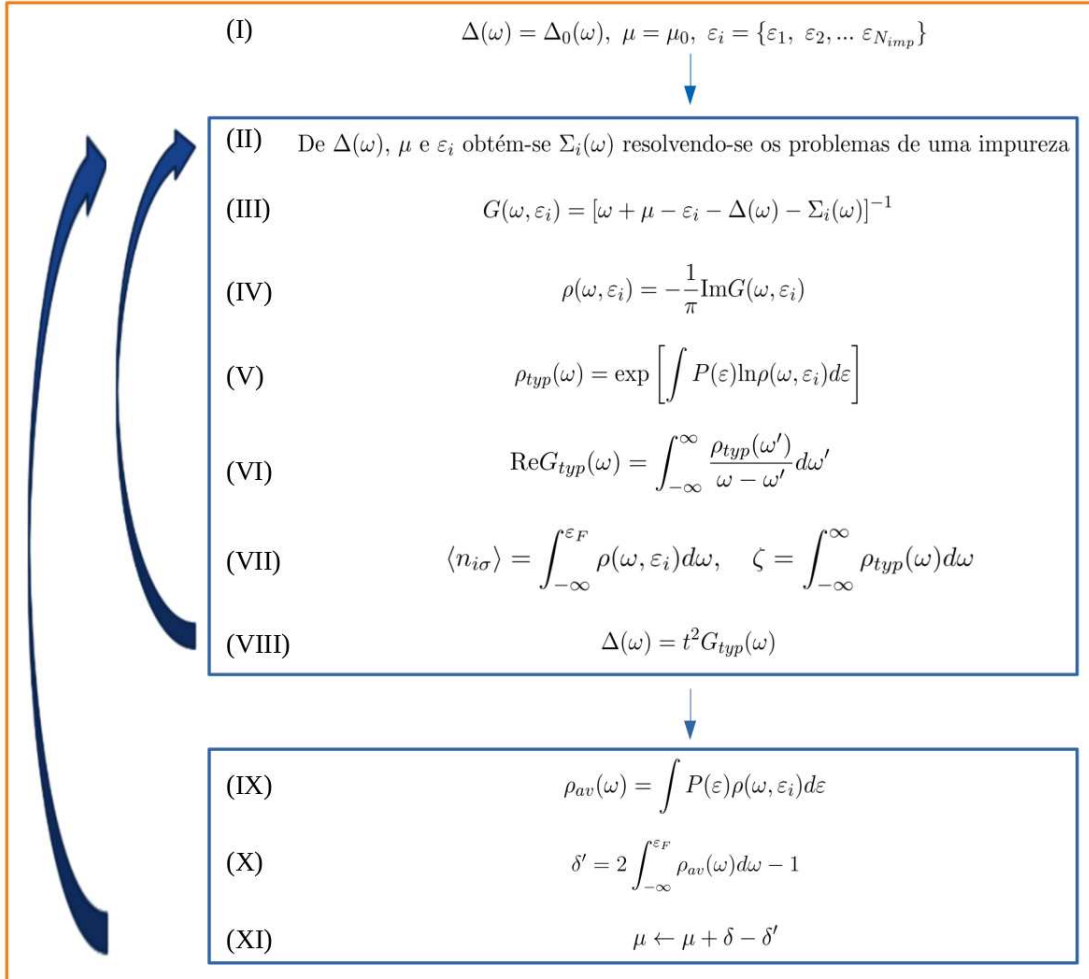


Figura 3.5: Fluxograma do cálculo iterativo da DMFT-TMT para o modelo de Anderson-Hubbard.

3.2.3 Cálculo analítico para estados localizados

O fato da desordem poder localizar todos os estados da rede torna favorável o uso de cálculos analíticos, auxiliando nosso entendimento do modelo de Anderson-Hubbard. Quando todos os estados estão localizados, a função de Green para cada problema de uma impureza é dada por [18]:

$$G_\sigma(\omega, \varepsilon_i) = \frac{1 - \langle n_{i,-\sigma} \rangle}{\omega - \varepsilon_d} + \frac{\langle n_{i,-\sigma} \rangle}{\omega - \varepsilon_d - U}. \quad (3.44)$$

Isso significa que a densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ é descrita por funções delta de Dirac:

$$\rho(\omega, \varepsilon_i) = \begin{cases} \langle n_{i,-\sigma} \rangle \delta(\omega - (\varepsilon_d + U)), & \text{quando } \omega \text{ é em torno de } \varepsilon_d + U; \\ (1 - \langle n_{i,-\sigma} \rangle) \delta(\omega - \varepsilon_d), & \text{quando } \omega \text{ é em torno de } \varepsilon_d. \end{cases} \quad (3.45)$$

A DMFT+TMT consegue capturar numericamente essa função de Green quando a desordem do sistema é alta e existe a localização de Anderson, o que implica que $G_{typ}(\omega) \rightarrow 0$ e a função que guarda informações sobre a hibridização de um sítio com os demais torna-se zero, $\text{Im}\Delta(\omega) = 0$. No entanto, algumas flutuações podem aparecer no cálculo DMFT-TMT, especialmente porque o número de impurezas no cálculo numérico é finito. Alternativamente podemos utilizar o procedimento descrito aqui no caso da fase em que há localização de Anderson.

Considerando que os sítios tratados possuem dois níveis de energia, ε_d e $\varepsilon_d + U$, podemos nos basear numa distribuição fermiônica para estipular o valor da ocupação nos sítios a uma temperatura finita T , ou seja:

$$\langle n_{i\sigma} \rangle = \frac{1/2}{1 + e^{(\varepsilon_d)/T}} + \frac{1/2}{1 + e^{(\varepsilon_d+U)/T}}, \quad (3.46)$$

onde a temperatura foi mantida em todo o trabalho no valor $T = 0.01$.

Ao considerar temperatura em $\langle n_{i\sigma} \rangle$ também teremos que considerar pequenas flutuações de energia em torno dos picos descritos pela equação (3.45). Um método de fazermos isso é adicionar um termo imaginário $i\Gamma$ nos denominadores da equação (3.44); podemos tomar $\Gamma \rightarrow 0^+$, caso desejarmos fazer $T \rightarrow 0$. Considerando isso, temos,

$$\begin{aligned} \rho(\omega, \varepsilon_i) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\omega, \varepsilon_i) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\frac{1 - \langle n_{i\sigma} \rangle}{\omega - \varepsilon_d + i\Gamma} + \frac{\langle n_{i\sigma} \rangle}{\omega - \varepsilon_d - U + i\Gamma} \right) = \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\frac{(1 - \langle n_{i\sigma} \rangle)(\omega - \varepsilon_d - i\Gamma)}{(\omega - \varepsilon_d + i\Gamma)(\omega - \varepsilon_d - i\Gamma)} + \frac{(\langle n_{i\sigma} \rangle)(\omega - \varepsilon_d - U - i\Gamma)}{(\omega - \varepsilon_d - U + i\Gamma)(\omega - \varepsilon_d - U - i\Gamma)} \right) = \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\frac{(1 - \langle n_{i\sigma} \rangle)(\omega - \varepsilon_d) - i(1 - \langle n_{i\sigma} \rangle)\Gamma}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \Gamma^2} + \frac{\langle n_{i\sigma} \rangle(\omega - \varepsilon_d - U) - i\langle n_{i\sigma} \rangle\Gamma}{(\omega - \varepsilon_d - U)^2 + \Gamma^2} \right) = \\ &\quad \rho(\omega, \varepsilon_i) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{(1 - \langle n_{i\sigma} \rangle)\Gamma}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \Gamma^2} + \frac{\langle n_{i\sigma} \rangle\Gamma}{(\omega - \varepsilon_d - U)^2 + \Gamma^2} \right). \end{aligned} \quad (3.47)$$

O valor de Γ na equação (3.47) atua alargando os picos de $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ que estão centralizados em $\omega = \varepsilon_d$ e $\omega = \varepsilon_d + U$. Assim, $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ deixa de ter funções delta de Dirac e passa a

ter um comportamento semelhante a uma função lorentziana. Note que $\Gamma > 0$ pois senão geraria densidades de estados com valores negativos. No limite em que $\Gamma \rightarrow 0^+$ cada um desses picos se tornarão funções delta de Dirac novamente. Com a expressão (3.47) para $\rho(\omega, \varepsilon_i)$, pode-se calcular $\rho_{typ}(\omega)$ e $\rho_{av}(\omega)$ assim como descrito pelas equações (3.38) e (3.42), respectivamente, para os casos em que há localização de Anderson (desordem alta).

3.2.4 Testes das metodologias usadas

Nesta subseção são mostrados resultados por onde podemos ver como é a convergência da DMFT-TMT, como resultados da DMFT-TMT se comparam com os das equações analíticas e também o que acontece em função do número de impurezas no material bem como a geração de ruídos originários dos efeitos da desordem. Tais fatores são importantes de serem mostrados para que fique mais claro como os dados estão sendo obtidos ou como melhor interpretá-los. O objetivo desta subseção não é explicar os mecanismos físicos dos dados obtidos, tópico que será deixado para o capítulo de resultados. O objetivo desta subseção é detalhar um pouco mais como obter os resultados com a metodologia usada.

Quanto maior é o critério de convergência de um cálculo autoconsistente maior será a nossa garantia de que os resultados analisados compreendem a física desejada, diminuindo as incertezas numéricas. Existem alguns modos de testar a convergência em cálculos autoconsistentes. Em geral, escolhemos algum parâmetro do problema e verificamos o quão próximo seu valor está do valor na iteração anterior. A partir de um valor de iteração as mudanças no parâmetro tornam-se muito menores que um critério estabelecido. Quando isso ocorre dizemos que o critério de convergência foi atingido. Para um metal esse critério é atingido com um número menor de iterações do que para um isolante. No nosso cálculo, escolhemos a função que descreve o banho $\Delta(\omega)$ para podermos verificar a convergência. $\Delta(\omega)$ contém uma parte real e uma parte imaginária, sendo um número complexo para cada valor de ω . Para saber a convergência podemos fixar um valor $\omega = \omega_i$ e subtrair a parte real e imaginária de $\Delta(\omega_i)$ em uma iteração das respectivas partes da função banho $\Delta_{ant}(\omega_i)$ na iteração anterior. Depois elevamos ao quadrado cada uma das partes reais e imaginárias encontradas, resultando em $[\text{Im}\Delta(\omega_i) - \text{Im}\Delta_{ant}(\omega_i)]^2 + [\text{Re}\Delta(\omega_i) - \text{Re}\Delta_{ant}(\omega_i)]^2$ e normalizamos esse valor com o módulo de $\Delta_{ant}(\omega_i)$ dado por $[\text{Im}\Delta_{ant}(\omega_i)]^2 + [\text{Re}\Delta_{ant}(\omega_i)]^2$. Dessa forma, o valor da convergência para todos os valores de ω_i é dado por:

$$\text{convergência} = \sum_i \frac{[\text{Im}\Delta(\omega_i) - \text{Im}\Delta_{ant}(\omega_i)]^2 + [\text{Re}\Delta(\omega_i) - \text{Re}\Delta_{ant}(\omega_i)]^2}{[\text{Im}\Delta_{ant}(\omega_i)]^2 + [\text{Re}\Delta_{ant}(\omega_i)]^2}. \quad (3.48)$$

Identificamos nos nossos cálculos que para qualquer conjunto de parâmetros U , W e μ , o valor de $\Delta(\omega)$ de uma iteração é muito próximo do seu valor na iteração anterior quando

convergência $< 10^{-3}$, sendo esse o critério de convergência usado.

A figura 3.6 mostra como é a convergência de um cálculo da DMFT-TMT para o conjunto de parâmetros $U = 3$, $W = 1$, $\delta = 0.2$ e $\mu = 2.644$. Esse cálculo corresponde a um metal. Podemos ver na figura 3.6(a) a densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$ para diferentes valores do parâmetro convergência definido acima. Podemos ver que $\rho_{av}(\omega)$ tende a não variar à medida que a convergência diminui. Nesse caso, todos os parâmetros em uma iteração estão próximos dos valores da iteração anterior. A figura 3.6(b) mostra o parâmetro convergência em função das iterações da DMFT-TMT. Podemos ver que a convergência tende a ser cada vez menor à medida que o cálculo evolui.

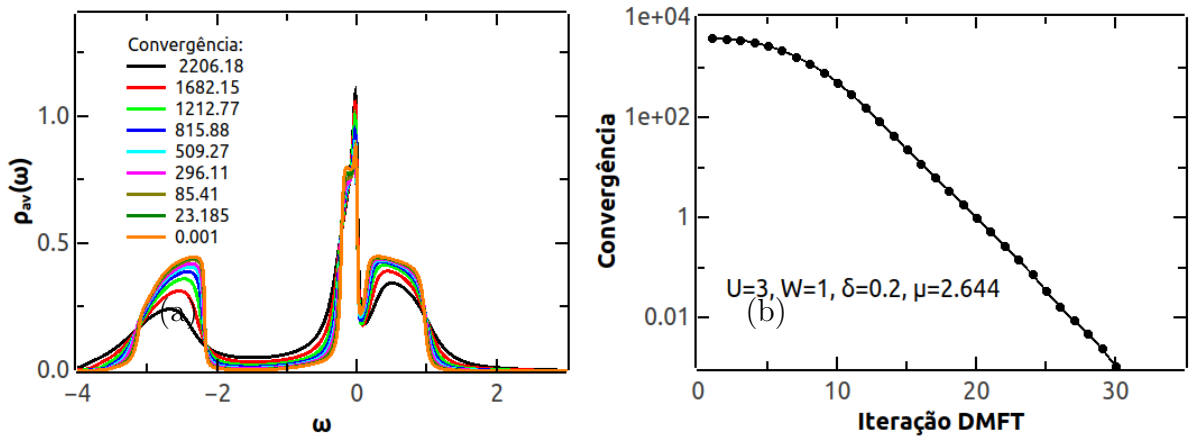


Figura 3.6: (a) Densidade de estados $\rho_{av}(\omega)$ para diferentes iterações da DMFT-TMT. (b) Convergência em função da iteração da DMFT-TMT. Os parâmetros usados são $U = 3$, $W = 1$, $\delta = 0.2$ e $\mu = 2.644$.

Com a DMFT-TMT convergida podemos analisar suas quantidades e fazer comparações com outras metodologias. Para o caso em que a desordem W é grande é possível fazer uma comparação da DMFT-TMT com as equações da seção 3.2.3. A figura 3.7 mostra essa comparação para $U = 3$, $W = 4$, $\delta = 0.2$ e $\mu = 1.91$. A curva contínua é para a DMFT-TMT enquanto os círculos são para a equação 3.47. Foram escolhidos três valores de ε_i para realizarmos essa comparação. Os valores $\varepsilon_i = -2$ ou $\varepsilon_i = 2$ geram apenas um pico com valor máximo relativamente grande. Já $\varepsilon_i = 0$ gera dois picos com tamanhos máximos menores. Como esperado, as duas metodologias capturam a posição dos picos da densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ de maneira similar uma vez que possuem os mesmos ε_i . A principal diferença é que o cálculo feito com a equação 3.47 gera picos de mesmo tamanho. Como exemplo, compare a altura máxima dos círculos quando $\varepsilon_i = -2$ e $\varepsilon_i = 2$ ou dos dois picos de $\varepsilon_i = 0$. Além disso, os picos menores em $\varepsilon_i = 0$ possuem a metade do tamanho de quando $\varepsilon_i = -2$ ou $\varepsilon_i = 2$. Quanto à DMFT+TMT, existem picos com tamanhos máximos variados devido a imprecisões numéricas. Essas variações de tamanhos

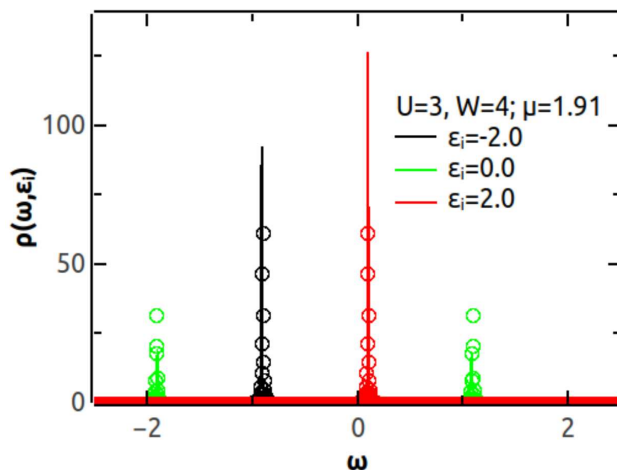


Figura 3.7: Densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ calculadas com a DMFT-TMT (linha contínua) e equação 3.47 (círculos). Os parâmetros usados foram $U = 3$, $W = 4$, $\delta = 0.2$ e $\mu = 1.91$ considerando $\varepsilon_i = -2$, $\varepsilon_i = 0$ e $\varepsilon_i = 2$.

máximos dos picos contribuem para a formação de ruídos na densidade de estados média, pois, quando consideramos os muitos problemas de uma impureza, para cada valor de ω_i próximo de ω_j existirá um valor $\rho_{av}(\omega_i)$ muito diferente de $\rho_{av}(\omega_j)$.

Dado que o código está atendendo a um bom critério de convergência, vamos verificar como são os resultados no caso em que a desordem é grande e temos que controlar o número de impurezas N_{imp} . Podemos ver na figura 3.8 que quando N_{imp} é relativamente pequeno existe uma grande quantidade de ruídos na densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$ no cálculo DMFT-TMT, o que prejudica a visualização dos gráficos. Em parte, isso acontece

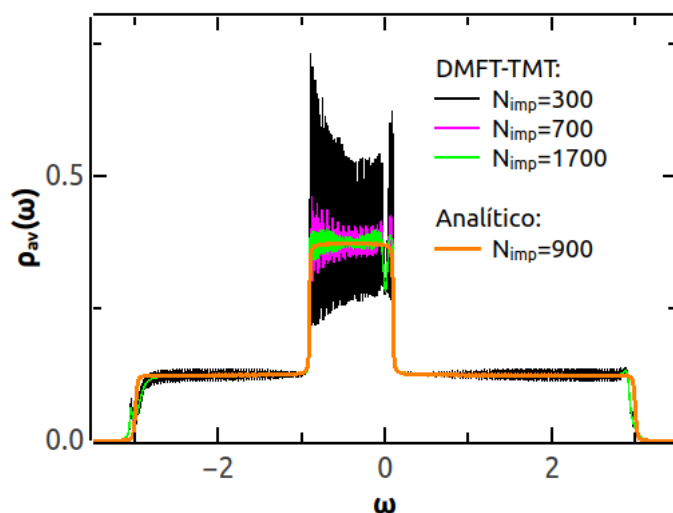


Figura 3.8: Densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$ ao variar N_{imp} utilizando a DMFT-TMT e o cálculo analítico. Os parâmetros usados foram $U = 3$, $W = 4$, $\delta = 0.2$ e $\mu = 1.91$.

porque cada problema de uma impureza corresponde a picos de tamanhos variados, assim como discutido anteriormente. Outro motivo é que os picos são estreitos, sendo necessário um número grande o suficiente de picos para gerar uma densidade de estados média suave. Para um valor de N_{imp} suficientemente grande o cálculo DMFT-TMT se aproxima cada vez mais do resultado obtido com a equação analítica discutida na subseção 3.2.3, que necessita de um número menor de impurezas para que $\rho_{av}(\omega)$ torne-se suave. Uma vantagem do cálculo analítico é que além de gerar um resultado suave, o que favorece sua visualização, podemos aumentar o número de impurezas de $N_{imp} = 300$, valor que usamos na DMFT-TMT, para valores muito além. Isso significa que é possível gerar curvas sem nenhum ruído para uma grande faixa de desordem. Algo importante de ser comentado é que não notamos uma mudança suficientemente relevante dos fenômenos físicos analisados, como transição de fase, ao mudar N_{imp} quando essa quantidade já é suficientemente grande. Ou seja, para $N_{imp} = 300$, valor usado para gerar os resultados da DMFT-TMT, as linhas que definem as transições de fase não mudam para N_{imp} maiores.

Capítulo 4

Resultados

Apresentamos neste capítulo os resultados obtidos para o modelo de Anderson-Hubbard, resolvido via DMFT-TMT, discutindo em particular os limites desse modelo, a descrição de cada fase e a visão geral de todo o trabalho resumido em diagramas de fase. Os principais resultados deste trabalho foram publicados na revista *Physical Review B* [133] e o artigo é reproduzido no apêndice 5.

A presença da interação U entre elétrons num sítio pode levar o sistema a ser um isolante de Mott, e a desordem W pode gerar um isolante de Anderson. A combinação dos efeitos de U e W junto com efeitos de dopagem δ faz um material ter outros tipos de isolantes que não são descritos por cada um dos parâmetros independentemente. O modelo em que vemos todos esses efeitos é o modelo de Anderson-Hubbard com dopagem:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \mu) n_{i\sigma}, \quad (4.1)$$

com as definições feitas na seção 3.2.

Sintetizando o capítulo 3 de metodologia, na seção 3.1 um sistema de elétrons interagentes foi tratado via DMFT, mapeando o problema da rede em um problema auxiliar, dado por um único sítio acoplado a um banho de elétrons de condução. O problema auxiliar é descrito pelo Hamiltoniano de Anderson de uma impureza (equação 18 do apêndice 5). Já na seção 3.2, vimos que o modelo de Anderson-Hubbard é mapeado em vários problemas de uma impureza, relacionados com cada valor de ε_i ; cada problema de uma impureza é resolvido tendo um banho em comum, depois, para obter a resposta do sistema como um todo, é feita uma média geométrica da densidade de estados local, que corresponde ao valor típico de densidade de estados. A função de Green para cada problema de uma

impureza é escrita como

$$G(\omega, \varepsilon_i) = \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon_i - \Delta(\omega) - \Sigma_i(\omega)}, \quad (4.2)$$

onde $\varepsilon_i - \mu = \varepsilon_{di}$ é a energia do nível localizado da impureza, $\Delta(\omega)$ representa o banho dos elétrons de condução a que as impurezas estão acopladas, que é determinado de forma autoconsistente, e $\Sigma_i(\omega)$ é a auto energia do problema de uma impureza, que é proporcional à interação U . Com o valor de $G(\omega, \varepsilon_i)$ pode-se calcular a densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ através da relação $\rho(\omega, \varepsilon_i) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\omega, \varepsilon_i)$ e o valor típico da densidade de estados local, que descreve todos os estados estendidos do sistema:

$$\rho_{typ}(\omega) = \exp \left[\int d\varepsilon P(\varepsilon) \ln \rho(\omega, \varepsilon) \right], \quad (4.3)$$

onde $P(\varepsilon)$ é a distribuição da energia local usada, que no nosso caso, consideramos constante no intervalo $-W/2 < \varepsilon < W/2$.

É possível descrever os estados estendidos somados aos estados localizados ao considerar a média aritmética de $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ após o cálculo já ter convergido. Isso é feito através da equação:

$$\rho_{av}(\omega) = \int d\varepsilon P(\varepsilon) \rho(\omega, \varepsilon). \quad (4.4)$$

Para resolver o modelo de Anderson-Hubbard, o código utilizado neste trabalho partiu da implementação já feita por nosso colaborador J. Vučičević (*Scientific Computing Laboratory, Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*) para o problema de uma impureza, citado no item II do fluxograma 3.2.2 do capítulo de metodologia e descrito no apêndice 5, onde foi usada teoria de perturbação iterativa para encontrar $\Sigma_i(\omega)$. Após obtermos familiaridade com o código do problema de uma impureza, implementamos o cálculo auto consistente da DMFT para o modelo de Hubbard, e depois adaptamos o cálculo para conter várias impurezas que vêm um mesmo banho e potencial químico, assim como mostrado no fluxograma da figura 3.5 da seção 3.2.2.

Para casos em que sabemos que os estados estão localizados, realizamos um outro cálculo para complementar nosso trabalho. Na verdade, a densidade de estados local pode ser descrita como:

$$\rho(\omega, \varepsilon_i) = -\frac{1}{\pi} \left(\frac{(1 - \langle n_{i\sigma} \rangle) \Gamma}{(\omega - \varepsilon_{di})^2 + \Gamma^2} + \frac{\langle n_{i\sigma} \rangle \Gamma}{(\omega - \varepsilon_{di} - U)^2 + \Gamma^2} \right), \quad (4.5)$$

que recai no limite atômico quando $\Gamma \rightarrow 0^+$. $\langle n_{i\sigma} \rangle$ é a ocupação eletrônica no sítio i com spin σ :

$$\langle n_{i\sigma} \rangle = \frac{1/2}{1 + e^{(\varepsilon_{di})/T}} + \frac{1/2}{1 + e^{(\varepsilon_{di}+U)/T}}, \quad (4.6)$$

onde a temperatura foi mantida constante em todo o trabalho no valor $T = 0.01$, em unidades de energia igual à largura $2D$ da banda de energia da rede de Bethe no caso limpo e não interagente ($2D = 4t = 1$).

4.1 Regimes conhecidos do modelo de Anderson-Hubbard

No modelo de Anderson-Hubbard alguns parâmetros podem assumir valores tais que os cálculos sejam mais fáceis ou já conhecidos na literatura. Isso pode favorecer a análise de pontos que não são encontrados nesses limites. Assim, discutimos nesta seção os limites do modelo de Anderson-Hubbard onde a dopagem é finita $\delta > 0$ e a desordem é nula $W = 0$, bem como o caso em que a dopagem é nula $\delta = 0$ e a desordem é finita $W > 0$.

4.1.1 Casos onde $\delta > 0$ e $W = 0$

Quando um material é considerado um metal há estados estendidos em torno do nível de Fermi. Na presença de dopagem há transferência de peso espectral entre regiões de altas energias e regiões de baixas energias. Um exemplo dessa situação é mostrado na figura 4.1 para interação $U = 1$ pequeno. Ao iniciar com uma estrutura de três picos (ver figura 4.1(a)), similar à figura 2.11 do capítulo 2, podemos ver como a dopagem modifica os diferentes estados gerando a figura 4.1(b). Podemos ver na figura 4.1(b) que ainda existe uma estrutura de três picos, apesar de não estar simétrica em relação ao nível de Fermi em $\omega = 0$. Também podemos notar que os picos em baixa e alta energias diminuíram sua amplitude máxima e o pico em torno do nível de Fermi ficou um pouco mais largo. δ pode crescer até o caso em que todos os estados estarão abaixo do nível de Fermi. Nessa situação a densidade de estados terá um formato semi-circular. Não existirão mais os picos de baixa e alta energia e os elétrons não propagarão nessa configuração, pois um elétron não irá para outro sítio que já está totalmente preenchido.

A dopagem δ cresce com o potencial químico μ . Podemos ver esse fato na figura 4.2 onde é mostrada uma curva da dopagem δ versus o potencial químico μ . Quando $\mu = U/2$ a dopagem é nula. Se μ cresce os estados do sistema são deslocados para abaixo do nível de Fermi fazendo com que haja mais elétrons do que buracos. Isso representa a mudança de peso espectral mostrada na figura 4.1. A partir de um ponto, a dopagem fica constante e com valor $\delta \approx 1$. Nesse estágio, a dopagem faz com que não exista propagação de elétrons por não haver estados no nível de Fermi, sendo o sistema um isolante.

Para analisar o que acontece com altas interações U , podemos olhar para a figura 4.3(a),

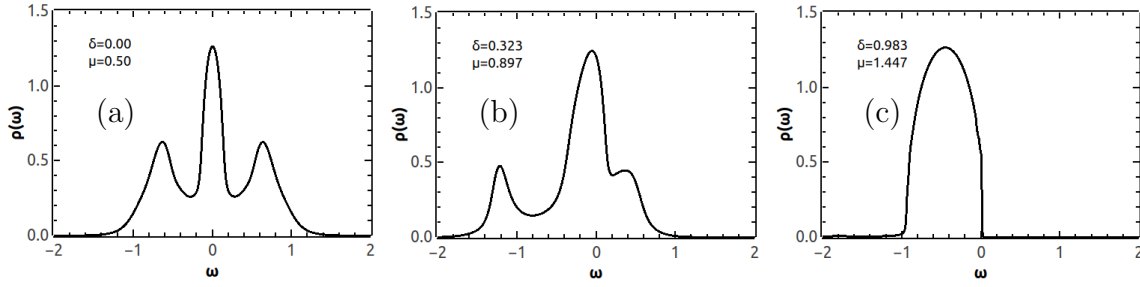


Figura 4.1: Densidades de estados quando $W = 0$ e $U = 1$. (a) $\delta = 0.0$. (b) $\delta = 0.323$. (c) $\delta \approx 1$.

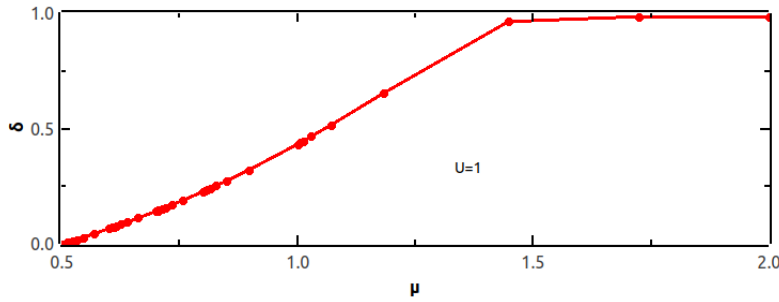


Figura 4.2: Dopagem δ em função do potencial químico para $U = 1$ e $W = 0$.

obtida para $U = 3$. Nela é mostrado um isolante de Mott, existente quando a dopagem é nula. Essa é uma configuração bem diferente da figura 4.1(a), uma vez que estamos partindo de outra fase, que tem a ausência de estados no nível de Fermi. A presença de dopagem faz o isolante de Mott se tornar um metal, com as bandas de Hubbard deslocadas para níveis mais baixos de energia (ver figura 4.3(b)). Nessa situação também existe um pico em torno do nível de Fermi. Esse pico é mais estreito que no caso mostrado da figura 4.1. Ainda existe um *gap* no sistema sendo ele deslocado para baixas energias. Na dopagem máxima, figura 4.3(c), ocorre uma situação semelhante à figura 4.1(c): a densidade de estados é semicircular e totalmente deslocada para abaixo do nível de Fermi. Podemos notar que quando $\delta = 1$ os efeitos da interação são suprimidos, uma vez que diferentes valores de U recaem na mesma densidade de estado quando $\delta = 1$.

Identificamos que ao plotar a dopagem em função do potencial químico, o comportamento para $U = 3$ é diferente do encontrado para $U = 1$. Para um isolante de Mott, à medida que μ cresce, é necessário vencer um *gap* antes de fazer qualquer transferência de peso espectral em torno do nível de Fermi. Por causa disso, ao sair de simetria partícula-buraco, o potencial químico pode variar sem que haja uma mudança efetiva no valor da dopagem. Essa situação é representada na figura 4.4. Para alterar a dopagem δ , μ precisa percorrer uma distância mínima correspondente à distância do nível de Fermi até a borda

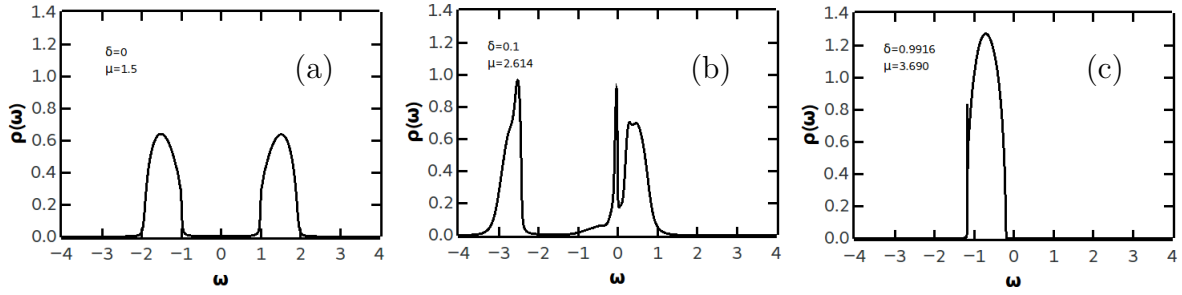


Figura 4.3: Densidades de estados quando $W = 0$ e $U = 3$. (a) $\delta = 0.0$. (b) $\delta = 0.1$. (c) $\delta \approx 1$.

da banda que está em energias mais altas. A partir do momento que o *gap* é vencido, a dopagem passa a variar de modo similar ao que acontece em um metal.

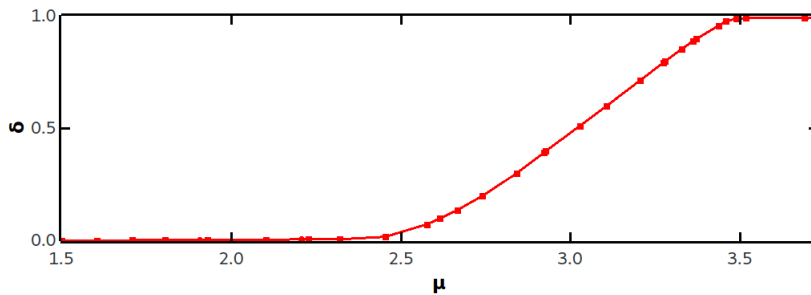


Figura 4.4: Dopagem δ em função do potencial químico para $U = 3$ e $W = 0$.

4.1.2 Casos onde $\delta = 0$ e $W > 0$

No limite em que a dopagem é nula, $\delta = 0$, e há desordem na rede, $W > 0$, o diagrama de fase do modelo de Anderson-Hubbard recai no apresentado na figura 2.21(a) [113] do capítulo 2. Para esse caso, existe um metal, um isolante de Mott e um isolante de Anderson-Mott. Analisaremos nesta seção um pouco mais dessas fases para depois, nas seções seguintes, entendermos o que acontece quando também existe dopagem.

Para dopagem nula temos o potencial químico $\mu = U/2$. No caso desordenado, as densidades de estados locais $\rho(\omega, \epsilon_i)$ variam dependendo do sítio i analisado. O valor de $\rho(\omega, \epsilon_i)$ assim como suas médias (ver equações 4.3 e 4.4) serão calculadas aqui. Destacamos que o comportamento de $\rho_{av}(\omega)$ não foi bem explorado no trabalho [113] e, portanto, mostraremos esses resultados nesta seção. A figura 4.5 mostra diferentes tipos de configurações para $\rho(\omega, \epsilon_i)$ que existem quando a interação $U = 1$ é pequena. As figuras 4.5(a)-(c) compreendem o caso de desordem baixa $W = 1$, onde o sistema é metálico. Nessas figuras existe um pico de maior amplitude em torno do nível de Fermi, que é uma

característica dos metais. Além disso, existem dois picos de menor amplitude e afastados do nível de Fermi, que fazem referência às configurações dos níveis de energia de cada sítio, centralizados em ε_d e $\varepsilon_d + U$. As figuras 4.5(d)-(f) correspondem a um isolante de Anderson-Mott, quando a desordem é grande, $W = 3.5$. Nesse caso, as densidades de estados locais são dadas pela equação 4.5. Podemos ver que existem sítios onde toda a densidade de estados está deslocada para abaixo do nível de Fermi, apresentando apenas um pico em torno de $\varepsilon_d + U$, assim como descrito na figura 4.5(d). Essa configuração de sítios sempre existirá para desordens suficientemente grandes. A figura 4.5(e) segue uma configuração similar ao caso de desordem fraca, mas sem o pico em torno do nível de Fermi, ou seja, os estados são identificados apenas em torno de ε_d e $\varepsilon_d + U$. Além disso, os picos são mais estreitos e com maior amplitude. Também existe a configuração onde todos os estados estão posicionados acima do nível de Fermi, gerando a figura 4.5(f), onde há apenas um pico posicionado em ε_d . A figura 4.5(f) segue o mesmo comportamento da figura 4.5(d) mas agora para buracos.

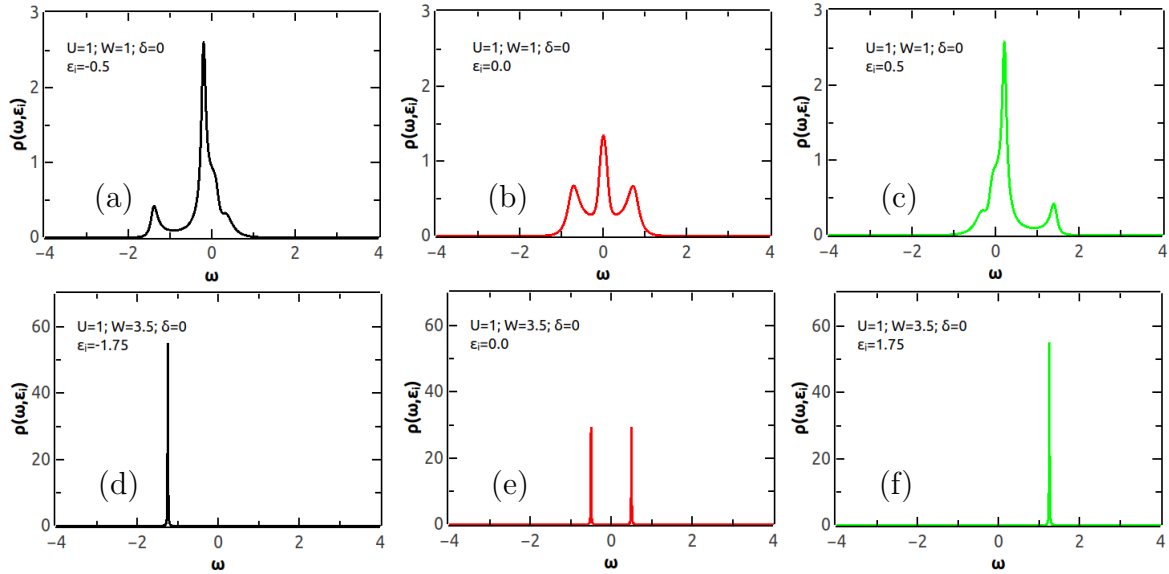


Figura 4.5: Diferentes configurações para $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ mantendo $U = 1$ e $\delta = 0$. Quando $W = 1$: (a) $\varepsilon_i = 0.5$; (b) $\varepsilon_i = 0$; e (c) $\varepsilon_i = 0.5$. Quando $W = 3.5$: (d) $\varepsilon_i = -1.75$; (e) $\varepsilon_i = 0$; e (f) $\varepsilon_i = 1.75$.

A partir de configurações semelhantes ao encontrado na figura 4.5, ao se somar sobre todos os sítios da rede, é possível obter a densidade de estados para o sistema. A figura 4.6(a) mostra a densidade de estados típica $\rho_{typ}(\omega)$ para $U = 1$ e diferentes valores de desordem W . Essa quantidade descreve todos os estados estendidos da rede. Podemos ver que, quando a desordem aumenta, existe uma diminuição do peso espectral começando pelas bordas. Quando a desordem é grande, os estados estendidos se localizam, mostrando que o

sistema saiu de um metal e foi para um isolante de Anderson-Mott, onde só existem estados localizados. A figura 4.6(b) mostra a densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$, representando estados estendidos somados aos estados localizados, seguindo os mesmos parâmetros da figura 4.6(a). O valor de $\rho_{av}(\omega)$ sempre está normalizado, $\int_{-\infty}^{\infty} \rho_{av}(\omega) d\omega = 1$, já que a desordem apenas converte estados estendidos em localizados, não sendo possível nesse modelo haver perda de peso espectral. Podemos ver que à medida que a desordem cresce a configuração dos três picos em $\rho_{av}(\omega)$ desaparece e é formado um platô correspondendo aos de estados localizados, ou seja, para um intervalo em ω o valor de $\rho_{av}(\omega)$ é constante. Esse platô ocorre pois os níveis de energia ε_i estão distribuídos uniformemente ao longo do intervalo $-W/2 < \varepsilon_i < W/2$ no modelo considerado por nós.

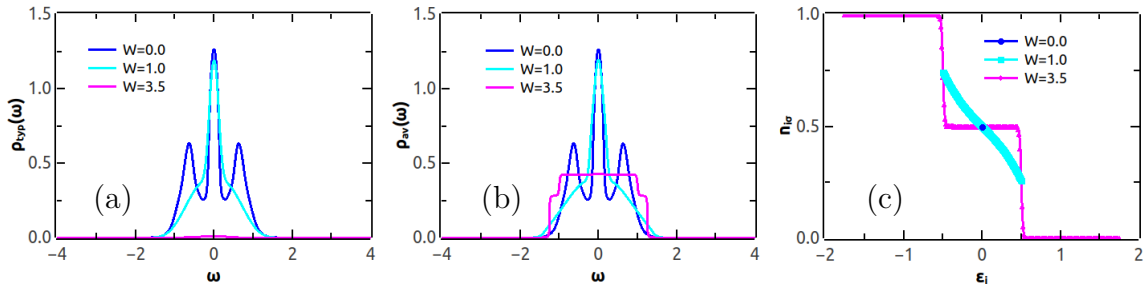


Figura 4.6: (a) Densidade de estados típica $\rho_{typ}(\omega)$. (b) Densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$. (c) Ocupação por sítio e por spin $\langle n_{i\sigma} \rangle$. Os parâmetros usados foram $U = 1$ e $\delta = 0$.

A figura 4.6(c) apresenta o número de ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle$ para cada sítio da rede. Em um metal é possível um sítio ter várias ocupações, fator esse que vai depender da probabilidade de um elétron propagar até um sítio qualquer. Por causa disso o valor da ocupação tende a variar suavemente entre os valores de $\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$, $\langle n_{i\sigma} \rangle = 1/2$ e $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0$. Para um isolante não haverá probabilidade dos elétrons propagarem por toda a rede já que estarão localizados. Isso faz com que em cada sítio a ocupação tenha um número bem determinado de elétrons. Nesse caso, o mais provável de acontecer com um sítio é: não estar ocupado $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0$; ter ocupação simples $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$; ou ter dupla ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$. Isso é válido no limite atômico, uma vez que, de acordo com nossa metodologia, $\Delta(\omega) \rightarrow 0$ para grandes valores de W .

Podemos realizar uma análise semelhante à da figura 4.5 para o caso em que o sistema tem U grande, ou seja, partindo de um isolante de Mott ao invés de um metal. A figura 4.7 mostra exemplos de $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ para esse caso. Podemos ver que existem apenas dois picos, centralizados em ε_d e $\varepsilon_d + U$ para cada $\rho(\omega, \varepsilon_i)$, quando $W = 1$ (ver figura 4.7(a)-(c)). Mesmo analisando outros valores de ε_i entre o máximo ou o mínimo, ainda assim, não é possível ver uma mudança de configuração em $\rho(\omega, \varepsilon_i)$, sendo sempre $\varepsilon_d < \varepsilon_F < \varepsilon_d + U$.

Ou seja, esses picos não cruzarão o nível de Fermi enquanto o sistema estiver na fase isolante de Mott. Outra característica existente para grandes interações e pouca desordem é que $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ possui picos mais largos e de menor amplitude. Quando a desordem cresce, o sistema se torna um isolante de Anderson-Mott (ver figuras 4.7(d)-(f)). Esse é o mesmo tipo de isolante da figura 4.6 para $U = 1$ e $W = 3.5$. Apesar disso, o caminho para se tornar um isolante de Anderson-Mott é diferente. Para $U = 1$ é necessário localizar elétrons que podem se propagar pelos sítios. Para $U = 3$ é necessário preencher com estados localizados o *gap* em torno do nível de Fermi. Quando isso ocorrer, sítios com densidade de estados totalmente deslocados para abaixo do nível de Fermi ou para cima passarão a existir, como visto nos painéis (d) e (f).

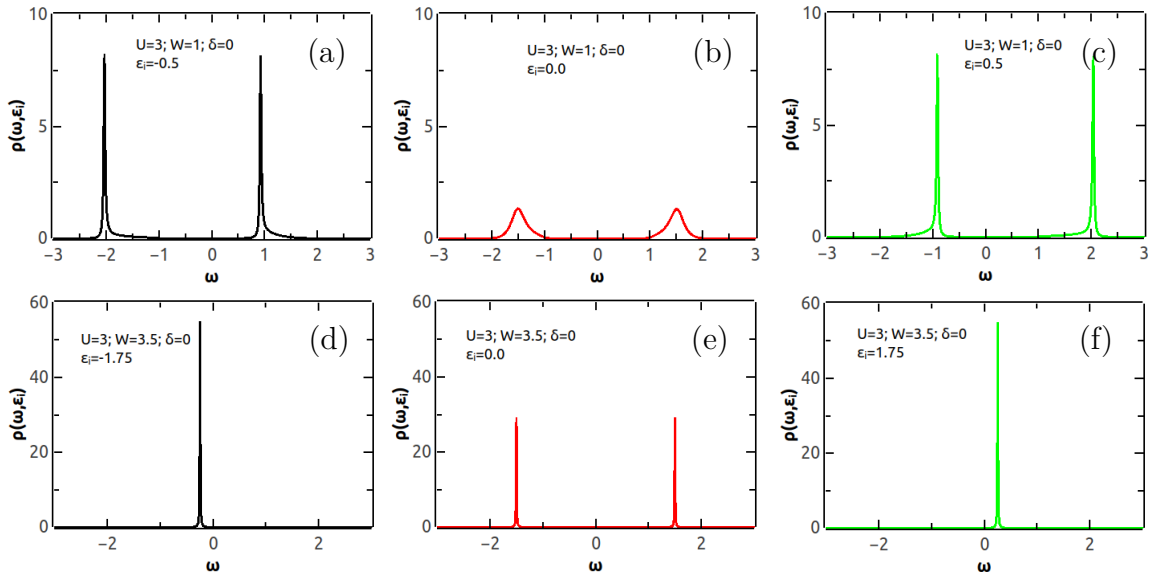


Figura 4.7: Diferentes configurações para $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ mantendo $U = 3$ e $\delta = 0$. (a)-(c) $W = 1$. (d)-(f) $W = 3.5$.

A figura 4.8(a) mostra $\rho_{typ}(\omega)$ quando $U = 3$. Mesmo a desordem atuando no material, desde que seja baixa ou intermediária, é o *gap* em torno do nível de Fermi, que é devido aos efeitos da interação, quem será o responsável principal por fazer o sistema ser um isolante. Então, por mais que estados estendidos deixem de existir, o sistema ainda continuará sendo um isolante de Mott ao invés de um isolante de Anderson-Mott. Nesse caso, todos os sítios da rede estarão em semipreenchimento assim como no isolante de Mott. A figura 4.8(b) mostra $\rho_{av}(\omega)$ para as mesmas configurações de parâmetros da figura 4.8(a). Apesar dos estados estarem localizados, como em $W = 2.5$, ainda podemos ver as duas bandas de Hubbard com um *gap* entre elas. Esse *gap* no nível de Fermi só é fechado para um valor de desordem em torno de $W = U$. Até chegar em $W = U$, a desordem não consegue induzir a formação de estados localizados em torno do nível de Fermi. Quando $W > U$,

haverá um elevação na densidade de estados em torno do nível de Fermi dando origem a um outro platô em $\rho_{av}(\omega)$. Esse platô ficará mais largo a medida que a desordem cresce. Podemos ver na figura 4.8(c) que para baixas desordens só existe sítios com $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$, evidenciando que todos os sítios se comportam como num isolante de Mott. Para grandes desordens existem sítios com dupla ocupação, sem ocupação e com ocupação simples assim como num isolante de Anderson-Mott. O intervalo de ε_i corresponde a $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$ será igual a U para o isolante de Anderson-Mott em semipreenchimento.

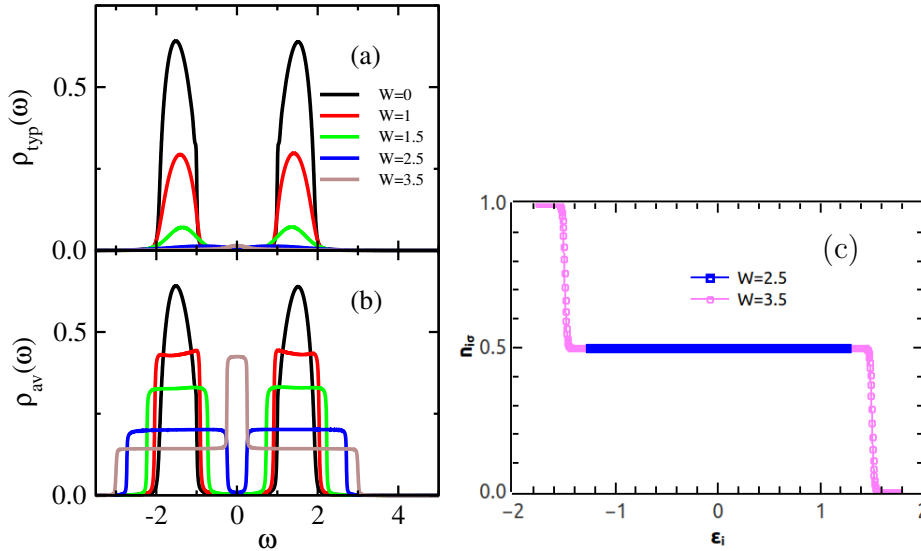


Figura 4.8: (a) Densidade de estados típica $\rho_{typ}(\omega)$. (b) Densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$. (c) Ocupação por sítio e por spin $\langle n_{i\sigma} \rangle$. Os parâmetros usados foram $U = 3$ e $\delta = 0$.

4.2 Diagramas de fase

Nas seções anteriores foram descritos os regimes conhecidos do modelo de Anderson-Hubbard para os casos onde $\delta > 0$ e $W = 0$ ou $\delta = 0$ e $W > 0$, para interações U fraca ou forte. A situação onde $U > 0$, $\delta > 0$ e $W > 0$, nunca foi bem compreendida do ponto de vista teórico. Saber o que ocorre para U , δ e W não nulos é de grande importância uma vez que, a partir desse entendimento, teremos descrições de sistemas que se aproximam cada vez mais de materiais reais. O foco deste trabalho está em montar diagramas de fase, descrevendo assim uma visualização geral do que acontece com o modelo de Anderson-Hubbard usando a rede de Bethe.

Os diagramas de fase da desordem W em função da dopagem δ quando consideramos interação fraca ($U = 1$), interação intermediária ($U = 2$) e interação forte ($U = 3$) são mostrados na figura 4.9. Esses valores de interações correspondem a três casos diferentes

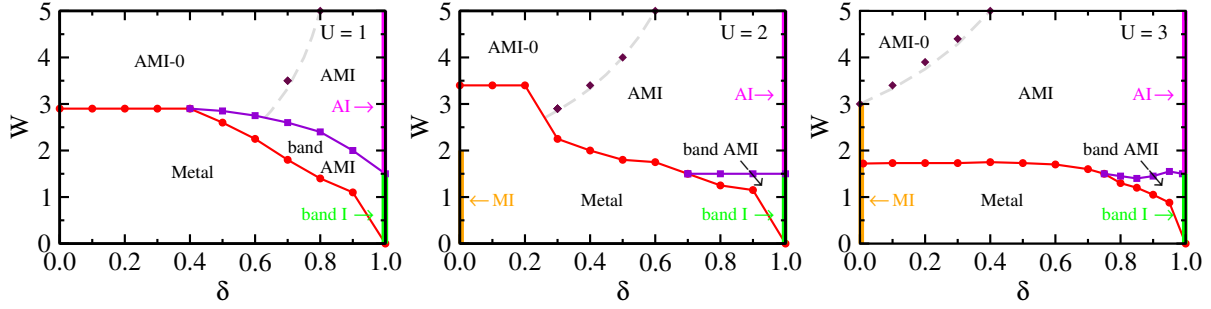


Figura 4.9: Diagrama de fase da desordem W versus a dopagem δ para o modelo de Anderson-Hubbard. As interações usadas foram $U = 1$ à esquerda, $U = 2$ no meio e $U = 3$ na direita.

do modelo simétrico [113]: um em que, quando a desordem cresce, a transição ocorre de um metal para um isolante de Anderson-Mott ($U = 1$), um em que o sistema vai de um isolante de Mott para um isolante de Anderson-Mott ($U = 3$) e um terceiro, em que o sistema vai de um isolante de Mott para um metal e depois para um isolante de Anderson-Mott ($U = 2$).

Quando a desordem é nula, $W = 0$, existirá apenas a fase metálica no modelo de Anderson-Hubbard, exceto nos pontos $\delta = 0$ e $\delta = 1$. Para $\delta = 0$ e uma interação suficientemente grande existe um isolante de Mott (indicado em laranja nos diagramas para $U = 2$ e $U = 3$). No caso de $\delta = 1$ existirá um isolante de bandas (indicado em verde nos três diagramas da figura 4.9). Esse caso é explicado na seção 4.1.1. Quando a dopagem é nula e existe desordem no sistema existirá um metal, um isolante de Mott, para uma interação suficientemente grande, e um isolante de Anderson-Mott, como descrito na seção 4.1.2.

Tendo em vista que os diagramas de fase da figura 4.9 apresentam fases em comum, podemos olhar para o diagrama em que $U = 1$ e depois mostraremos o que ocorre para outras interações. Para $U = 1$, existe um metal e uma fase isolante que é dividida em subregiões: um isolante de Anderson-Mott com sítios sem ocupação eletrônica (AMI-0); um isolante de Anderson-Mott onde não existem sítios sem ocupação (AMI); um isolante com comportamento que lembra os isolantes de bandas e de Anderson-Mott (*band AMI*); um isolante de bandas (BI); e um isolante de Anderson com $\delta = 1$ (AI). A região AMI-0 corresponde ao mesmo isolante com W grande descrito na seção 4.1.2 onde é considerado semipreenchimento.

A linha com círculos vermelhos do diagrama de fase representa a transição entre o metal e a fase isolante. Essa transição será explicada com maiores detalhes na seção 4.3. A linha tracejada cinza, obtida a partir do cálculo analítico, divide o isolante de Anderson-Mott nas regiões AMI-0 e AMI. Os losangos marrons são resultados da DMFT-TMT e coincidem

com a linha tracejada cinza que separa o AMI-0 do AMI. Mais detalhes sobre essa divisão serão mostrados nas seções 4.4.1 e 4.4.2. A linha com quadrados roxos é um divisor entre a região onde o sistema tem características do isolante de bandas e as regiões que não possuem características do isolante de bandas. Detalhes sobre essa linha com quadrados roxos serão melhores explorados na seção 4.4.3. Por fim, para $\delta = 1$ e desordem W pequena existe um isolante de banda, enquanto para W grande existe um isolante de Anderson. Mais detalhes do que ocorre nessas regiões serão mostrados nas seções 4.4.4 e 4.4.5.

Podemos notar nos diagramas de fases que a variação da interação U causa mudanças nas linhas divisórias das fases/regiões. Quando o sistema está em semipreenchimento, surge o isolante de Mott com o crescimento de U . Além disso, a região metálica para grande interação, $U = 3$, diminui em relação ao caso onde a interação é pequena, $U = 1$, sendo o caso $U = 2$ intermediário. Já o isolante tende a deixar de ser AMI-0 e se tornar AMI à medida que a interação cresce. Para pouca desordem é encontrado um metal em uma grande região do diagrama de fase para qualquer valor de U . Para qualquer interação, a transição entre o metal e a fase isolante tende a se manter constante para uma dopagem pequena ou até para uma dopagem intermediária. Essa transição de fase tende a mudar à medida que a dopagem se torna máxima, $\delta = 1$, onde a interação é totalmente inibida.

Os diagramas de fases para $U > 3$ seguirão os comportamentos descritos na subseção 4.3.3, onde o valor da desordem crítica em que ocorre a transição entre o metal e o isolante se torna invariante com U . Dessa forma, os diagramas gerados por $U > 3$ seguirão o mesmo formato que $U = 3$. A diferença é que a região onde existe o isolante de Mott em $\delta = 0$ crescerá e será necessário uma desordem maior para fazer existir sítios sem ocupação (assim como será descrito pela equação 4.7).

Tendo em vista que o diagrama de fase da figura 4.9 possui várias fases/regiões, vamos agora fazer um resumo dos parâmetros que descrevem cada uma das fases/regiões, como pode ser encontrado na tabela 4.1.

A principal característica de um metal é possuir estados estendidos no nível de Fermi, $\rho_{typ}(\omega = 0) > 0$. Consequentemente a soma de estados estendidos e localizados no nível de Fermi também será maior que zero, ou seja, $\rho_{av}(\omega = 0) > 0$, e também a soma de todos os estados estendidos será $\zeta = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{typ}(\omega) d\omega > 0$. Todos os isolantes terão $\rho_{typ}(\omega = 0) = 0$, sendo as outras quantidades determinantes para diferenciar cada região. O isolante de Mott terá um *gap* no nível de Fermi fazendo com que $\rho_{av}(\omega = 0) = 0$. Todas as regiões influenciadas pelos efeitos descritos por Anderson e por Mott em conjunto, cujo nome possuem “AMI”, terão estados localizados no nível de Fermi, $\rho_{av}(\omega = 0) > 0$, enquanto um isolante de Anderson tem $\rho_{av}(\omega = 0)$ diferente de zero. Da mesma maneira que um isolante de Mott, o *band* I e o AI com $\delta = 1$ também terão $\rho_{av}(\omega = 0) = 0$, já que a dopagem deslocou todos os estados do sistema para abaixo do nível de Fermi. O isolante de Mott

	$\rho_{typ}(\omega = 0)$	$\rho_{av}(\omega = 0)$	ζ	$\langle n_{i\sigma} \rangle$
Metal	> 0	> 0	> 0	$0 \leq \langle n_{i\sigma} \rangle \leq 1$
Isolante de Mott	$= 0$	$= 0$	≥ 0	$\langle n_{i\sigma} \rangle = 1/2$
AMI-0	$= 0$	> 0	$= 0$	$0 \leq \langle n_{i\sigma} \rangle \leq 1$
AMI	$= 0$	> 0	$= 0$	$1/2 \leq \langle n_{i\sigma} \rangle \leq 1$
<i>band</i> AMI	$= 0$	> 0	> 0	$1/2 \leq \langle n_{i\sigma} \rangle \leq 1$
<i>band</i> I	$= 0$	$= 0$	> 0	$\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$
AI com $\delta = 1$	$= 0$	$= 0$	$= 0$	$\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$

Tabela 4.1: A primeira coluna corresponde às regiões do modelo de Anderson-Hubbard na presença de dopagem. As outras colunas são parâmetros para diferenciar cada região: densidade de estados típica no nível de Fermi $\rho_{typ}(\omega = 0)$; densidade de estados média no nível de Fermi $\rho_{av}(\omega = 0)$; soma de todos os estados estendidos $\zeta = \int_{-\infty}^0 \rho_{typ}(\omega) d\omega$; ocupação por sítio e por spin $\langle n_{i\sigma} \rangle$.

pode ter estados estendidos ou localizados ao longo de ω , sendo sua característica mais relevante que esses estados sejam separados por um *gap* no nível de Fermi. Na prática isso faz com que $\zeta \geq 0$ para o isolante de Mott. Os isolantes com desordem alta, como AMI-0, AMI ou AI, terão todos os estados localizados, fazendo com que $\zeta = 0$. Já os isolantes existentes para baixa desordem terão estados estendidos para alguns valores de ω , fazendo com que $\zeta > 0$.

Em cada região do modelo de Anderson-Hubbard será permitido um tipo de organização eletrônica em cada sítio. Assim, um outro parâmetro importante de ser analisado é a ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle$. Num metal será permitido um contínuo de ocupação, podendo existir sítios com qualquer ocupação por spin entre 0 e 1. Para o isolante de Mott só existirão sítios com ocupação simples, $\langle n_{i\sigma} \rangle = 1/2$. Quando a desordem é baixa, como no *band* AMI, ou intermediária, como no AMI, haverá apenas sítios que tenham ocupações que sejam iguais ou maiores que uma ocupação simples, dessa forma, $1/2 \leq \langle n_{i\sigma} \rangle \leq 1$. Quando a desordem é alta, assim como no AMI-0, haverá sítios com ocupação simples, ocupação dupla ou sítios sem ocupação, $0 \leq \langle n_{i\sigma} \rangle \leq 1$. Para dopagens iguais a $\delta = 1$, todos os sítios serão obrigados a ter $\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$.

4.3 Transição metal-isolante

Nesta seção iremos abordar como ocorre a transição metal-isolante ao considerar simultaneamente efeitos de interação, desordem e dopagem no modelo de Anderson-Hubbard. Começaremos mostrando que a interação e a dopagem podem favorecer os efeitos da desordem ao localizar os elétrons. Depois, exploraremos o parâmetro de ordem adequado para descrever a transição metal-isolante. Por fim, mostraremos o que acontece com essa transição para interações mais fortes que as consideradas anteriormente. Assim, descreveremos a transição metal-isolante para qualquer parâmetro do nosso modelo.

4.3.1 Dopagem e Interação favorecem efeitos da desordem

Como visto na subseção 4.1.1, na ausência de desordem e presença da dopagem, o modelo de Anderson-Hubbard sempre descreve um metal para qualquer interação. Esse fato persiste quando é considerada pouca desordem, assim como mostrado na figura 4.10. Tanto na figura 4.10(a), onde $\delta = 0.2$, quanto na figura 4.10(b), onde $\delta = 0.4$, é mostrado $\rho_{typ}(\omega)$ representando metais para diferentes valores de interação U . Sabemos que quando não há desordem toda a densidade de estados não nula descreve estados estendidos. Ao fixar um valor de desordem, como $W = 1.5$, podemos ver que o crescimento de U na presença de dopagem faz com que a região de estados estendidos diminua. Existem diferenças entre o metal encontrado quando a interação é baixa e não há dopagem e aquele em que a interação é grande e é dopado. Quando U é grande, o pico existente no nível de Fermi tem largura menor do que quando a interação é pequena. O pico estreito significa que as quase-partículas possuem uma massa efetiva maior, tendo maior dificuldade em propagar pela rede. A transição ocorre quando $\rho_{typ}(\omega)$ desaparece, indicando que os estados do sistema localizaram totalmente. Tudo isso implica que o sistema com $U = 3$ está mais próximo de se tornar um isolante do que quando $U = 1$. Isso faz com que um metal originário de um isolante de Mott dopado seja mais susceptível à localização de Anderson do que um metal existente em baixa correlação. Esse fato descrito neste trabalho sugere que existem condições tais que a interação e a dopagem favorecem os efeitos da desordem em localizar os estados da matéria.

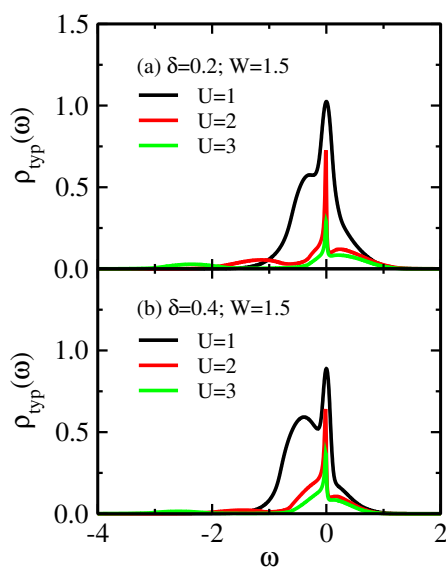


Figura 4.10: Comparação de $\rho_{typ}(\omega)$ em função da frequência para $U = 1$, $U = 2$ e $U = 3$ para baixas desordens, onde o sistema ainda é metálico. (a) $\delta = 0.2$. (b) $\delta = 0.4$. Em todos os casos a desordem é $W = 1.5$.

Podemos também analisar o que ocorre a nível local quando variamos a interação U e mantemos W pequeno. A figura 4.11 mostra a densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ para diferentes interações e considerando um determinado sítio que possui $\varepsilon_i \approx 0$. Qualquer sítio que possua peso espectral no nível de Fermi poderia ser usado para nossa análise. Podemos ver que o aumento da interação provoca a transferência de peso espectral do nível de Fermi para zonas de baixa e alta energia. Um fato similar ocorre no caso de simetria partícula-buraco onde o peso espectral é transferido do pico central para as bandas de Hubbard quando U cresce. Podemos ver também que os picos afastados do nível de Fermi tendem a ficar com maior amplitude e menor largura com o aumento de U , sendo um indicativo que os estados afastados do nível de Fermi estão mais localizados. Quando olhamos para a mesma faixa de energia ω , os picos afastados do nível de Fermi, apesar de terem grandes amplitudes, não contribuem para uma maior densidade de estados típica na figura 4.10. Nessa situação, o aumento da interação provoca um afastamento dos picos em alta e baixa energia, enquanto a desordem localiza os estados nas regiões de ω afastadas de $\omega = 0$.

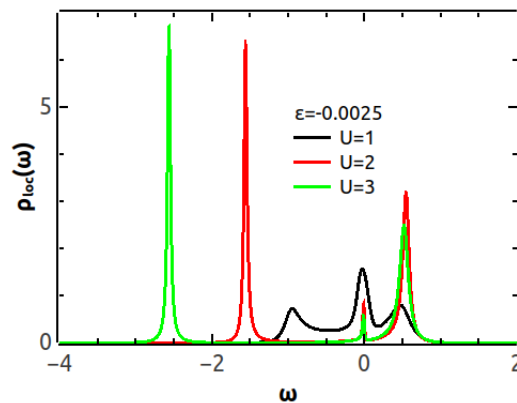


Figura 4.11: Densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon)$ quando considerados os mesmos parâmetros da figura 4.10(a). O sítio analisado é tal que $\varepsilon_i \approx 0$.

4.3.2 Parâmetro de ordem da transição metal-isolante

Assim como na subseção 4.1.2, iremos ver o que acontece ao aumentar a desordem fixando os outros parâmetros. Como também será considerado dopagem, então o sistema sairá de um metal e passará por uma transição metal-isolante.

Para construir um parâmetro de ordem adequado a este problema, será necessário olhar para $\rho_{typ}(\omega)$. Essa quantidade descreve os estados estendidos do sistema. Esses estados existem num metal e tendem a desaparecer com o aumento da desordem W . Na figura 4.12(a) podemos ver a evolução de $\rho_{typ}(\omega)$ ao aumentar W , partindo-se de um metal

dopado. Esse problema parte de uma condição semelhante ao mostrado na figura 4.3(b) para $W = 0$, onde existe um pico em torno do nível de Fermi e duas bandas de Hubbard deslocadas. Quando aumentamos a desordem, os estados estendidos diminuem cada vez mais, assim como ocorre para o caso simétrico, mostrado na seção 4.1.2. Isso ocorre de maneira distinta para diferentes regiões de ω . Quanto mais afastado de $\omega = 0$ mais fácil os estados se localizam. Além disso, as bordas das bandas são localizadas com maior facilidade, dando origem ao que conhecemos como bordas de mobilidade [36]. Quando toda a função $\rho_{typ}(\omega)$ for a zero então só haverá estados localizados. Esse caso se diferencia do simétrico visto na seção 4.1.2 pois aqui discutimos a evolução, com a desordem, de um sistema metálico dopado, enquanto lá discutimos o papel de desordem partindo de um isolante de Mott (sem dopagem). É interessante olhar para $\rho_{av}(\omega)$ para ver o que acontece com todos os estados do material. A figura 4.12(b) mostra $\rho_{av}(\omega)$ para as mesmas configurações de parâmetros da figura 4.12(a). Para um valor pequeno de W , podemos ver também uma estrutura de três picos: duas bandas de Hubbard separadas por um pico em torno do nível de Fermi. À medida que a desordem W cresce a densidade de estados passa a ter um caráter retangular, adquirindo platôs. Isso está relacionado a estarmos usando uma distribuição uniforme de ε_i , gerando na densidade de estados uma sequência de picos que formam uma banda ao longo de uma faixa de energia ω . Os dois platôs menores estão relacionados com as bandas de Hubbard. Já o platô maior, um pouco abaixo de $\omega = 0$, está relacionado com a dopagem do sistema.

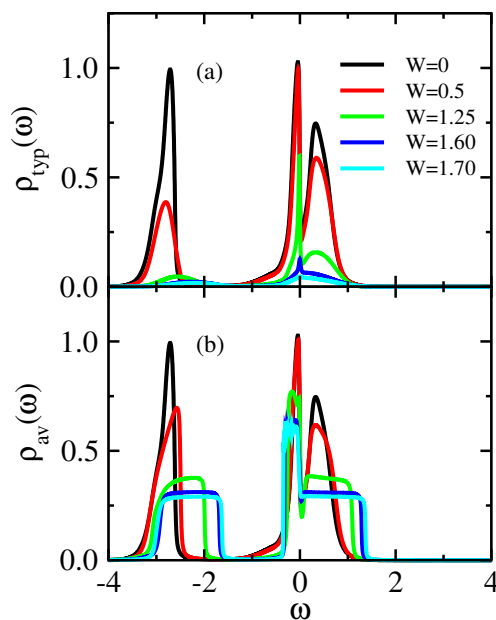


Figura 4.12: (a) Densidade de estados típica em função da frequência para $U = 3$ e $\delta = 0.2$. (b) Densidade de estados média para o mesmo conjunto de parâmetros de (a).

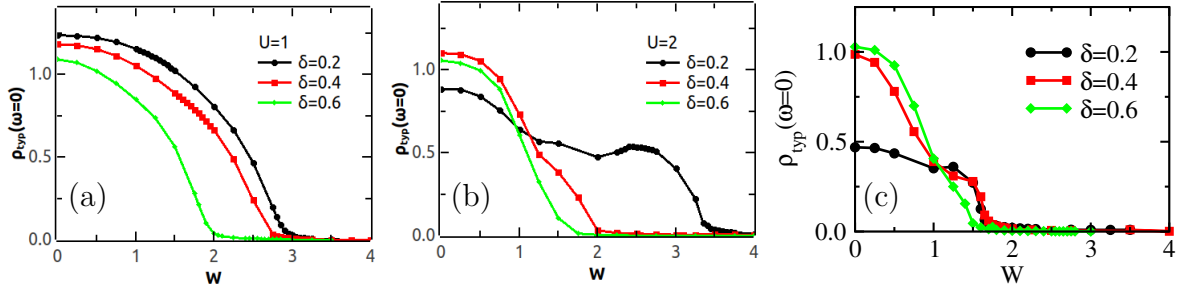


Figura 4.13: Densidade de estados típica no nível de Fermi $\rho_{typ}(\omega = 0)$ em função da desordem W . (a) $U = 1$. (b) $U = 2$. (c) $U = 3$.

Para determinar uma desordem crítica W_c onde a transição ocorre, podemos olhar para $\rho_{typ}(\omega = 0)$ em função de W , como mostrado na figura 4.13 para $U = 1$, $U = 2$ e $U = 3$ para diferentes valores de δ . Essa quantidade atua como um parâmetro de ordem e é diferente de zero para regiões metálicas ($W < W_c$) e zero para regiões isolantes ($W > W_c$). Uma observação importante deste trabalho é que a dependência de W_c com δ praticamente não existe até um valor de dopagem que depende do valor de U . Por exemplo, para $U = 1$ o valor de W_c praticamente não muda se $\delta < 0.4$, enquanto, para $U = 3$, o valor de W_c é constante quando $\delta < 0.6$. Nesse caso, com a dopagem há transferência de peso espectral ao longo de ω sem que os estados estendidos se localizem. Quando $U = 1$, a densidade de estados apresenta apenas uma banda em torno do nível de Fermi, podendo haver transferência de peso espectral à medida que a dopagem muda. Isso faz com que W_c seja praticamente constante para valores pequenos e intermediários de δ . Para $U = 3$, existem duas bandas, sendo que uma está tão afastada do nível de Fermi que podemos considerar a banda em torno de $\omega = 0$ isolada da outra. Dessa forma, para grandes interações, W_c também não muda para valores pequenos e intermediários de δ . No caso em que a interação é intermediária, $U = 2$, o valor de W_c é mais susceptível a mudar com a dopagem. Uma explicação para isso é que não podemos considerar uma banda isolada em torno do nível de Fermi assim como ocorre para baixas e altas interações. À medida que a dopagem aumenta a banda inferior afasta cada vez mais do nível de Fermi, sendo relevante apenas a banda que já estava em torno do nível de Fermi, assim como ocorre para grandes interações. Dessa maneira, para valores intermediários de interação, W_c começa com um comportamento similar ao descrito para pequenas interações e depois possui um valor de W_c semelhante ao encontrado para grandes interações. Note que para $U = 3$, por exemplo, o máximo de $\rho_{typ}(\omega = 0)$ quando $W = 0$ é perto de $\omega = 0$ mas não exatamente em $\omega = 0$, de acordo com os resultados da referência [83]. Isso explica por que $\rho_{typ}(\omega = 0) \approx 0.5$ no caso limpo da figura 4.13 e quando seu valor máximo está em torno de $\rho_{typ}(\omega = 0) \approx 1$ na figura 4.12(a). Também podemos ver que o fato de haver mais estados estendidos no nível

de Fermi, assim como $\delta = 0.6$ em relação a $\delta = 0.2$, não influenciou tanto no valor de W_c . De maneira geral, para valores pequenos e intermediários de δ , a dopagem tende a não influenciar no valor de desordem crítica onde ocorre a transição metal-isolante.

Quando a dopagem é grande o sistema se torna um isolante para um valor de desordem cada vez menor. Mostraremos em seções posteriores que no limite de alta dopagem serão formados isolantes diferentes do caso em que δ não é grande, o que influencia na mudança de comportamento de W_c . No limite em que a dopagem é máxima o valor de W_c torna-se zero. Se a dopagem for muito grande, a borda da banda encontra-se em torno do nível de Fermi. Como a desordem localiza primeiro os estados próximos às bordas da banda, um pequeno valor de desordem é capaz de localizar esses estados e fazer o sistema virar um isolante. Em seções posteriores será mostrado com mais detalhes como são esses isolantes existentes para altas dopagens.

4.3.3 Invariância da desordem crítica W_c para grandes correlações

Vamos mostrar agora o que acontece para correlações ainda maiores que $U = 3$. Fazendo isso, podemos ter uma intuição do que ocorre para qualquer valor de U . Para o caso simétrico, a interação tem o efeito de mudar a posição das bandas da densidade de estados. Na presença de dopagem, somente a banda de baixa energia move proporcionalmente a U .

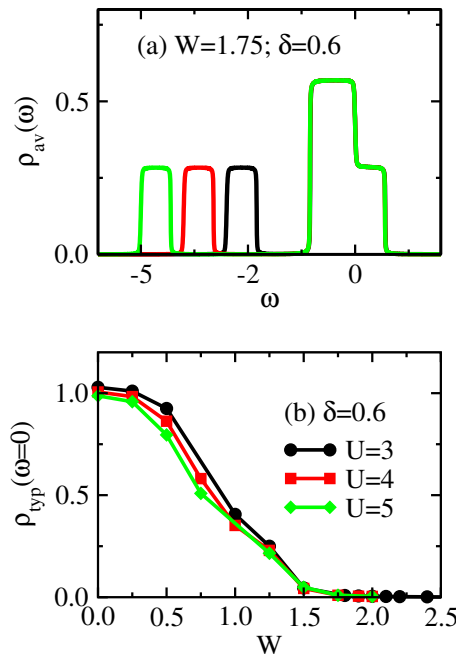


Figura 4.14: (a) Densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$ para grandes interações $U = 3$, $U = 4$ e $U = 5$ ao considerar $W = 1.75$ e $\delta = 0.6$. (b) Parâmetro de ordem $\rho_{typ}(\omega = 0)$ em função da desordem para as mesmas interações e dopagem da figura (a).

A banda em torno do nível de Fermi permanece inalterada, já que não podemos mudar o preenchimento do sistema quando consideramos δ fixo. Na figura 4.14(a) podemos ver esse fenômeno. Ao observar $\rho_{av}(\omega)$, que representa todos os estados do sistema, nós podemos ver que, ao crescer U , as bandas existentes em torno do nível de Fermi para $U = 3$, $U = 4$ e $U = 5$ coincidem. O aumento de U faz com que o *gap* entre as bandas aumente. Na prática, isso faz com que o valor da desordem crítica W_c não mude, como podemos ver na figura 4.14(b). Esse resultado é válido somente quando as bandas são suficientemente distantes umas das outras. Podemos dizer então que para grandes valores de interação não há mudanças na transição de fase gerada pela desordem, mais especificamente nos valores de W_c para diferentes valores de U .

4.4 Regiões da fase isolante

Nesta seção iremos estudar as regiões do modelo de Anderson-Hubbard quando o sistema passou da transição metal-isolante ($W > W_c$). Apesar de todas essas regiões terem a característica física de não conduzir elétrons, cada uma possui propriedades específicas. Veremos o isolante de Anderson-Mott (AMI, do inglês *Anderson-Mott Insulator*) onde não há sítios vazios, em seguida veremos a região AMI-0 onde há sítios sem ocupação eletrônica, estudaremos uma região que chamamos de “*band AMI*”, onde a dopagem é grande, e também estudaremos o limite em que $\delta = 1$, em que o sistema pode ser um isolante de bandas ou um isolante de Anderson, dependendo do valor da desordem.

4.4.1 Região AMI - isolante de Anderson-Mott

Vamos iniciar o estudo da fase isolante pela região AMI. Para esse propósito, nós vamos focar em $\rho_{av}(\omega)$, uma vez que $\rho_{typ}(\omega)$ é zero para qualquer valor de ω . $\rho_{av}(\omega)$ descreve somente estados localizados do nosso problema. Serão estudados aqui dois exemplos de $\rho_{av}(\omega)$: um exemplo onde a desordem é $W < U$ e outro exemplo onde $W > U$. Em ambos os casos o sistema está na região AMI onde todos os estados são localizados. Uma vez que $\rho_{typ}(\omega) = 0$, não existe banho de elétrons de condução com o qual a impureza pode hibridizar. Ou seja, na metodologia DMFT-TMT a impureza está no limite atômico e a função de Green, de onde extraímos a densidade de estados também, pode ser calculada com a equação 4.5. Ambas as metodologias (a DMFT-TMT ou a analítica no limite atômico) geram resultados similares, sendo adequadas para descrever o sistema.

Quando $W < U$, $\rho_{av}(\omega)$ é dada na figura 4.15(a). Essa densidade de estados tem uma configuração similar ao que é visto na figura 4.12(b), ou seja, duas bandas de mesma altura separadas por um *gap*, que é remanescente do isolante de Mott, e uma banda mais estreita mais intensa um pouco abaixo do nível de Fermi, devido à dopagem. Apesar de W e U

contribuírem para o sistema ser um isolante, a presença de um *gap* nos remete aos efeitos presente no isolante de Mott, onde a interação é o parâmetro mais relevante no sistema. Descobrimos neste trabalho que essa região só existe quando é considerado algum valor de dopagem e quando a interação é suficientemente grande. Uma característica dessa região é que, ao analisar pontos próximos do nível de Fermi, é possível notar que sempre haverá uma assimetria entre a quantidade de elétrons abaixo de $\omega = 0$ e buracos acima $\omega = 0$. Por causa disso, sempre haverá uma diferença de altura, semelhante a um degrau, no $\rho_{av}(\omega)$ para ω em torno do nível de Fermi. Nesse caso, a quantidade de estados localizados diminui quando passamos pelo nível de Fermi. Na figura 4.15(b) é mostrada a ocupação média por spin de cada sítio $\langle n_{i\sigma} \rangle$ em função de ε_i para cada sítio i . Alguns sítios possuem dupla ocupação ($\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$), como no isolante de Anderson, e outros sítios têm ocupação simples ($\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$), como no isolante de Mott. Como a rede possui tanto $\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$ quanto $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$, identificamos essa região como um isolante de Anderson-Mott (AMI). Diferentemente do caso já conhecido sem dopagem [112], não existem sítios sem ocupação nessa região. A densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$, mostrada na figura 4.15(c), só possui duas configurações possíveis: uma com um único pico, como exemplificado para $\varepsilon_i = -1.25$, concentrando a densidade de estados abaixo do nível de Fermi, e outra onde haverá dois picos de alturas menores, como ilustrado para $\varepsilon_i = 1.25$. Além disso, a faixa de valores de ε_i em que $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$ não corresponde a U , o que é diferente do caso simétrico discutido na subseção 4.1.2.

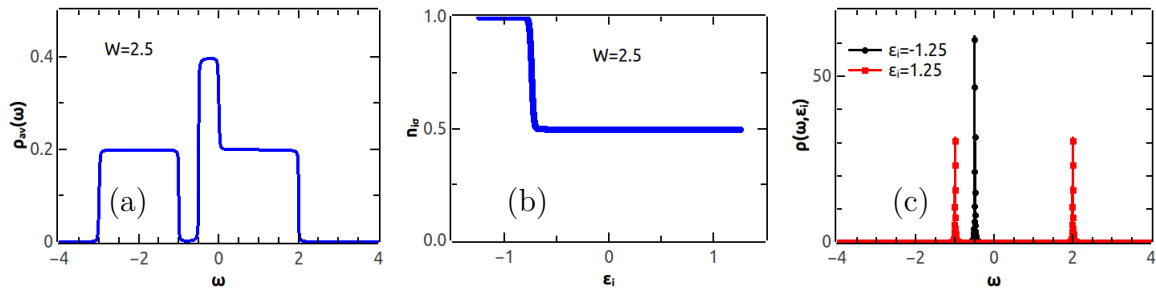


Figura 4.15: (a) Densidade de estados média em função de ω . (b) Ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle$ em função de ε_i . (c) Densidade de estados local em função de ω . Foram usados os parâmetros $W = 2.5$, $U = 3$ e $\delta = 0.2$. Resultados obtidos a partir da equação 4.5.

O crescimento da desordem fará com que os estados se dispersem ao longo de ω . Isso faz com que as bandas da densidade de estados $\rho_{av}(\omega)$ fiquem cada vez mais largas. Quando $W > U$, uma banda encosta na outra fazendo desaparecer o *gap* que é remanescente do efeito da interação, surgindo uma densidades de estados como a da figura 4.16(a). Quando a banda de Hubbard em baixas energias encontra a banda mais intensa devido à dopagem, surge um novo platô em $\rho_{av}(\omega)$. Esse perfil de densidade de estados nos lembra mais

um isolante de Anderson, por não existir um *gap* em $\rho_{av}(\omega)$. O perfil de $\langle n_{i\sigma} \rangle$ quando $W > U$ é similar ao caso $W < U$, onde também existem sítios com $\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$ e $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$ (ver figura 4.16(b)). A diferença principal é que a desordem cresceu, havendo também mais sítios que possuem ocupação dupla ou sítios com ocupação simples. A densidade de estados local (ver figura 4.16(c)) quando $W > U$ segue uma configuração similar ao caso onde $W < U$, ou seja, existem dois tipos de $\rho(\omega, \varepsilon_i)$: um com um pico de grande amplitude localizado abaixo do nível de Fermi e outra configuração com dois picos de menor amplitude. Como a desordem é maior, o pico colorido em preto poderá chegar em valores menores de ω enquanto o pico vermelho em $\omega < 0$ poderá ser posicionado em torno do mesmo ponto do pico preto. Devemos considerar que ao fazer a média aritmética de todos os $\rho(\omega, \varepsilon_i)$, os dois picos serão contabilizados para o mesmo valor de ω resultando no novo platô observado na figura 4.16(a).

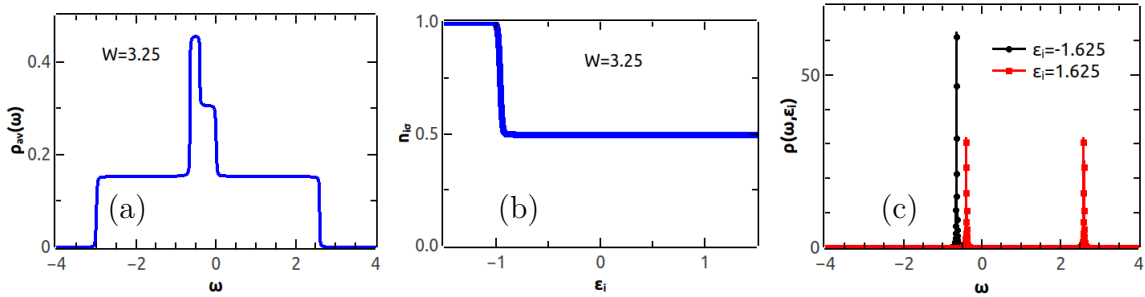


Figura 4.16: (a) Densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$. (b) Ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle$ em função de ε_i . (c) Densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ Foram usados os parâmetros $W = 3.25$, $U = 3$ e $\delta = 0.2$.

4.4.2 Região AMI-0 - isolante de Anderson-Mott com sítios vazios

Nós exploramos nesta subseção como a região AMI-0 surge na fase isolante de Anderson-Mott para grandes desordens. De modo geral, classificamos essa região como sendo o mesmo tipo de isolante encontrado na subseção anterior. Não existe uma diferença dos mecanismos responsáveis por fazer esse sistema se tornar um isolante. No entanto, mostraremos nesta subseção que há propriedades do AMI-0 que são diferentes do AMI, como a existência de sítios desocupados na rede. Essa região é a mesma existente para o caso com simetria partícula-buraco e altas desordens.

Na figura 4.17(a) é mostrado $\rho_{av}(\omega)$ para $\delta = 0.2$ e $W = 4$. Essa curva possui dois platôs menores, que se referem às bandas de Hubbard, e também um platô superior, que existe em torno do nível de Fermi. Essa configuração de densidade de estados só existe no

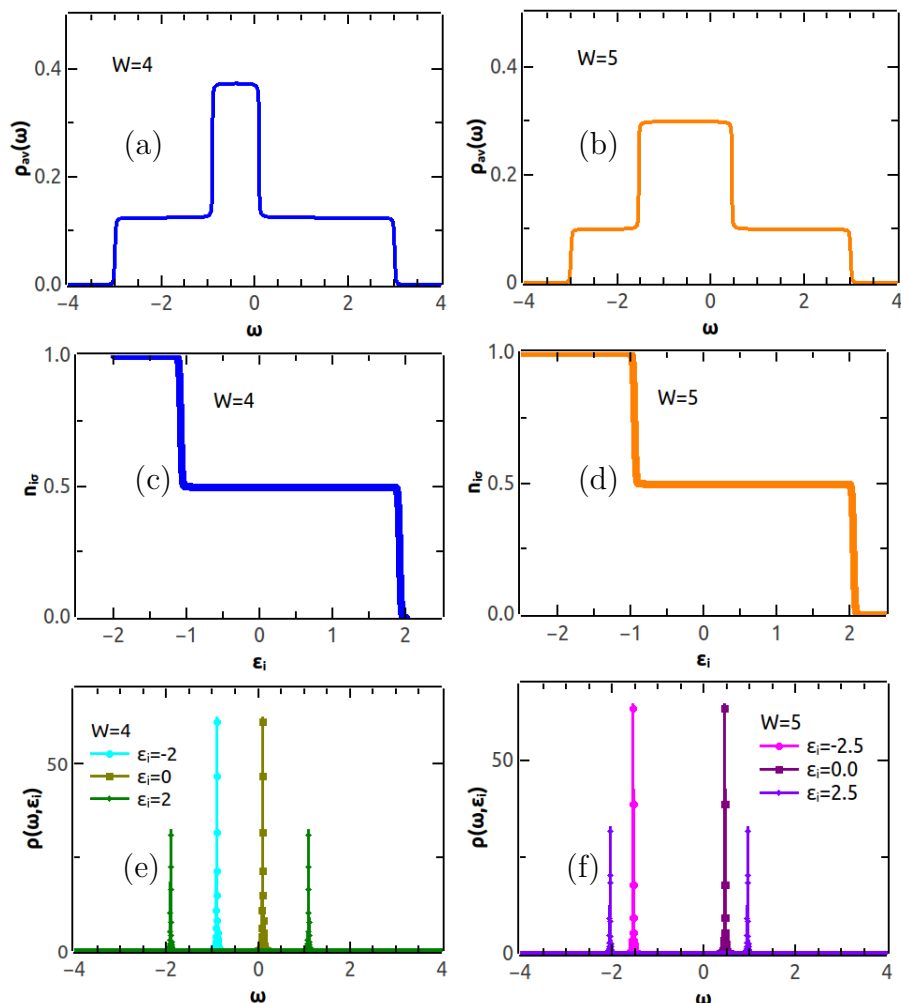


Figura 4.17: (a)-(b) Densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$ na região AMI-0. (c)-(d) Ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle$ em função de ε_i começando a surgir sítios vazios. (e)-(f) $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ para os valores de ε_i indicados na figura. Os parâmetros usados foram: $U = 3$, $\delta = 0.2$ onde W está indicado nas figuras.

limite em que $W > U$, não existindo um *gap* de Mott. A figura 4.17(a) mostra um caso em que o AMI-0 “acabou de surgir”, pois há poucos sítios vazios, enquanto a figura 4.17(b) mostra um sistema mais dentro da fase AMI-0. Diferentemente do AMI, onde existe uma diminuição dos estados localizados em $\rho_{av}(\omega)$ ao passar pelo nível de Fermi (figura 4.16(a)), no AMI-0 essa diminuição não ocorre e há a mesma quantidade de elétrons e buracos próximo do nível de Fermi. As figuras 4.17(c) e 4.17(d) mostram a ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle$ em função de ε_i para os mesmos sistemas de 4.17(a) e 4.17(b), respectivamente. Uma grande característica da região AMI-0 está em como é a organização eletrônica na rede. Com uma desordem suficientemente grande, a rede passa a permitir sítios sem ocupação nos valores mais altos de ε_i . Apesar de haver dopagem, o crescimento da desordem faz com que o sistema tenha as mesmas configurações descritas na seção 4.1.2, em que havia sítios

vazios no caso de simetria partícula-buraco. Esses sítios vazios estão ligados a valores de $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ que apresentam apenas um pico acima do nível de Fermi, como mostrado na figura 4.17(e) para $\varepsilon_i = 2$ ou na figura 4.17(f) para $\varepsilon_i = 2.5$. As outras configurações de densidade de estados local existentes mostradas nas figuras são semelhantes às existentes no isolante AMI. Esses picos acima do nível de Fermi contribuem para que haja mais estados localizados de buracos em comparação com o caso AMI sem sítios vazios.

Já sabemos que para a formação do AMI-0 é preciso uma desordem suficientemente grande. Vamos agora analisar como essa região se comporta com a mudança dos parâmetros U e δ . Com a dopagem crescendo, assim como na figura 4.18(a), elétrons são adicionados ao sistema e mais sítios tornam-se duplamente ocupados em comparação com um δ menor. Como consequência, mais desordem será necessária para o sistema ter sítios vazios (compare $W = 4$ com $W = 4.75$ para o mesmo $\delta = 0.3$). Para U grande, a região AMI-0, existente quando há sítios com $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0$, aparece para grandes valores de desordem quando a dopagem δ é suficientemente pequena. Podemos ver o que acontece com a ocupação ao mudar a interação, assim como mostrado na figura 4.18(b) para $W = 4$ e $\delta = 0.3$. As ocupações simples, representadas por $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$, são características de um isolante de Mott e a medida que U aumenta, o sistema apresenta mais desses sítios com $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$. Assim, para os valores de W e δ mostrados na figura, os sítios vazios presentes para $U = 1$ e $U = 2$ tornam-se ocupados quando crescemos a interação para $U = 3$. Podemos dizer então que os sítios vazios desaparecem com o crescimento da dopagem ou interação entre os elétrons e voltam a aparecer com o crescimento da desordem.

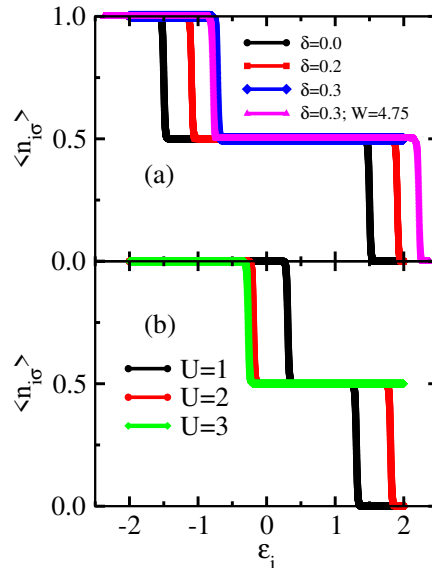


Figura 4.18: Ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0$ para diferentes valores de ε_i . (a) Situação onde a interação é fixada em $U = 3$ e a desordem em $W = 4$ enquanto a dopagem δ é alterada. (b) Situação onde $\delta = 0.3$ e $W = 4$ enquanto a interação é alterada.

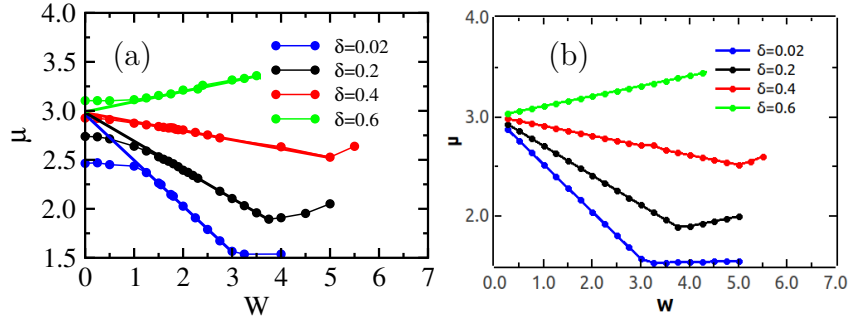


Figura 4.19: Potencial químico μ mudando com a desordem W para diferentes valores de δ e $U = 3$. (a) Cálculo feito através da DMFT-TMT. (b) Cálculo feito utilizando a equação 4.5.

À medida que o sistema passa pelas diferentes regiões do diagrama de fase do modelo de Anderson-Hubbard há alterações no potencial químico μ . Isso é mostrado na figura 4.19 onde $U = 3$. A figura 4.19(a) representa os resultados da DMFT-TMT enquanto em 4.19(b) é usado o método envolvendo a equação 4.5. As curvas de μ por W possuem um comportamento diferente em cada região do nosso problema. A fase metálica, existente para pequenos valores de W , só pode ser descrita pela DMFT-TMT, já que para obter os resultados da figura 4.19(b) partimos de uma construção onde todos os estados são sempre localizados. Essa fase é representada pelos círculos da figura 4.19 até um valor em torno de $W = 1.75$. O potencial químico assume em valores diferentes para cada dopagem quando a desordem é nula, como descrito na figura 4.4, e seu valor não sofre grandes mudanças com o crescimento da desordem. Na região AMI podemos observar um comportamento linear de μ com W , que nos permite fitar (linha contínua da figura 4.19(a)) as curvas segundo a relação $\mu = (\delta - 0.5)W + U$. Quando $\delta < 0.5$ o potencial químico sempre decresce com W na fase AMI. O contrário ocorre para $\delta > 0.5$. Quando $\delta = 0.5$ o valor de μ é constante em relação à desordem e vale $\mu = U$. Nessa condição, a banda superior da densidade de estados está centrada no nível de Fermi, enquanto a outra banda encontra-se distante do nível de Fermi. Essa situação é similar ao semipreenchimento em que o potencial químico se mantém em $\mu = U/2$. O valor de μ decresce com a desordem e não chega a ser menor que $\mu = U/2$. Podemos ver isso para $\delta = 0.02$, onde “após” a dependência linear de μ com W dentro do AMI há uma tendência a manter $\mu = U/2$ como no caso de semipreenchimento. Para dopagens maiores e continuando a crescer a desordem, o comportamento de μ com W deixa de ser linear, indicando a entrada na região AMI-0, que possui sítios vazios. Podemos notar nessa região que o valor de μ sempre cresce com W para o caso dopado.

O comportamento linear de μ com W na região AMI nos permite estabelecer uma equação para determinar a separação entre as regiões AMI e AMI-0. Na região AMI cada

sítio da rede encontra-se no limite atômico. Nesse caso, sítios vazios possuem energia $\varepsilon_d = \varepsilon_i - \mu > 0$ (equação 4.5). O valor da desordem em que o primeiro sítio passa a estar vazio deve coincidir com o valor mais alto possível da energia no sítio $\varepsilon_i = W/2$, ou seja, $W/2 = \mu$. Combinando essa equação com a relação linear de μ , que deixa de existir quando inicia a fase AMI-0, obtemos a equação abaixo:

$$W = \frac{U}{1 - \delta}. \quad (4.7)$$

A equação 4.7 nos diz que não pode haver uma configuração com sítios vazios quando $\delta = 1$, que é um fato já esperado pois todos os sítios terão ocupação máxima. Para semipreenchimento, $\delta = 0$, o valor da desordem onde surgirá sítios vazios será $W = U$, que coincide com o valor onde o sistema deixa de ser um isolante de Mott e passa a ser um AMI-0. Tratando da interação, qualquer valor de U permitirá a existência de sítios vazios, desde que a desordem seja suficientemente grande. Na condição em que $U = 0$ qualquer configuração de parâmetros no isolante permitirá sítios vazios, exceto quando $\delta = 1$.

4.4.3 Região *band* AMI

Vimos na seção 4.3.2 que o valor de desordem crítica W_c em que a transição ocorre tende a ficar constante para valores pequenos ou até intermediários de δ . Nesse caso, o sistema passa de um metal para um AMI-0 quando a interação é pequena ou para um AMI quando a interação é grande. Para δ grande, W_c é cada vez menor. Nessa situação, o sistema não passa do metal para um AMI-0 ou AMI diretamente. O valor de desordem onde ocorre a transição metal-isolante não coincide com o valor onde todos os estados estendidos do sistema vão a zero, fato esse que nos motivou a descrever uma outra região entre o metal e os isolantes já descritos aqui.

Para grandes dopagens ($0.75 < \delta < 1.0$), o parâmetro de ordem $\rho_{typ}(\omega = 0)$ possui diferenças do encontrado para pequenas dopagens. $\rho_{typ}(\omega = 0)$ se torna zero para valores de desordem menores do que aqueles para os quais todos os estados do sistema se localizam. Construímos assim um outro parâmetro para caracterizar a localização de todos os estados da rede, dado pela soma da densidade de estados de todos os estados estendidos do material, $\zeta = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{typ}(\omega) d\omega$. ζ vai a zero no valor de desordem W_{c2} . Isso significa que, diferentemente da situação em que existe baixa dopagem e todos os estados se localizam em W_c , agora o sistema é isolante mas com alguns estados estendidos quando a desordem está no intervalo $W_c < W < W_{c2}$. Esse comportamento é mostrado na figura 4.20 para o ca-

caso em que $\delta = 0.9$. Na figura 4.20(a) mostramos $\rho_{typ}(\omega)$ para diferentes valores da desordem. Podemos ver que a maioria dos estados estão deslocados para abaixo do nível

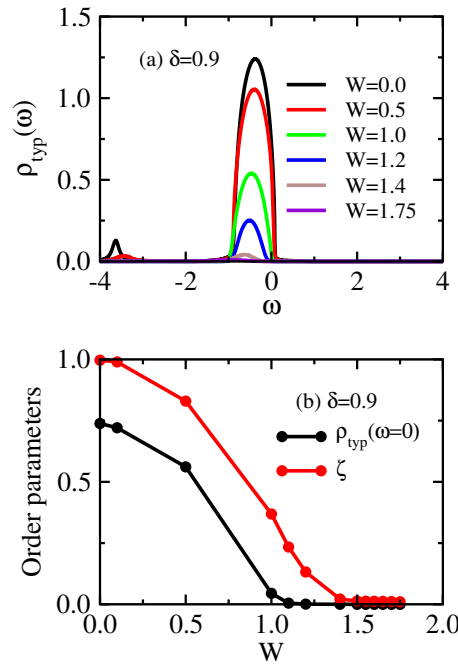


Figura 4.20: (a) Densidade de estados típica para diferentes valores de W . (b) Parâmetros de ordem $\rho_{typ}(\omega = 0)$ e ζ para descreverem o limite da região *band* AMI entre W_c e W_{c2} . Foi usado que $U = 3$ e $\delta = 0.9$.

de Fermi, de forma que a borda da banda está em torno de $\omega = 0$. Como a desordem localiza a borda das bandas primeiro, os estados em torno do nível de Fermi irão localizar antes dos outros estados, que encontram-se deslocados abaixo do nível de Fermi. A figura 4.20(b) mostra os parâmetros de ordem $\rho_{typ}(\omega = 0)$ e ζ em função de W . O intervalo de desordem entre aqueles em que $\rho_{typ}(\omega = 0)$ e ζ tornam zero é a região que chamamos de *band* AMI (que faz referência ao isolante de bandas e ao isolante de Anderson-Mott). Em todos os casos, $\rho_{av}(\omega = 0)$ permanece finito uma vez que os estados em $\omega = 0$ apenas foram localizados e não destruídos. Note que para valores de dopagem menores o valor de desordem em que ζ se torna nulo coincide com o valor de W_c e ambos descrevem a mesma transição de fase.

Encontramos também diferenças da região *band* AMI com outras regiões ao olhar para a densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$. Na figura 4.21(a) é mostrado $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ ao fixar $U = 3$ e $\delta = 0.9$ quando escolhermos $\varepsilon = -0.119$. Para esse tipo de isolante a grande maioria dos sítios apresentará apenas uma banda estreita deslocada para abaixo do nível de Fermi. A existência de sítios com duas bandas, onde os efeitos da interação são mais pronunciados, serão raros e só ocorrerão para valores grandes de ε_i , isto é, quando ε_i estiver próximo de $W/2$. Isso se deve ao fato de que a dopagem tende a inibir os efeitos da interação. Por causa disso não são identificadas duas bandas com diferença U de “distância” e sim apenas uma banda. Essa banda referente a cada sítio é tão larga quanto de um metal, ao mesmo

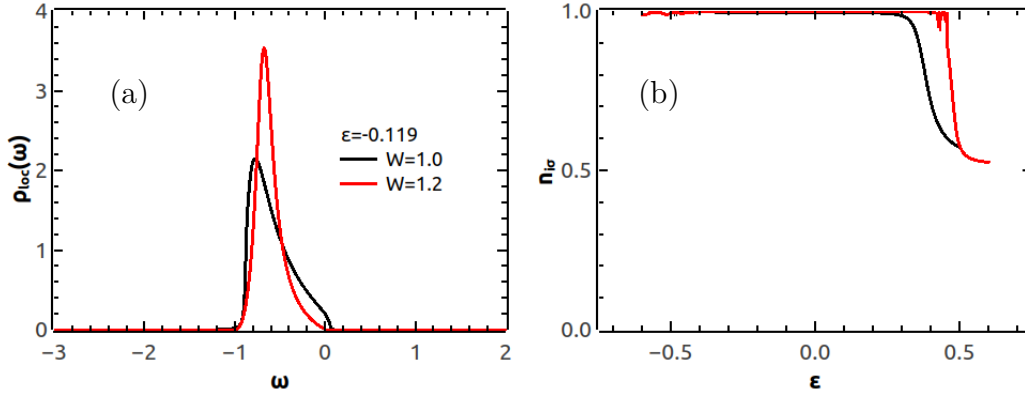


Figura 4.21: (a) Densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ quando $\varepsilon_i = -0.119$. (b) Ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle$ em função de ε_i . Os parâmetros usados foram $U = 3$, $\delta = 0.9$ e $W = 1.0$ ou $W = 1.2$.

tempo que não contribui para formação de estados estendidos no nível de Fermi assim como num isolante. Quando a desordem muda de $W = 1$, onde o sistema ainda é metálico, para $W = 1.2$, quando não há estados no nível de Fermi, podemos notar algumas diferenças. É localizado a pequena porcentagem de estados que havia em torno de $\omega = 0$. Além disso, o sistema torna-se mais localizado fazendo o banda ser mais estreita e mais alta. A figura 4.21(b) mostra a ocupação por sítio ao considerar os mesmos parâmetros da figura 4.21(a). Podemos ver que a maioria dos sítios possuem ocupação dupla enquanto alguns sítios próximos de $\varepsilon_i = W/2$ possuem ocupação semelhante ao caso de semipreenchimento. Isso quer dizer que alguns sítios ainda mantêm o preenchimento do isolante de Mott, enquanto outros estão localizados graças ao efeito combinado da dopagem com a desordem. Podemos notar também que para o metal com $W = 1$ a ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle$ decresce mais suavemente do que para com o caso isolante com $W = 1.2$.

4.4.4 Região BI - isolante de banda

Quando a dopagem é máxima, $\delta = 1$, ela dominará os principais fenômenos que ocorrem no sistema descrito pelo modelo de Anderson-Hubbard no caso de desordem pequena, independente do valor da interação. Nesse caso, os elétrons não conseguirão se propagar devido aos efeitos da dopagem máxima exclusivamente. Não será mais possível um elétron que está em um sítio ir para um sítio vizinho, já que o sítio vizinho também está com ocupação máxima. Caracterizamos essa região como um isolante de bandas (em inglês, *band insulator* ou BI). Vimos um pouco sobre esse isolante na seção 4.1.1, em que para $W = 0$ e interações fracas ou fortes o sistema recai na configuração de densidade de estados semicircular quando a dopagem é máxima. A desordem não é grande o suficiente para localizar todos os estados estendidos do sistema e não existem estados no nível de

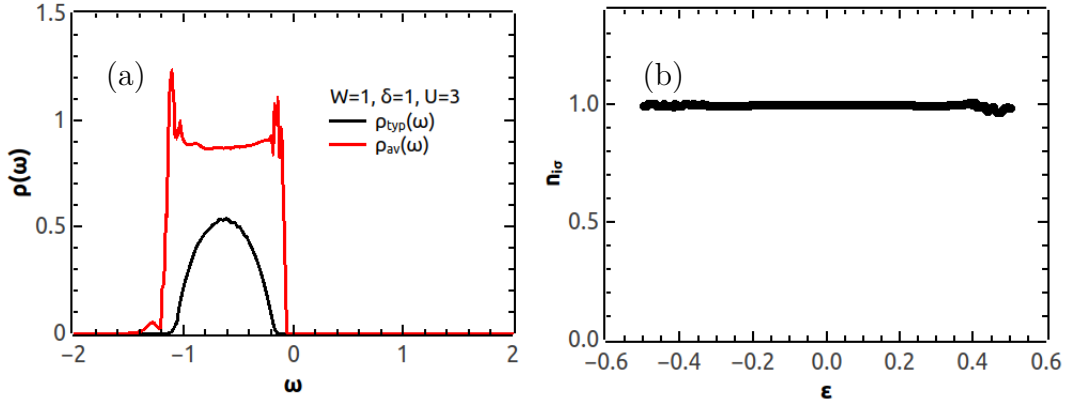


Figura 4.22: (a) Densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$ e típica $\rho_{typ}(\omega)$. (b) Ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle$ em função de ε_i . Os parâmetros usados foram $W = 1$, $\delta = 1$ e $U = 3$.

Fermi para a desordem localizar. Apesar disso, a desordem influencia a distribuição de estados ao longo de ω . Podemos ver na figura 4.22(a) que $\rho_{av}(\omega)$ tende a ter um formato retangular, muito diferente do semicírculo encontrado na seção 4.1.1 para $W = 0$, e está totalmente abaixo do nível de Fermi. Ao comparar $\rho_{av}(\omega)$ e $\rho_{typ}(\omega)$ podemos ver que a desordem localiza os estados estendidos das bordas. Diferentemente do *band* AMI, onde a não propagação de um elétron envolve os efeitos combinados da desordem e dopagem, no BI a desordem não é determinante para o caráter isolante do material já que não existem estados em torno do nível de Fermi para serem localizados. Quando olhamos para a ocupação dos sítios podemos ver que todos terão número de ocupação igual a $\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$, assim como mostrado na figura 4.22(b). Nesse caso não existem sítios que respeitem as características de um isolante de Mott ($\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$). Esse cálculo foi feito utilizando a DMFT-TMT e os problemas de uma impureza com ε_i próximos de $|\varepsilon| = W/2$ possuem ruídos, assim como o observado nas bordas de $\rho_{av}(\omega)$ da figura 4.22(a).

4.4.5 Região AI - isolante de Anderson com $\delta = 1$

Estando no mesmo limite de dopagem descrito na seção 4.4.4, ou seja, $\delta = 1$, caracterizaremos outro isolante quando a desordem é alta. As características descritas para a região BI continuarão existindo para o caso em que a desordem é grande. A principal diferença é que agora todos os estados estarão localizados, fazendo com que o sistema seja um isolante de Anderson (em inglês *Anderson Insulator* ou *AI*). Essa fase tem diferenças em relação ao AMI, já que a dopagem impede que existam sítios com características descritas por Mott. Além disso, não existem estados estendidos ou localizados no nível de Fermi, já que foram todos deslocados devido à dopagem.

Podemos pensar a região *AI* com $\delta = 1$ a partir da região BI. No BI, a dopagem é o

mecanismo fundamental para caracterizar o sistema como um isolante, enquanto no AI com $\delta = 1$, para grandes desordens, todos os estados encontram-se localizados. Então, os mecanismos responsáveis pela não propagação de elétrons neste sistema são tanto a dopagem, que impede que um elétron propague por entre os sítios já ocupados, e a desordem, que mantém os elétrons localizados.

Uma vez que todos os estados estão localizados é possível usar a equação 4.5 para calcular $\rho_{av}(\omega)$, assim como apresentado na figura 4.23(a). Podemos ver que é formado um retângulo totalmente deslocado para abaixo do nível de Fermi. Por ser uma única banda, seu comprimento em energia é dado pelo valor da desordem W aplicada no sistema. Para que seja normalizada, o valor da sua altura (valor de $\rho_{av}(\omega)$) recai em $1/W$. As bordas da banda têm leves suavizações, já que estamos considerando uma temperatura finita e, assim, um Γ diferente de zero. Como esperado, assim como no BI, a ocupação é máxima para cada sítio, ou seja, $\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$, como pode ser visto na figura 4.23(b). A densidade de estados local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ de todos os sítios apresenta apenas um pico semelhante a um delta de Dirac, totalmente deslocado para abaixo do nível de Fermi, assim como ocorre para os sítios que possuem forte localização de Anderson.

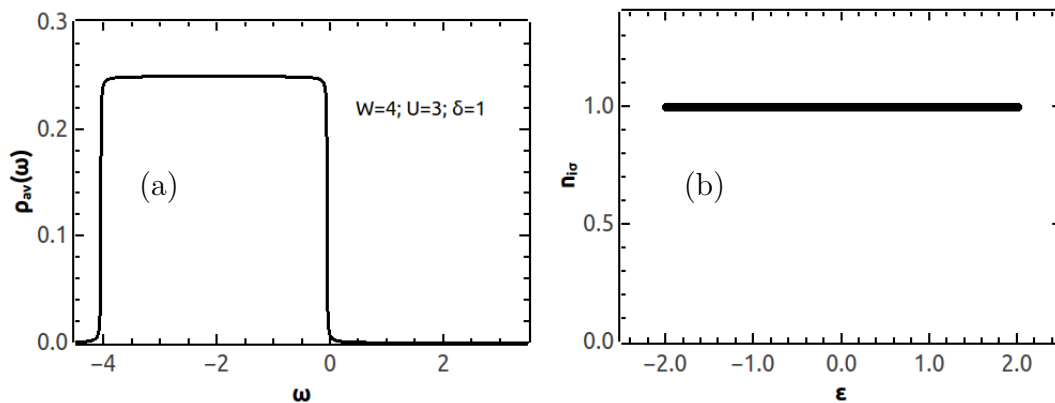


Figura 4.23: (a) Densidade de estados média $\rho_{av}(\omega)$. (b) Ocupação $\langle n_{i\sigma} \rangle$ em função de ε_i . Os parâmetros usados neste problema foram $U = 3$, $W = 4$ e $\delta = 1$.

Capítulo 5

Conclusão

Nesta tese tivemos como proposta estudar sistemas fortemente correlacionados e desordenados, analisando a combinação de efeitos gerados pela interação local U entre elétrons e desordem W ao longo de uma rede cristalina. Combinado a esses efeitos, foi acrescentado dopagem eletrônica δ . Cada um desses parâmetros, U , W e δ , altera o comportamento dos elétrons de modo específico. A interação U , quando forte, é capaz de levar o sistema a uma fase isolante de Mott. Uma desordem W forte é capaz de gerar um isolante de Anderson. Já a dopagem δ , quando próxima de 1, pode fazer o sistema se comportar como um isolante de bandas. A combinação desses três efeitos é complexa de ser tratada e pode gerar comportamentos físicos que não existem ao considerar isoladamente os parâmetros U , W e δ . Apesar de considerarmos poucos parâmetros em comparação a um material real, o tratamento de sistemas deste tipo ainda é um grande desafio para teóricos e experimentais, sendo necessário metodologias e análises relativamente complexas para entender os sistemas abordados nesta tese. Mostramos detalhes de regiões ainda pouco exploradas no nosso modelo, contribuindo para o entendimento de sistemas fortemente interagentes desordenados dopados.

Para tratar o problema envolvendo U , W e δ num material, usamos o modelo de Anderson-Hubbard. Esse modelo considera uma competição entre a energia cinética dos elétrons e a interação coulombiana entre eles. Assim, é possível observar transições metal-isolante. Além disso, esse modelo também considera que cada sítio da rede possui uma energia específica, simulando potenciais de profundidade aleatória distribuídos na rede. Dessa forma, a desordem é considerada. Cada valor de energia local é igualmente provável, gerando uma distribuição uniforme de energia. A dopagem eletrônica é considerada ao controlar o potencial químico, sendo dada por $\delta = 2 \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \rho_{av}(\omega) d\omega - 1$, onde $\rho_{av}(\omega)$ é a densidade de estados média. Para resolver esse modelo usamos a metodologia DMFT-

TMT, que é a junção da *Dynamical Mean Field Theory* com a *Typical Medium Theory*. A DMFT é uma importante metodologia para descrever sistemas interagentes. Com ela é possível descrever transições entre a fase metálica e a fase isolante de Mott, além de ser possível considerar efeitos da dopagem. Já a TMT é facilmente acoplada na DMFT e pode descrever efeitos presentes em sistemas desordenados. Para tanto, a DMFT-TMT baseia-se na análise da densidade de estados típica, ou mais provável, para um sistema interagente desordenado e dopado. Essa densidade de estados típica descreve os estados estendidos do sistema e se torna nula quando todos os estados do sistema se localizam, sendo um parâmetro de ordem para descrever a transição metal-isolante devido à desordem. Também é possível descrever os estados localizados da rede, que existem na presença de desordem. A metodologia DMFT-TMT aplicada ao modelo de Anderson-Hubbard já foi anteriormente aplicada ao problema sem dopagem e é capaz de gerar bons resultados. Uma grande vantagem da metodologia usada neste trabalho é que ela consegue gerar bons resultados e ainda ser menos custosa em termos de tempo e recursos computacionais, o que favorece sua utilização para descrever diagramas de fase. Utilizamos também um tratamento analítico no limite atômico, que foi útil para o entendimento do presente trabalho, reforçando a validade dos resultados numéricos encontrados nesse limite.

Em nossos resultados, conseguimos resumir todos os comportamentos físicos do modelo de Anderson-Hubbard em diagramas de fase da desordem W pela dopagem δ ao fixar um valor de interação U . Começamos considerando casos limites para pequenas e grandes interações onde a desordem é nula, ou então quando a dopagem é nula. Após essa etapa mostramos o que ocorre quando há efeitos de todos os parâmetros simultaneamente. Iniciamos com o estudo do caso metálico e analisamos a transição do sistema para a fase isolante. Dentro da fase isolante exploramos várias regiões: Isolante de Anderson-Mott quando não existem sítios sem ocupação eletrônica (AMI); Isolante de Anderson-Mott quando existem sítios sem ocupação eletrônica (AMI-0); Isolante de bandas Anderson-Mott; Isolante de Bandas; e Isolante de Anderson com $\delta = 1$.

O metal é caracterizado por um pico em torno do nível de Fermi, que se torna mais estreito à medida que a interação aumenta, mostrando que os portadores de carga possuem cada vez mais massa efetiva, o que dificulta a propagação eletrônica. Ao acrescentar dopagem, esse pico sofre deslocamentos em relação ao nível de Fermi. Partindo de um isolante de Mott, a dopagem tem o efeito de torná-lo um metal. No metal gerado a partir do isolante de Mott não há uma mudança significativa no pico em torno do nível de Fermi se a interação crescer ainda mais. No metal a ocupação eletrônica por sítio e por spin pode assumir qualquer valor dentro do mínimo e máximo permitido, ou seja, é possível existir sítios com ocupação correspondente a um número não inteiro de elétrons. Uma explicação para isso é que os elétrons possuem uma probabilidade de propagar para outros

sítios e portanto contribuir com sua ocupação.

Identificamos no nosso trabalho um isolante que classificamos como isolante de Anderson-Mott (AMI). Esse isolante possui tanto características do isolante de Anderson, quanto características do isolante de Mott. Todos os seus estados são localizados e a densidade de estados do sistema não tem um *gap* no nível de Fermi, assim como num isolante de Anderson. Além disso, alguns sítios possuem um comportamento de isolante de Mott, permanecendo semi preenchidos por causa da repulsão coulombiana local. Identificamos que uma das principais características desse isolante é o fato de não existirem sítios sem ocupação eletrônica. Essa característica só é encontrada no modelo de Anderson-Hubbard quando existem desordem, interação e dopagem atuando simultaneamente.

Para um valor de desordem acima de $W = U/(1 - \delta)$ aparecerá uma região no nosso modelo com características similares ao AMI, mas agora com a presença de sítios sem ocupação eletrônica. Essa região é identificada como AMI-0 no nosso diagrama de fase. Essa região já era conhecida de trabalhos da literatura onde o modelo de Anderson-Hubbard é resolvido para um sistemas sem dopagem. Mostramos que essa região ainda persiste mesmo após adicionarmos dopagem eletrônica, quebrando a simetria partícula-buraco do sistema. O aumento da desordem favorece o aparecimento da região AMI-0 uma vez que grandes valores de desordem promove o surgimento de sítios duplamente ocupados e sítios vazios. Já o crescimento da interação promove sítios com ocupação simples, diminuindo sítios duplamente ocupados ou sítios vazios, desfavorecendo a formação da região AMI-0. Já a dopagem faz existir cada vez mais sítios ocupados, diminuindo a região AMI-0 que é caracterizada pela presença de sítios vazios.

No limite em que a dopagem é grande surgem regiões no modelo de Anderson-Hubbard com comportamentos diferentes das regiões relatadas anteriormente. A região band AMI existe para altas dopagens e para um valor pequeno de desordem. Ela possui estados localizados no nível de Fermi, assim como o isolante de Anderson e sítios com semi preenchimento, similar ao existente no isolante de Mott. Não existem sítios sem ocupação nesse caso, similar ao AMI. Seu diferencial em relação a outras regiões é que a rede ainda possui estados estendidos para algumas valores de ω . A desordem não é capaz de localizar todos os estados. Esse isolante é formado pela atuação de todos os parâmetros do modelo, U , W e δ . Enquanto alguns sítios da rede se comportam como num isolante de Mott, a dopagem desloca os estados das bordas das bandas para próximo do nível de Fermi. A desordem começa a localizar pelas bordas da banda. Como essas bordas estão em torno do nível de Fermi, então o sistema se torna isolante sem que todos os outros estados se localizem. À medida que a dopagem aumenta, sítios com características do isolante de Mott deixam de existir. Quando a dopagem é máxima, todos os sítios terão ocupação máxima. Nessa situação todos os estados do sistema serão deslocados para abaixo no nível

de Fermi, tendo um *gap* de energia em torno do nível de Fermi por causa da dopagem. Para desordem pequena, o sistema é isolante devido a exclusivamente efeitos da dopagem. Para desordens grandes, todos os estados irão se localizar. Como a dopagem “elimina” os efeitos da interação, os sítios que se assemelham ao comportamento do isolante de Anderson dominam todo o sistema.

Todas as regiões do diagrama de fase existem para qualquer valor de interação, exceto o isolante de Mott, que só existe para $\delta = 0$ e U suficientemente grande. Apesar disso, há diferenças no diagrama de fase quando comparamos a interação fraca ($U = 1$) com a interação forte ($U = 3$). Para interação fraca e pouca dopagem, o sistema sofre uma transição saindo da fase metálica e se tornando um AMI-0, que é o mesmo tipo de isolante encontrado em semi preenchimento. Para interação forte e pouca dopagem, o sistema sai da fase metálica e se torna um AMI, região não descrita quando há semi preenchimento, para depois se tornar um AMI-0. O crescimento da interação faz a região AMI crescer cada vez mais em relação a região AMI-0. Para grande dopagem, o crescimento da interação diminui a região isolante de bandas Anderson-Mott.

Apesar de usarmos o modelo de Anderson-Hubbard para a rede de Bethe, um modelo relativamente simples para uma rede cristalina também simples, podemos ver que foi possível detalhar um diagrama de fase rico em informações. Deixaremos como perspectivas futuras o acréscimo de mais parâmetros nesse modelo, aproximando cada vez mais do estudo de todas as características encontradas para um material real. Este trabalho pode atuar como uma base para vários outros estudos de materiais. Como futuras realizações, nesse modelo podem ser consideradas diferentes redes cristalinas, modificando o caminho por onde os elétrons irão propagar, podem ser incluídas interações entre sítios vizinhos, podendo gerar regiões com ordenamento de carga, pode-se estudar efeitos de temperatura, podendo alterar a dispersão dos portadores de carga, pode-se controlar o ordenamento dos spins, indo além do caso paramagnético estudado nesta tese, gerando diferentes propriedades magnéticas, dentre vários outros parâmetros que podem ser incluídos.

Referências Bibliográficas

- [1] F. Seitz. *Modern Theory of Solids*. 1940. Citado na página 10.
- [2] M. Alonso e E. J. Finn. *Fundamental University Physics. 3: Quantum and Statistical Physics*. Addison-Wesley, 1970. Citado nas páginas 11 e 15.
- [3] E. Kaxiras. *Atomic and electronic structure of solids*. 2003. Citado nas páginas 11 e 12.
- [4] P. W. Anderson. More is different. *Science*, 177(4047):393–396, 1972. Citado na página 12.
- [5] J. L. Smith e E. A. Kmetko. Magnetism or bonding: A nearly periodic table of transition elements. *Journal of the Less Common Metals*, 90(1):83–88, 1983. Citado nas páginas 12 e 13.
- [6] P. Coleman. *Introduction to many-body physics*. Cambridge University Press, 2015. Citado nas páginas 12, 50, 52 e 53.
- [7] D. B. McWhan, T. M. Rice e J. P. Remeika. Mott transition in *Cr*-doped V_2O_3 . *Phys. Rev. Lett.*, 23(24):1384, 1969. Citado na página 13.
- [8] D. B. McWhan *et al.* Metal-insulator transitions in pure and doped V_2O_3 . *Phys. Rev. B*, 7(5):1920, 1973. Citado na página 13.
- [9] N. F. Mott. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proc. Phys. Soc. Section A*, 62(7):416, 1949. Citado nas páginas 14, 25 e 30.
- [10] A. Georges e G. Kotliar. Hubbard model in infinite dimensions. *Phys. Rev. B*, 45(12):6479, 1992. Citado nas páginas 14 e 31.
- [11] V. Dobrosavljevic, N. Trivedi e James M. V. Jr. *Conductor insulator quantum phase transitions*. Oxford University Press, 2012. Citado na página 16.

- [12] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109(5):1492, 1958. Citado nas páginas 16, 35 e 39.
- [13] V. Dobrosavljević, A. A. Pastor e B. K. Nikolić. Typical medium theory of anderson localization: A local order parameter approach to strong-disorder effects. *EPL (Europhysics Letters)*, 62(1):76, 2003. Citado nas páginas 16, 38, 39, 41 e 58.
- [14] J. H. de Boer e E. J. W. Verwey. Semi-conductors with partially and with completely filled 3d-lattice bands. *Proceedings of the Physical Society*, 49(4S):59, 1937. Citado nas páginas 18 e 30.
- [15] A. Georges, et al. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.*, 68(1):13, 1996. Citado nas páginas 19, 21, 32, 46, 51, 55 e 119.
- [16] F. J. Morin. Oxides which show a metal-to-insulator transition at the neel temperature. *Phys. Rev. Lett.*, 3(1):34, 1959. Citado na página 19.
- [17] S.-K. Mo *et. al.*. Prominent quasiparticle peak in the photoemission spectrum of the metallic phase of V_2O_3 . *Phys. Rev. Lett.*, 90(18):186403, 2003. Citado na página 20.
- [18] A. C. Hewson. *The Kondo problem to heavy fermions*, volume 2. Cambridge university press, 1997. Citado nas páginas 20, 32, 63 e 119.
- [19] G. Kotliar e D. Vollhardt. Strongly correlated materials: Insights from dynamical mean-field theory. *Physics Today*, 57(3):53–59, 2004. Citado nas páginas 20 e 33.
- [20] J. Vučičević, et al. Finite-temperature crossover and the quantum widom line near the mott transition. *Phys. Rev. B*, 88(7):075143, 2013. Citado nas páginas 21 e 34.
- [21] H. Terletska, J. Vučičević, D. Tanasković e V. Dobrosavljević. Quantum critical transport near the mott transition. *Phys. Rev. Lett.*, 107(2):026401, 2011. Citado na página 21.
- [22] T. Furukawa, et al. Quantum criticality of mott transition in organic materials. *Nature Physics*, 11(3):221–224, 2015. Citado na página 21.
- [23] A. Pustogow, et al. Quantum spin liquids unveil the genuine mott state. *Nature materials*, 17(9):773–777, 2018. Citado na página 21.
- [24] V. Dobrosavljević, E. Abrahams, E. Miranda e S. Chakravarty. Scaling theory of two-dimensional metal-insulator transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 79(3):455, 1997. Citado na página 21.

- [25] M. M. Radonjić, et al. Wigner-mott scaling of transport near the two-dimensional metal-insulator transition. *Phys. Rev. B*, 85(8):085133, 2012. Citado na página 21.
- [26] X. Deng, et al. How bad metals turn good: Spectroscopic signatures of resilient quasiparticles. *Phys. Rev. Lett.*, 110(8):086401, 2013. Citado na página 21.
- [27] A. Pustogow, et al. Low-temperature dielectric anomaly arising from electronic phase separation at the mott insulator-metal transition. *NPJ Quantum Materials*, 6(1):1–7, 2021. Citado na página 21.
- [28] E. Abrahams, S. V. Kravchenko e M. P. Sarachik. Metallic behavior and related phenomena in two dimensions. *Rev. Mod. Phys.*, 73(2):251, 2001. Citado nas páginas 21, 22, 26 e 28.
- [29] S. V. Kravchenko, et al. Scaling of an anomalous metal-insulator transition in a two-dimensional system in silicon at $B = 0$. *Phys. Rev. B*, 51(11):7038, 1995. Citado nas páginas 22 e 23.
- [30] D. Simonian, et al. Magnetic field suppression of the conducting phase in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 79(12):2304, 1997. Citado nas páginas 22 e 23.
- [31] D. Popović, A. B. Fowler e S. Washburn. Metal-insulator transition in two dimensions: Effects of disorder and magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 79(8):1543, 1997. Citado na página 23.
- [32] Y. Hanein, et al. The metalliclike conductivity of a two-dimensional hole system. *Phys. Rev. Lett.*, 80(6):1288, 1998. Citado na página 23.
- [33] E. M. Lifshitz e L. P. Pitaevskii. *Statistical physics: theory of the condensed state*, volume 9. Elsevier, 2013. Citado na página 23.
- [34] A. A. Shashkin, et al. Sharp increase of the effective mass near the critical density in a metallic two-dimensional electron system. *Phys. Rev. B*, 66(7):073303, 2002. Citado nas páginas 23 e 24.
- [35] C. T. Chen, et al. Electronic states in $La_{2-x}Sr_xCuO_{4+\delta}$ probed by soft-x-ray absorption. *Phys. Rev. Lett.*, 66(1):104, 1991. Citado na página 25.
- [36] J. M. Ziman. *Models of disorder: the theoretical physics of homogeneously disordered systems*. CUP Archive, 1979. Citado nas páginas 25 e 83.
- [37] D. S. Wiersma, et al. Localization of light in a disordered medium. *Nature*, 390(6661):671–673, 1997. Citado na página 25.

- [38] F. Scheffold, et al. Localization or classical diffusion of light? *Nature*, 398(6724):206–207, 1999. Citado na página 25.
- [39] M. Störzer, et al. Observation of the critical regime near anderson localization of light. *Phys. Rev. Lett.*, 96(6):063904, 2006. Citado na página 25.
- [40] T. Schwartz, et al. Transport and anderson localization in disordered two-dimensional photonic lattices. *Nature*, 446(7131):52–55, 2007. Citado na página 25.
- [41] Y. Lahini, et al. Anderson localization and nonlinearity in one-dimensional disordered photonic lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 100(1):013906, 2008. Citado na página 25.
- [42] R. Dalichaouch, et al. Microwave localization by two-dimensional random scattering. *Nature*, 354(6348):53–55, 1991. Citado na página 25.
- [43] A. A. Chabanov, M. Stoytchev e A. Z. Genack. Statistical signatures of photon localization. *Nature*, 404(6780):850–853, 2000. Citado na página 25.
- [44] R. L. Weaver. Anderson localization of ultrasound. *Wave motion*, 12(2):129–142, 1990. Citado na página 25.
- [45] J. Billy, et al. Direct observation of anderson localization of matter waves in a controlled disorder. *Nature*, 453(7197):891–894, 2008. Citado na página 25.
- [46] E. Akkermans e G. Montambaux. *Mesoscopic physics of electrons and photons*. Cambridge university press, 2007. Citado na página 25.
- [47] A. F. Ioffe e A. R. Regel. Non-crystalline, amorphous and liquid electronic semiconductors. Citado na página 25.
- [48] N. F. Mott. *Electrons in glass:[Nobel lecture]*. Nobel foundation, 1977. Citado na página 26.
- [49] G. Semeghini, et al. Measurement of the mobility edge for 3d anderson localization. *Nature Physics*, 11(7):554–559, 2015. Citado na página 26.
- [50] P. A. Lee e T. V. Ramakrishnan. Disordered electronic systems. *Rev. Mod. Phys.*, 57(2):287, 1985. Citado nas páginas 26 e 36.
- [51] D. Belitz e T. R. Kirkpatrick. The anderson-mott transition. *Rev. Mod. Phys.*, 66(2):261, 1994. Citado nas páginas 26 e 37.
- [52] S. V. Kravchenko e M. P. Sarachik. Metal–insulator transition in two-dimensional electron systems. *Reports on Progress in Physics*, 67(1):1, 2003. Citado na página 26.

- [53] C. Claudio, et al. Interaction-driven metal-insulator transitions in disordered fermion systems. *Phys. Rev. B*, 30(2):527, 1984. Citado nas páginas 26 e 37.
- [54] M. A. Tusch e D. E. Logan. Interplay between disorder and electron interactions in a $d=3$ site-disordered anderson-hubbard model: A numerical mean-field study. *Phys. Rev. B*, 48(20):14843, 1993. Citado na página 26.
- [55] D. L. Shepelyansky. Coherent propagation of two interacting particles in a random potential. *Phys. Rev. Lett.*, 73(19):2607, 1994. Citado na página 26.
- [56] P. J. H. Denteneer, R. T. Scalettar e N. Trivedi. Particle-hole symmetry and the effect of disorder on the mott-hubbard insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 87(14):146401, 2001. Citado na página 26.
- [57] J. G. Analytis, et al. Effect of irradiation-induced disorder on the conductivity and critical temperature of the organic superconductor κ -(bedt-ttf)₂cu(scn)₂. *Phys. Rev. Lett.*, 96(17):177002, 2006. Citado na página 27.
- [58] A. Richardella, et al. Visualizing critical correlations near the metal-insulator transition in $\text{ga}_1\text{-xmnxas}$. *Science*, 327(5966):665–669, 2010. Citado na página 28.
- [59] E. Miranda e V. Dobrosavljević. Disorder-driven non-fermi liquid behaviour of correlated electrons. *Reports on Progress in Physics*, 68(10):2337, 2005. Citado nas páginas 28 e 38.
- [60] E. Abrahams. *50 years of Anderson Localization*, volume 24. world scientific, 2010. Citado nas páginas 28 e 35.
- [61] E. Lahoud, et al. Emergence of a novel pseudogap metallic state in a disordered 2d mott insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 112(20):206402, 2014. Citado nas páginas 28 e 29.
- [62] Z. Wang, et al. Disorder induced power-law gaps in an insulator–metal mott transition. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 115(44):11198–11202, 2018. Citado na página 28.
- [63] F. Bloch. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für physik*, 52(7):555–600, 1929. Citado na página 30.
- [64] N. F. Mott e R. Peierls. Discussion of the paper by de boer and verwey. *Proceedings of the Physical Society*, 49(4S):72, 1937. Citado na página 30.
- [65] J. C. Slater e G. F. Koster. Simplified lcao method for the periodic potential problem. *Phys. Rev.*, 94(6):1498, 1954. Citado na página 30.

- [66] L. D. Landau. On the theory of the fermi liquid. *Sov. Phys. JETP*, 8(1):70, 1959. Citado na página 30.
- [67] P. Nozieres. *Theory of quantum liquids*. CRC Press, 2018. Citado na página 31.
- [68] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 276, pages 238–257. The Royal Society, 1963. Citado nas páginas 31 e 49.
- [69] F. H. L. Essler, et al. *The one-dimensional Hubbard model*. Cambridge University Press, 2005. Citado na página 31.
- [70] E. Dagotto. Correlated electrons in high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 66(3):763, 1994. Citado na página 31.
- [71] C. Lanczos. *An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators*. United States Governm. Press Office Los Angeles, CA, 1950. Citado nas páginas 31 e 119.
- [72] R. Blankenbecler, D. J. Scalapino e R. L. Sugar. Monte carlo calculations of coupled boson-fermion systems. I. *Phys. Rev. D*, 24(8):2278, 1981. Citado na página 31.
- [73] W. Metzner e D. Vollhardt. Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 62(3):324, 1989. Citado nas páginas 31, 51 e 56.
- [74] M. J. Rozenberg, X. Y. Zhang e G. Kotliar. Mott-hubbard transition in infinite dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 69(8):1236, 1992. Citado na página 32.
- [75] A. Georges e W. Krauth. Numerical solution of the $d = \infty$ hubbard model: Evidence for a mott transition. *Phys. Rev. Lett.*, 69(8):1240, 1992. Citado na página 32.
- [76] A. Georges e W. Krauth. Physical properties of the half-filled hubbard model in infinite dimensions. *Phys. Rev. B*, 48(10):7167, 1993. Citado na página 32.
- [77] T. Pruschke, D. L. Cox e M. Jarrell. Transport properties of the infinite-dimensional hubbard model. *EPL (Europhys. Lett.)*, 21(5):593, 1993. Citado na página 32.
- [78] T. Pruschke, D. L. Cox e M. Jarrell. Hubbard model at infinite dimensions: Thermodynamic and transport properties. *Phys. Rev. B*, 47(7):3553, 1993. Citado na página 32.
- [79] M. Caffarel e W. Krauth. Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, 72(10):1545, 1994. Citado na página 32.

- [80] L. Laloux, A. Georges e W. Krauth. Effect of a magnetic field on mott-hubbard systems. *Phys. Rev. B*, 50(5):3092, 1994. Citado na página 32.
- [81] J. Kondo. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Prog. Theor. Phys.*, 32(1):37–49, 1964. Citado na página 32.
- [82] M. B. J. Meinders, H. Eskes e G. A. Sawatzky. Spectral-weight transfer: Breakdown of low-energy-scale sum rules in correlated systems. *Phys. Rev. B*, 48(6):3916, 1993. Citado na página 35.
- [83] H. Kajueter e G. Kotliar. New iterative perturbation scheme for lattice models with arbitrary filling. *Phys. Rev. Lett.*, 77(1):131, 1996. Citado nas páginas 34, 36, 54, 84, 120 e 121.
- [84] H. Eskes, M. B. J. Meinders e G. A. Sawatzky. Anomalous transfer of spectral weight in doped strongly correlated systems. *Phys. Rev. Lett.*, 67(8):1035, 1991. Citado na página 34.
- [85] E. Dagotto, et al. Density of states of doped hubbard clusters. *Phys. Rev. Lett.*, 67(14):1918, 1991. Citado na página 34.
- [86] H. Eskes, et al. Spectral properties of the hubbard bands. *Phys. Rev. B*, 50(24):17980, 1994. Citado na página 34.
- [87] W. Kohn. Theory of the insulating state. *Phys. Rev.*, 133(1A):A171, 1964. Citado na página 36.
- [88] S. R. Ovshinsky. Reversible electrical switching phenomena in disordered structures. *Phys. Rev. Lett.*, 21(20):1450, 1968. Citado na página 36.
- [89] N. F. Mott e W. D. Twose. The theory of impurity conduction. *Advances in physics*, 10(38):107–163, 1961. Citado na página 36.
- [90] N. F. Mott. Electrons in disordered structures. *Advances in Physics*, 16(61):49–144, 1967. Citado na página 36.
- [91] M. E. Fisher. The theory of equilibrium critical phenomena. *Reports on progress in physics*, 30(2):615, 1967. Citado na página 36.
- [92] P. Soven. Coherent-potential model of substitutional disordered alloys. *Phys. Rev.*, 156(3):809, 1967. Citado na página 36.
- [93] E. Abrahams, et al. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 42(10):673, 1979. Citado nas páginas 36, 37 e 38.

- [94] F. Wegner. The mobility edge problem: continuous symmetry and a conjecture. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 35(3):207–210, 1979. Citado na página 37.
- [95] L. Schäfer e F. Wegner. Disordered system with n orbitals per site: Lagrange formulation, hyperbolic symmetry, and goldstone modes. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 38(2):113–126, 1980. Citado na página 37.
- [96] N. Goldenfeld. *Lectures on phase transitions and the renormalization group*. CRC Press, 2018. Citado na página 37.
- [97] A. Lagendijk, B. V. Tiggelen e D. S. Wiersma. Fifty years of anderson localization. *Phys. Today*, 62(8):24–29, 2009. Citado na página 38.
- [98] A. M. Finkelshtein. Effect of coulomb interaction on the properties of disordered metals. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 84(1):168–189, 1983. Citado na página 37.
- [99] A. M. Finkel'stein. Metal–insulator transition in a disordered system. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 86:367–380, 1984. Citado na página 37.
- [100] A. Punnoose e A. M. Finkel'stein. Dilute electron gas near the metal-insulator transition: Role of valleys in silicon inversion layers. *Phys. Rev. Lett.*, 88(1):016802, 2001. Citado na página 37.
- [101] C. Castellani, G. Kotliar e P. A. Lee. Fermi-liquid theory of interacting disordered systems and the scaling theory of the metal-insulator transition. *Phys. Rev. Lett.*, 59(3):323, 1987. Citado na página 37.
- [102] V. Dobrosavljević, T. R. Kirkpatrick e G. Kotliar. Kondo effect in disordered systems. *Phys. Rev. Lett.*, 69(7):1113, 1992. Citado na página 38.
- [103] V. Dobrosavljević e G. Kotliar. Mean field theory of the mott-anderson transition. *Phys. Rev. Lett.*, 78(20):3943, 1997. Citado na página 38.
- [104] V. Dobrosavljević e G. Kotliar. Dynamical mean–field studies of metal–insulator transitions. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 356(1735):57–74, 1998. Citado na página 38.
- [105] M. C. O. Aguiar, E. Miranda e V. Dobrosavljević. Localization effects and inelastic scattering in disordered heavy electrons. *Phys. Rev. B*, 68(12):125104, 2003. Citado na página 38.

- [106] M. C. O. Aguiar, et al. Temperature-dependent transport of correlated disordered electrons: Elastic vs. inelastic scattering. *EPL (Europhysics Letters)*, 67(2):226, 2004. Citado na página 38.
- [107] E. Miranda e V. Dobrosavljević. Localization effects in disordered kondo lattices. *Physica B: Condensed Matter*, 259:359–361, 1999. Citado na página 38.
- [108] M. M. Radonjić, et al. Influence of disorder on incoherent transport near the mott transition. *Phys. Rev. B*, 81(7):075118, 2010. Citado na página 39.
- [109] K. Byczuk, W. Hofstetter e D. Vollhardt. Mott-hubbard transition versus anderson localization in correlated electron systems with disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 94(5):056404, 2005. Citado nas páginas 41 e 42.
- [110] H. Bruus e K. Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. OUP Oxford, 2004. Citado na página 42.
- [111] G. Kotliar e A. E. Ruckenstein. New functional integral approach to strongly correlated fermi systems: The gutzwiller approximation as a saddle point. *Phys. Rev. Lett.*, 57(11):1362, 1986. Citado nas páginas 42 e 119.
- [112] M. C. O. Aguiar, et al. Scaling behavior of an anderson impurity close to the mott-anderson transition. *Phys. Rev. B*, 73(11):115117, 2006. Citado nas páginas 42 e 87.
- [113] H. Bragança, et al. Anderson localization effects near the mott metal-insulator transition. *Phys. rev. B*, 92(12):125143, 2015. Citado nas páginas 42, 43, 73 e 78.
- [114] S. Chiesa, et al. Disorder-induced stabilization of the pseudogap in strongly correlated systems. *Phys. Rev. Lett.*, 101(8):086401, 2008. Citado nas páginas 44 e 45.
- [115] A. Georges. Strongly correlated electron materials: Dynamical mean-field theory and electronic structure. In *AIP Conference Proceedings*, volume 715, pages 3–74. AIP, 2004. Citado nas páginas 46 e 49.
- [116] P. Weiss. L’hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique. *J. Phys. Theor. Appl.*, 6(1):661–690, 1907. Citado na página 46.
- [117] D. C. Mattis. *The theory of magnetism I: Statics and Dynamics*, volume 17. Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 47.
- [118] E. Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31(1):253–258, 1925. Citado na página 47.

- [119] E. Miranda. *Transições de fase e o grupo de renormalização*. 2005. Citado na página 48.
- [120] V. L. Libero. De ising a metropolis. *Rev. Bras. Ens. Fis*, 22(3), 2000. Citado na página 48.
- [121] H. Wich. N. F. Mott. Metal-insulator transitions. Taylor & Francis Ltd., London 1974 XVI, 278 Seiten, 158 Figuren. Preis geb. *Crystal Research and Technology*, 10(4), 1975. Citado na página 50.
- [122] J. W. Negele e H. Orland. *Quantum many-particle systems*. CRC Press, 2018. Citado na página 50.
- [123] R. Shankar. Renormalization-group approach to interacting fermions. *Rev. Mod. Phys.*, 66(1):129, 1994. Citado na página 50.
- [124] P. W. Anderson. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.*, 124(1):41, 1961. Citado nas páginas 52 e 119.
- [125] F. J. Dyson. The s matrix in quantum electrodynamics. *Phys. Rev.*, 75(11):1736, 1949. Citado na página 54.
- [126] M. Potthoff, T. Wegner e W. Nolting. Interpolating self-energy of the infinite-dimensional hubbard model: Modifying the iterative perturbation theory. *Phys. Rev. B*, 55(24):16132, 1997. Citado na página 54.
- [127] T. Wegner, M. Potthoff e W. Nolting. Temperature-dependent electronic structure and ferromagnetism in the $d = \infty$ hubbard model studied by a modified perturbation theory. *Phys. Rev. B*, 57(11):6211, 1998. Citado na página 54.
- [128] M. Kurata, R. Kikuchi e T. Watari. A theory of cooperative phenomena. iii. detailed discussions of the cluster variation method. *The Journal of Chemical Physics*, 21(3):434–448, 1953. Citado na página 56.
- [129] H. A. Bethe. Statistical theory of superlattices. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences*, 150(871):552–575, 1935. Citado na página 56.
- [130] M. F. Thorpe. Excitations in disordered systems. Technical report, Plenum Publishing Corp., New York, NY, 1982. Citado na página 56.
- [131] D. Ben-Avraham e M. L. Glasser. Diffusion-limited one-species reactions in the bethe lattice. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 19(6):065107, 2007. Citado na página 57.

- [132] M. C. O. Aguiar, et al. Tese: Efeitos de temperatura e de interação finita em sistemas desordenados correlacionados. 2003. Citado na página 60.
- [133] N. Giovanni, M. Civelli e M. C. O. Aguiar. Anderson localization effects on the doped hubbard model. *Phys. Rev. B*, 103(24):245134, 2021. Citado nas páginas 69 e 125.
- [134] P. Phillips. *Advanced solid state physics*. Cambridge University Press, 2012. Citado nas páginas 116 e 117.
- [135] R. Bulla, A. C. Hewson e T. Pruschke. Numerical renormalization group calculations for the self-energy of the impurity anderson model. *J. Phys. Condens. Matter*, 10(37):8365, 1998. Citado na página 119.
- [136] S. Blawid. Model of semimetallic behavior in strongly correlated electron systems. *Phys. Rev. B*, 59(7):4777, 1999. Citado na página 119.
- [137] D. J. García, K. Hallberg e M. J. Rozenberg. Dynamical mean field theory with the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. Lett.*, 93(24):246403, 2004. Citado na página 119.
- [138] P. Werner, et al. Continuous-time solver for quantum impurity models. *Phys. Rev. Lett.*, 97(7):076405, 2006. Citado na página 119.
- [139] K. Yosida e K. Yamada. Perturbation expansion for the anderson hamiltonian. III. *Prog. Theor. Phys.*, 53(5):1286–1301, 1975. Citado na página 119.
- [140] D. Meyer, et al. The asymmetric single-impurity anderson model-the modified perturbation theory. *Physica B: Condensed Matter*, 270(3):225–232, 1999. Citado nas páginas 120 e 121.
- [141] J. K. Freericks e M. Jarrell. Iterated perturbation theory for the attractive holstein and hubbard models. *Phys. Rev. B*, 50(10):6939, 1994. Citado na página 120.
- [142] H. Barman e N. S. Vidhyadhiraja. Transport and spectra in the half-filled hubbard model: A dynamical mean field study. *International Journal of Modern Physics B*, 25(18):2461–2479, 2011. Citado na página 120.
- [143] D. C. Langreth. Friedel sum rule for anderson’s model of localized impurity states. *Phys. Rev.*, 150(2):516, 1966. Citado na página 121.
- [144] A. Martin-Rodero, et al. A new solution to the anderson-newns hamiltonian of chemisorption. *Solid state communications*, 44(6):911–914, 1982. Citado na página 121.

- [145] G. H. Hardy. On Hilbert Transforms. *The Quarterly Journal of Mathematics*, os-3(1):102–112, 01 1932. Citado na página 123.
- [146] C. W. Wong. *Introduction to mathematical physics: Methods & concepts*. OUP Oxford, 2013. Citado na página 123.
- [147] J. W. Brown e R. V. Churchill. *Variáveis complexas e aplicações*. McGraw Hill Brasil, 2015. Citado na página 124.

APÊNDICE A -

Densidade de estados a partir da função de Green

Neste apêndice é explicado brevemente como sair das funções de Green e chegar em quantidades de interesse desta tese, como a densidade de estados eletrônica.

Funções de Green

Em sistemas de muitas partículas pode-se fazer necessário o uso das funções de Green. No caso, ao invés de resolvermos um modelo tratando diretamente um operador linear podemos usar um método alternativo de resolução deste problema. As funções de Green $G(x, s)$ de um operador linear $L = L(x)$ atuante em uma distribuição do espaço R^n em um ponto s são qualquer solução de

$$LG(x, s) = \delta(x - s), \quad (1)$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac. Considerando a equação abaixo,

$$Lu(x) = f(x), \quad (2)$$

notamos que com a função de Green podemos resolver a equação acima, pois

$$Lu(x) = \int LG(x, s)f(s)ds, \quad (3)$$

uma vez que

$$\int LG(x, s)f(s)ds = \int \delta(x - s)f(s)ds = f(x). \quad (4)$$

Assim, também podemos dizer que

$$Lu(x) = L \left(\int G(x, s) f(s) ds \right) \quad (5)$$

ou

$$u(x) = \int G(x, s) f(s) ds, \quad (6)$$

ou seja, através da equação acima, notamos que podemos obter $u(x)$ sem depender diretamente do operador L .

Vamos agora exemplificar o uso da função de Green encontrando a densidade de estados e também estudar um problema físico com dois níveis de energia.

Densidade de estados através da função de Green

No estudo da matéria condensada, podemos encontrar a densidade de estados através das funções de Green. Para verificar isso, vamos usar um operador $\mathbf{L} = (\mathbf{E} + i\mathbf{\Gamma} - \mathbf{H})$, onde \mathbf{E} é um operador que descreve a energia do elétron, \mathbf{I} é o operador identidade, Γ é um número real positivo onde posteriormente faremos $\Gamma \rightarrow 0^+$ e \mathbf{H} é o Hamiltoniano do nosso problema que influenciará na dinâmica de um elétron propagando num material. Nesse caso podemos usar a equação:

$$(\mathbf{E} + i\mathbf{\Gamma} - \mathbf{H})G = \mathbf{I}. \quad (7)$$

Multiplicando ambos os lados pelo inverso de $(\mathbf{E} - \mathbf{H} + i\mathbf{\Gamma})$ e expandindo para todos os autoestados E_n de \mathbf{H} (que pode ser o Hamiltoniano do problema de uma impureza de Anderson por exemplo), temos

$$G(E + i\Gamma) = \sum_n \frac{|n\sigma\rangle\langle n\sigma|}{E + i\Gamma - E_n}. \quad (8)$$

Essa equação, (8), será usada mais adiante. Antes, vamos escrever o número de ocupação para elétrons localizados em um sólido com estado relacionado ao orbital d e spin σ :

$$\langle n_{d\sigma} \rangle = \sum_{n, \varepsilon_{n\sigma} \leq \varepsilon_F} |\langle n\sigma | d\sigma \rangle|^2 = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \rho_{d\sigma}(\varepsilon), \quad (9)$$

sendo ε_F a energia de Fermi e $\rho_{d\sigma}(\varepsilon)$ a densidade de estados dada por

$$\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = \sum_n \delta(\varepsilon_{n\sigma} - \varepsilon) |\langle n\sigma | d\sigma \rangle|^2. \quad (10)$$

$\delta(\varepsilon - \varepsilon_{n\sigma})$ é a função delta de Dirac e pode ser escrita como

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon_{n\sigma}) = \frac{1}{\pi} \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \frac{\Gamma}{(\varepsilon - \varepsilon_{n\sigma})^2 + \Gamma^2} = -\frac{1}{\pi} \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \text{Im} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{n\sigma} + i\Gamma}; \quad (11)$$

com isso, escrevemos a densidade de estados da seguinte maneira:

$$\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \text{Im} \sum_n \frac{|\langle n\sigma | d\sigma \rangle|^2}{\varepsilon - \varepsilon_{n\sigma} + i\Gamma}. \quad (12)$$

Ao olharmos para a função de Green descrita pela equação (8), podemos escrever a densidade de estados

$$\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \text{Im} \langle d\sigma | G(\varepsilon + i\Gamma) | d\sigma \rangle, \quad (13)$$

ou então

$$\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \text{Im} G_{dd}^\sigma(\varepsilon + i\Gamma). \quad (14)$$

Ou seja, a densidade de estados é dada pela parte imaginária da função de Green, calculada no eixo real.

Densidade de estados para sistemas com dois níveis de energia

Podemos escrever a equação (7) na forma matricial, definindo os elementos da matriz de G como:

$$\sum_{\beta} (\varepsilon + i\Gamma - H)_{\alpha\beta} G_{\beta,\theta}(\varepsilon) = \delta_{\alpha\theta}, \quad (15)$$

sendo que α , β e θ representam os estados da banda e da impureza com spin σ . É possível mostrar que a equação (15) leva à seguinte expressão para $G_{dd}(\varepsilon)$ [134]:

$$G_{dd}^\sigma(\varepsilon + i\Gamma) = \frac{1}{\varepsilon + i\Gamma - E_{d\sigma} - i\Delta}, \quad (16)$$

onde $i\Delta = \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}d}|^2}{\varepsilon + i\Gamma - \varepsilon_{\vec{k}}}$ representa o termo de hibridização. Combinando a equação (16) com a (14), encontramos a densidade de estados dos elétrons localizados na forma

$$\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(\varepsilon - E_{d\sigma})^2 + \Delta^2}. \quad (17)$$

Na figura 1(a), temos a representação gráfica da relação acima para sistemas sem hibridização. O primeiro pico se refere à energia do primeiro elétron ε_d e o outro à energia do segundo $\varepsilon_d + U$. Em 11(b) temos o caso com hibridização $\Delta \neq 0$. Vemos aqui que o papel da hibridização, nesta aproximação, foi alargar as funções delta de Dirac vistas no

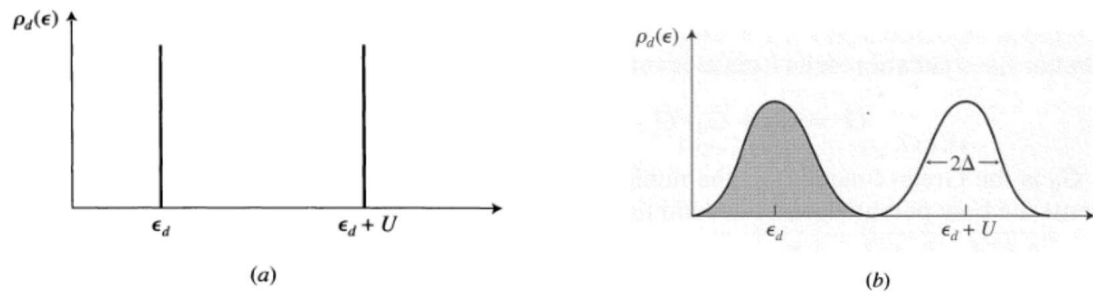


Figura 1: (a) Densidade de estados $\rho(\varepsilon)$ em função de ε para $\Delta = 0$. (b) Densidade de estados $\rho(\varepsilon)$ em função de ε para $\Delta \neq 0$. Figura retirada de [134].

caso em que $V = 0$.

APÊNDICE B -

Problema de uma impureza assimétrico

O problema de uma impureza é usado dentro da DMFT e foi descrito pelo hamiltoniano (3.17), que também escrevemos abaixo:

$$H_{imp} = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + V_{hib} \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \mu) d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow}, \quad (18)$$

sendo que os elétrons tipo d são os elétrons localizados (elétrons no sítio da impureza) e os elétrons tipo c são os elétrons delocalizados (elétrons de condução). O primeiro termo correspondente à energia cinética dos elétrons de condução; o segundo representa a hibridização entre os dois tipos de estados, sendo V_{hib} o potencial de hibridização; o terceiro representa a energia dos elétrons localizados e o último termo representa a interação coulombiana entre os elétrons tipo d .

Para visualizar melhor os resultados do problema de uma impureza podemos olhar para a figura 2. Nela é mostrado um caso simplificado de uma impureza à temperatura zero contendo dois níveis de energia: ε_d e $\varepsilon_d + U$. Para essa situação existem as seguintes configurações: (i) Todos os níveis de energia estão abaixo do nível de Fermi, $\varepsilon_d + U < \varepsilon_F$; (ii) o maior nível de energia está em torno do nível de Fermi, $\varepsilon_d + U \approx \varepsilon_F$; (iii) o nível de Fermi está entre os níveis de energia do sítio $\varepsilon_d < \varepsilon_F < \varepsilon_d + U$; (iv) o menor nível de energia está em torno do nível de Fermi, $\varepsilon_d \approx \varepsilon_F$; e (v) todos os níveis de energia estão acima do nível de Fermi, $\varepsilon_F < \varepsilon_d$. A densidade de estados correspondentes a esses níveis de energia é descrita por funções Delta de Dirac posicionadas em torno de cada valor ε_d e $\varepsilon_d + U$. Para um problema mais complexo como o da equação 18, é necessário considerar temperatura ou até um banho de elétrons em que a impureza está acoplada. Assim, é necessário um tratamento para resolver este problema. Explicaremos neste apêndice

como resolver o problema de uma impureza para situações mais complexas, que envolvem temperatura e um banho acoplado à impureza.

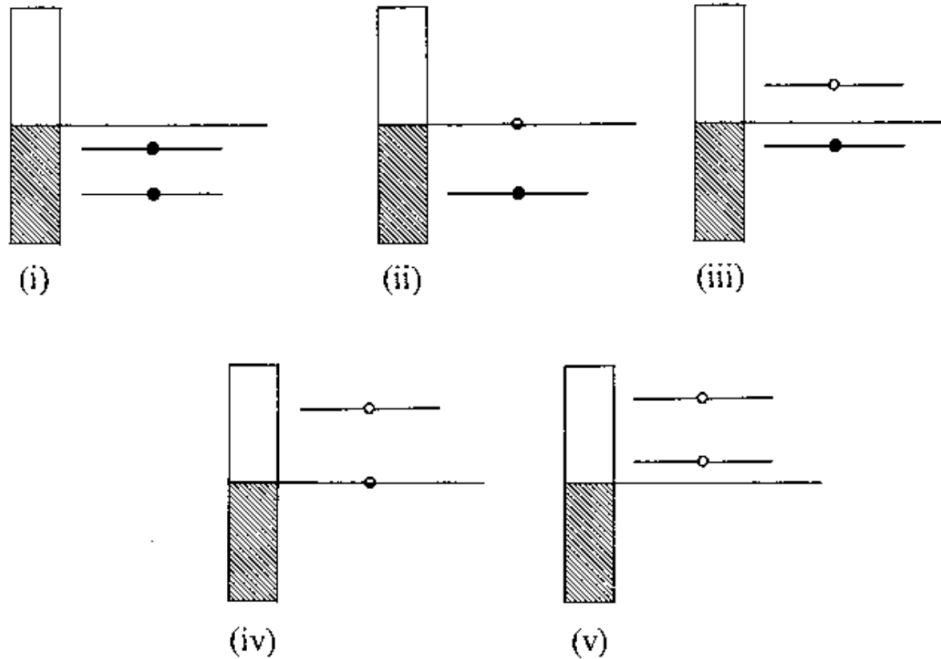


Figura 2: Vários possíveis estados fundamentais para uma impureza quando é desconsiderada a hibridização entre os sítios. Para (i) e (v) os níveis de energias estão totalmente acima ou abaixo do nível de Fermi e para (ii)-(iv) o nível de Fermi está centralizado ou entre os níveis de energias distanciados pela repulsão eletrônica. Figura retirada de [18].

Inicialmente, o modelo de Anderson de uma impureza foi utilizado para tratar momentos magnéticos locais gerados por impurezas magnéticas em metais não magnéticos [124]. Além desse modelo ter sido usado amplamente na literatura, surgiu um grande interesse em estudá-lo no contexto da *Dynamical Mean Field Theory* (DMFT) [15], pois, como visto na seção 3.1.2 do capítulo de metodologia, o problema da rede é mapeado no problema de uma impureza. Podemos citar alguns métodos para resolver esse modelo, como diagonalização exata [71], grupo de renormalização numérico [135], bósons escravos [111], *non-crossing approximation* [136], grupo de renormalização da matriz de densidade [137], Monte Carlo quântico a tempo contínuo [138] e o que estamos usando nesta tese, Teoria de Perturbação Iterativo (do inglês, *Iterative Perturbation Theory* - IPT), como será explicado neste apêndice.

A IPT baseia-se na expansão em torno da solução Hartre-Fock, considerando simetria partícula-buraco [139]. Queremos ir além do caso com simetria partícula-buraco e considerar preenchimentos arbitrários de bandas, ou seja, um caso assimétrico, uma vez que foi estudado neste trabalho o modelo de Hubbard desordenado com dopagem, que recai em casos de preenchimentos arbitrários. Podemos estender a IPT para o caso assimétrico,

usando a chamada teoria de perturbação modificada. Uma proposta dessa modificação a temperatura T nula foi feita por H. Kajueter e G. Kotliar [83] e adaptada posteriormente para $T \neq 0$ [140].

Em um processo de teoria de perturbação com simetria partícula-buraco, a auto-energia $\Sigma(\omega)$ do problema de uma impureza é aproximada até segunda ordem por uma contribuição na forma

$$\Sigma(\omega) \approx Un + \Sigma_0^{(2)}(\omega), \quad (19)$$

sendo

$$n = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im}G_{imp}(\omega)n_F(\omega), \quad (20)$$

onde $n_F(\omega)$ é a distribuição de Fermi.

Com representações diagramáticas de expansões em série dos propagadores (funções de Green), conhecidas como diagramas de Feynman, pode-se encontrar $\Sigma_0^{(2)}(\omega)$ [141], resultando numa correção da auto-energia no eixo imaginário dado por

$$\Sigma_0^{(2)}(i\omega_n) = -\frac{U^2}{\beta^2} \sum_{\omega_1\omega_2} G_0(i\omega_1)G_0(i\omega_2)G_0(i\omega_n - i\omega_1 + i\omega_2). \quad (21)$$

onde ω_n são as frequências de Matsubara.

Usando a representação espectral¹ $G_0(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\rho_0(\omega')}{i\omega_n - \omega'}$ (sendo a densidade de estado não interagente $\rho_0(\omega) = -\text{Im}G_0(\omega)/\pi$) e realizando o somatório nas frequências de Matsubara onde $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$ e $\eta \rightarrow 0^+$, encontramos a expressão abaixo para a parte imaginária da auto-energia no eixo real [142]:

$$\text{Im}\Sigma_0^{(2)}(\omega) = -\pi U^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \rho_0(-\omega') [n_F(\omega')\chi(\omega + \omega') + n_F(-\omega')\chi(-\omega - \omega')], \quad (22)$$

sendo

$$\chi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \rho_0(\omega + \omega')\rho_0(\omega')n_F(-\omega - \omega')n_F(\omega'). \quad (23)$$

A parte real da auto-energia pode ser obtida por uma transformada de Hilbert, ou seja,

$$\text{Re}\Sigma_0^{(2)}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Im}\Sigma_0^{(2)}(\omega')}{\omega - \omega'}. \quad (24)$$

Na teoria de perturbação modificada, a função de Green não interagente $G_0(\omega)$ é definida, no eixo real, como

¹Ver apêndice 5

$$G_0(\omega) = \frac{1}{\omega + \tilde{\mu}_0 - \Delta(\omega)}, \quad (25)$$

sendo $\Delta(\omega) = \sum_{\vec{k}} \frac{V_{hib}^2}{\omega - \varepsilon_{\vec{k}}}$ a função de hibridização. Além disso, introduzimos um potencial químico fictício $\tilde{\mu}_0$, que é calculado como descrito ao longo desta seção. A função de Green interagente $G_{imp}(\omega)$ é dada por

$$G_{imp}(\omega) = [G_0^{-1} - \tilde{\mu}_0 + \mu - \Sigma(\omega)]^{-1} = [\omega + \mu - \Delta(\omega) - \Sigma(\omega)]^{-1}. \quad (26)$$

No método de teoria de perturbação modificado [83], propõe-se uma definição heurística para a auto-energia

$$\Sigma(\omega) = Un + \frac{a\Sigma_0^{(2)}(\omega)}{1 - b\Sigma_0^{(2)}(\omega)}. \quad (27)$$

Os parâmetros a e b são calculados na referência [83] de forma que $\Sigma(\omega)$ tenha comportamento exato em alguns limites. O valor de a é encontrado no limite em que a frequência ω é grande, onde temos

$$a = \frac{n(1-n)}{n_0(1-n_0)}, \quad (28)$$

sendo $n_0 = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Im}G_0(\omega)n_F(\omega)$. Já o valor de b é encontrado quando fazemos $V_{hib} \rightarrow 0$, ou seja, estamos tratando do limite atômico. Então, pode-se encontrar seu valor dado por

$$b = \frac{(1-n)U - \mu + \tilde{\mu}_0}{n_0(1-n_0)U^2}. \quad (29)$$

O valor de $\tilde{\mu}_0$, escrito até aqui como um parâmetro livre, foi obtido por H. Kajueter e G. Kotliar [83] para IPT modificada utilizando a regra de soma de Friedel [143], que pode ser vista como uma condição para que a auto-energia tenha comportamento correto para baixas frequências. Essa condição, no entanto, restringe a solução a $T = 0$. A temperatura finita, podemos encontrar $\tilde{\mu}_0$ impondo $n = n_0$, conforme utilizado por W. Nolting et. al. [140]. Essa condição, $n = n_0$, gera bons resultados quando é comparada com cálculos exatos e foi primeiramente proposta por Martin-Rodero et. al. [144].

Podemos dizer então que a IPT modificada é capaz de fornecer resultados satisfatórios para o problema de uma impureza. No limite de baixas frequências, $\tilde{\mu}_0$ é ajustado de forma que a auto-energia possua resultados corretos. O parâmetro a é encontrado para satisfazer a condição de grandes valores de frequência. Por construção essa teoria já é um boa aproximação para acoplamentos fracos ($U \ll t$), já que a expansão da auto-energia $\Sigma(\omega)$ é feita em torno de $U = 0$. O parâmetro b é calculado de forma que capture o limite atômico, ou seja, a interação U pode ser grande quando expandimos $\Sigma(\omega)$ até segunda

ordem em torno de U . Assim, a IPT modificada é a interpolação dos limites de altas e baixas frequências e de valores grandes e pequenos da interação U .

No presente trabalho consideramos $n = n_0$ e, assim, temos sempre $a = 1$. Dados o banho $\Delta(\omega)$ e o potencial químico μ , podemos supor um valor inicial para o potencial químico fictício $\tilde{\mu}_0$ e determinar a função de Green do problema de uma impureza a partir de um cálculo iterativo em que se impõe a condição $n = n_0$.

APÊNDICE C -

Transformada de Hilbert

Na primeira metade do século XX o matemático G. H. Hardy estudou o que hoje conhecemos como transformada de Hilbert [145], fornecendo definições e condições de sua validade. Essa transformada tem esse nome em homenagem ao matemático D. Hilbert, que já a utilizava em diferentes contextos, como para estudar o Problema de Riemann-Hilbert sobre o círculo.

A transformada de Hilbert é uma transformada integral que mapeia uma função $f(x)$ em uma outra $u(x)$ no mesmo domínio. No caso, uma função $g(x) = f(x) + iu(x)$ é construída para ser sempre uma função analítica na metade superior do plano complexo. Isso nos diz que para a função $g(x)$ analítica a parte real é a transformada de Hilbert da parte imaginária.

Mostraremos que a função de Green é um tipo de função cuja parte real e parte imaginária respeitam as propriedades da transformada de Hilbert [146]. Sua forma pode ser escrita como².

$$G(\omega + i\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\omega')d\omega'}{\omega + i\eta - \omega'}, \quad (30)$$

onde $\rho(\omega')$ é a densidade de estados, $i = \sqrt{-1}$ e η é um número real. Queremos separar a parte real da parte imaginária. Então fazemos

$$G(\omega + i\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\omega')(\omega - i\eta - \omega')d\omega'}{(\omega + i\eta - \omega')(\omega - i\eta - \omega')} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\omega')(\omega - i\eta - \omega')d\omega'}{(\omega - \omega')^2 + \eta^2}. \quad (31)$$

²Essa expressão corresponde à versão contínua da equação (8) do apêndice 5

Separando as duas partes, obtemos:

$$G(\omega + i\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\omega - \omega')\rho(\omega')d\omega'}{(\omega - \omega')^2 + \eta^2} - i\pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta\rho(\omega')d\omega'}{\pi[(\omega - \omega')^2 + \eta^2]}. \quad (32)$$

Fazendo $\eta \rightarrow 0$, temos

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\omega')d\omega'}{\omega - \omega'} - i\pi \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega - \omega')\rho(\omega')d\omega'. \quad (33)$$

Podemos ver que tanto a parte real quanto a parte imaginária da função de Green estão vinculadas a função $\rho(\omega')$. Sabemos que $\text{Im}G(\omega) = -\pi\rho(\omega)$, como mostrado no apêndice A, e que a parte real de $G(\omega)$ é dada por $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\omega')d\omega'}{\omega - \omega'}$, também conhecida por ser uma equação similar à integral de Cauchy [147]. Então temos a equação:

$$\text{Re}G(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G(\omega')d\omega'}{\omega - \omega'}, \quad (34)$$

que relaciona a parte real e imaginária da função de Green, assim como a transformada de Hilbert.




APÊNDICE D -

Artigo publicado

O trabalho relatado nesta tese [133] foi publicado na revista científica *Physical Review B* (PRB), revista pertencente ao grupo *American Physical Society* (APS) que divulga trabalhos de todas as áreas da física. O foco dessa revista são resultados novos dentro da área denominada Física da Matéria Condensada, por onde também pode-se publicar trabalhos envolvendo semicondutores, supercondutividade, magnetismo, transições de fase, materiais que possuem desordem, estrutura eletrônica, cristais fotônicos, física de superfícies, grafeno e várias outras áreas envolvendo materiais. Para ter um artigo aceito na revista PRB é necessário passar por um processo criterioso de revisão por pares. A revista PRB chega a publicar mais de 4500 artigos por ano, sendo uma das maiores revistas de física do mundo e que tem um grande impacto na área de ciência dos materiais.

A seguir, segue o artigo publicado na revista PRB.

Anderson localization effects on the doped Hubbard model

Nathan Giovanni ^{1,2}, Marcello Civelli ², and Maria C. O. Aguiar ^{1,2}

¹*Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais,
Caixa Postale 702, 30123-970, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil*

²*Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Saclay, CNRS, 91405 Orsay, France*



(Received 21 August 2020; revised 7 May 2021; accepted 9 June 2021; published 23 June 2021)

We derive the disorder vs doping phase diagram of the doped Hubbard model via dynamical mean-field theory combined with typical medium theory, which allows the description of both Mott (correlation driven) and Anderson (disorder driven) metal-insulator transitions. We observe a transition from a metal to an Anderson-Mott insulator for increasing disorder strength at all interactions. In the weak correlation regime and rather small doping, the Anderson-Mott insulator displays properties which are similar to the ones found at half filling. In particular, this phase is characterized by the presence of empty sites. If we further increase either the doping or the correlation, however, an Anderson-Mott phase of a different kind arises for sharply weaker disorder strength. This phase occupies the largest part of the phase diagram in the strong-correlation regime and is characterized by the absence of the empty sites.

DOI: [10.1103/PhysRevB.103.245134](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.245134)

I. INTRODUCTION

Mott proposed that electronic correlations can drive a system through a metal-insulator transition (MIT) [1]. Hubbard showed that in a half-filled lattice this transition happens when the local correlation contribution is larger than a critical value [2]. Large correlations are present when a material has a narrow valence band, in which case electrons spread less in the lattice and thus interact more between themselves, favoring the formation of a Mott insulator [3,4]. Transition metal oxides are examples of materials in which this Mott physics plays a key role [4–6].

In the opposite limit, i.e., noninteracting electrons, the presence of disorder can also drive the systems into an insulating phase—the Anderson insulator in this case [7,8]. Even though there have been improvements in sample growing techniques, effects of disorder are hardly avoidable. Therefore, in doped Mott systems too, disorder plays a nontrivial role, interplaying with doping and correlation. These effects are hard to analyze from both experimental and theoretical perspectives.

In experiments, correlation and disorder effects interplay, for example, in the MIT observed in doped semiconductors, such as Si:P and Si:B [9], and in dilute two-dimensional electron and hole systems, like silicon metal-oxide-semiconductor field-effect transistors and semiconductor heterostructures [10,11]. More recently, the observation of a disorder-induced insulator to metal transition was reported in Mott systems, such as layered dichalcogenide $1T$ -TaS₂ [12] and Ru-substituted Sr₃Ir₂O₇ [13].

From the theoretical viewpoint, the interplay between correlation and disorder can be well described by the Hubbard model solved within extensions of dynamical mean-field theory (DMFT) [14]. The DMFT description of disorder is

equivalent to that of the coherent potential approximation [15] and, as such, misses describing Anderson localization effects [7]. To circumvent this problem, a mean-field treatment of disorder, the so-called typical medium theory (TMT), has been proposed and proved capable of describing the disorder-induced localization [16–18]. The combination of TMT with DMFT has contributed to our understanding of the nontrivial interplay between correlation and disorder localization effects [19–26].

In previous works based on DMFT-TMT, an insulating phase which is a mixture of Mott and Anderson insulators was observed at half filling [20,27]. This Anderson-Mott insulator is characterized by the presence of singly occupied sites, like in a Mott insulator, but also has doubly occupied and empty sites, like in an Anderson insulator. We shall hereby refer to this Anderson-Mott insulator as AMI-0. Here, we extend these works by investigating the doping-dependent phase diagram of the disordered Hubbard model.

According to our results, in the weakly correlated regime and for moderately low doping, disorder induces an AMI-0 which is similar to the one found in the disorder-driven Anderson-Mott transition at half filling. As the number of carriers and/or the electronic correlation increases, however, the empty sites become occupied, and an Anderson-Mott insulator (AMI) different from the AMI-0 observed at half filling arises. In the strongly correlated regime, the AMI emerges in a large part of the disorder versus doping phase diagram at much weaker disorder strengths than the AMI-0. This result shows in particular that the doped strongly correlated metal is more susceptible to Anderson-Mott-induced localization than a weakly correlated metal.

This paper is organized as follows. In the next section we define the model and describe the methodology used to solve it. Section III is devoted to the presentation and discussion

of the disorder versus doping phase diagrams built for different values of the electronic correlation. In Sec. III A, we study the AMI-0 region of the phase diagrams, which displays properties similar to the ones of the AMI-0 known at half filling. In Sec. IV we explore in detail the results obtained in the strong-correlation regime $U/4t = 3$ and characterize the rising of a different disorder-driven AMI, which has no empty sites. Finally, Sec. V contains a summary of our conclusions.

II. MODEL AND METHODOLOGY

We focus on the effects of doping the Anderson-Hubbard model (AHM), which is given by the Hamiltonian

$$H = -t \sum_{(ij)\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_i (\varepsilon_i - \mu) n_{i\sigma}, \quad (1)$$

where $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) creates (destroys) an electron with spin σ on site i , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$, t is the hopping amplitude for nearest-neighbor sites, U is the on-site repulsion, and ε_i is the random on-site energy, which follows a uniform probability distribution $P(\varepsilon)$ centered on $\varepsilon = 0$ and of width W . μ is the chemical potential, which sets the doping according to $\delta = 2\langle n_{i\sigma} \rangle_{\text{av}} - 1$ with respect to the parent compound ($\delta = 0$), which is nominally at half filling $\langle n_{i\sigma} \rangle_{\text{av}} = 1/2$; here, $\langle \dots \rangle_{\text{av}}$ denotes an arithmetic average over the disorder of the expectation value of the occupation number operator. We fix here and throughout the paper the noninteracting bandwidth $4t = 1$ as the energy unit. Temperature is set to $T = 0.01$. We consider the paramagnetic solution of the model, observed experimentally, for example, in V_2O_3 at high temperatures [28,29].

To be able to describe the correlated Mott transition, we use DMFT [14]. In this methodology, a clean lattice problem is mapped onto an auxiliary single-impurity problem, whose conduction electron bath is determined self-consistently. In the disordered case, the mapping is onto an ensemble of impurity problems, each corresponding to a different value of the parameter that is randomly distributed [on-site energy ε_i in Eq. (1)]. DMFT self-consistency involves taking an (arithmetic) average over this ensemble. However, average values do not describe well the asymmetric distributions generated by strong disorder [7]. As a drawback, DMFT is not able to capture the Anderson transition. By considering the most probable or typical value over the ensemble, instead of the average one, TMT treatment of disorder has been proved capable of describing Anderson localization [16,17]. Here, we use the combination of DMFT and TMT to solve the AHM [Eq. (1)] and describe the interplay between correlation and disorder-induced localization.

Within DMFT-TMT, all the impurities of the ensemble “see” a typical effective medium, which is self-consistently calculated, as follows. We start by considering an initial function $\Delta(\omega)$ that describes this effective medium. By solving the ensemble of single-impurity problems in the presence of this bath, we obtain the self-energies $\Sigma_i(\omega)$ and the local Green’s functions

$$G(\omega, \varepsilon_i) = [\omega + \mu - \varepsilon_i - \Delta(\omega) - \Sigma_i(\omega)]^{-1}, \quad (2)$$

from which local spectra $\rho(\omega, \varepsilon_i) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\omega, \varepsilon_i)$ are calculated. In each DMFT-TMT iteration, an effective medium is calculated: this is given by the *typical or most probable value* of local impurity spectrum, estimated by taking a *geometric average* over the different impurity problems. Precisely, the typical density of states (DOS) is obtained by the geometric average of $\rho(\omega, \varepsilon)$,

$$\rho_{\text{typ}}(\omega) = \exp \left[\int d\varepsilon P(\varepsilon) \ln \rho(\omega, \varepsilon) \right]. \quad (3)$$

The typical Green’s function is then calculated through a Hilbert transform,

$$G_{\text{typ}}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\rho_{\text{typ}}(\omega')}{\omega - \omega'}. \quad (4)$$

As reference case, we consider the Bethe lattice with an infinite coordination number, which corresponds to a semicircular DOS in the noninteracting limit [14]. In this particular case, we close the self-consistent loop by obtaining the new bath function $\Delta(\omega) = t^2 G_{\text{typ}}(\omega)$.

The typical DOS $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ takes into account only extended states of the system. It is thus critical at the disorder-induced transition, as the system states become localized and $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ is then expected to go to zero. The (arithmetic) average DOS, which is, for instance, directly detected in spectroscopic experiments, can also be calculated from the DOS of the single-impurity problems as follows:

$$\rho_{\text{av}}(\omega) = \int d\varepsilon P(\varepsilon) \rho(\omega, \varepsilon). \quad (5)$$

It considers both extended and localized states of the system [20] and remains finite at disorder-induced MIT. This quantity, however, goes to zero around the Fermi level by increasing correlation. This signals the correlation-driven Mott MIT [14].

Since the DMFT-TMT self-consistent condition is based on the DOS, it is advantageous to solve the single-impurity problems on the real axis to avoid an analytic continuation procedure. Here, we solve these auxiliary problems by using perturbation theory in U [30,31]. Though this method is an approximate solution of the impurity problems which has some well-known drawbacks (e.g., it misses the value of the Kondo temperature), it provides the correct description of the correlated metal to insulator transition, which is the goal of this study. Away from half filling, the modified second-order perturbative contribution in U is given by an expression that interpolates between the known results at high frequencies and at the atomic limit [30,31]. Comparisons of this approximation with exact diagonalization [31] and quantum Monte Carlo [32] results give us confidence in it. Besides directly providing the spectra, this method has the crucial advantage of being numerically fast enough to allow us to build the phase diagram of disordered problems. For each set of the model parameters, we typically solve hundreds of single-impurity problems in each DMFT-TMT iterative step. The single-impurity code used in this work was developed by Vučićević and Tanasković from the Institute of Physics in Belgrade, Serbia, and was previously used by one of us in Ref. [22].

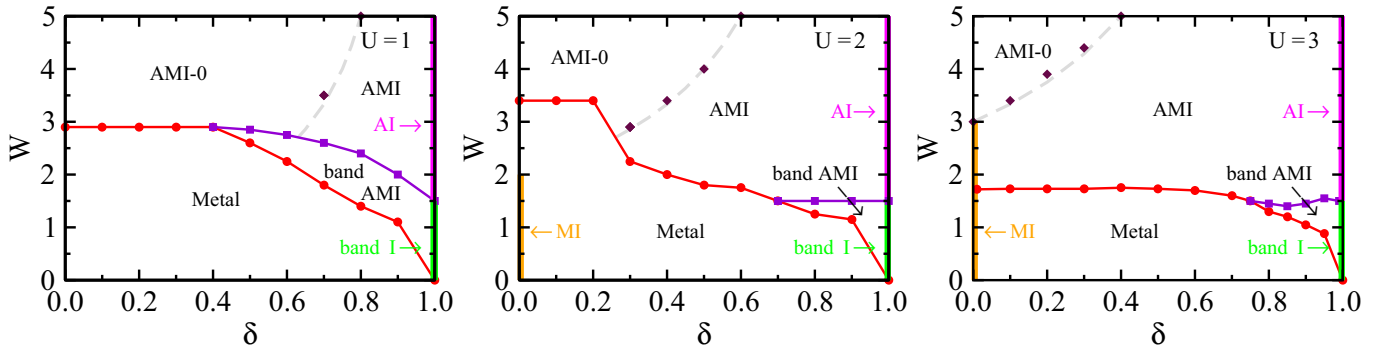


FIG. 1. Disorder W versus doping δ phase diagram of the doped Anderson-Hubbard model obtained within DMFT-TMT for $U = 1$, $U = 2$, and $U = 3$ at $T = 0.01$. “A” stands for Anderson, “M” stands for Mott, and “I” stands for insulator. Inside the Anderson-Mott insulator phase, we have a region where empty sites are present in the system, identified as AMI-0, and another region where empty sites are absent, referred to as AMI. A third region inside the Anderson-Mott insulator is that of a band AMI. See the text for a complete description of the different phases and regions.

When entering into the AMI and AMI-0 regions of the phase diagram, $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ goes to zero, i.e., $\Delta(\omega) \rightarrow 0$, which means that, effectively, the Green’s function in Eq. (2) reduces to the atomic limit one [33]:

$$G_{d\sigma}(\omega) = \frac{1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle}{\omega - \varepsilon_d} + \frac{\langle n_{i-\sigma} \rangle}{\omega - \varepsilon_d - U}, \quad (6)$$

where $\varepsilon_d = \varepsilon_i - \mu$ is the impurity local energy [see Eq. (1)] and $\langle n_{i\sigma} \rangle$ depends on the Fermi-Dirac distribution:

$$\langle n_{i\sigma} \rangle = \frac{1/2}{1 + e^{(\varepsilon_d + U)/T}} + \frac{1/2}{1 + e^{\varepsilon_d/T}}. \quad (7)$$

$\langle n_{i\sigma} \rangle$ can describe singly occupied sites (typical of a Mott insulator) as well as doubly occupied and empty sites (typical of an Anderson insulator); these are the occupations that can appear in the AMI and AMI-0 regions, according to the system parameters (U , W , δ), as we mentioned in the Introduction. We shall plug the explicit analytical expressions (6) and (7) into Eq. (5) to calculate directly $\rho_{\text{av}}(\omega)$ in the AMI and AMI-0 regions. This prevents eventual spurious oscillations that could appear from the discrete finite number of impurities considered and can spoil the correct interpretation of $\rho_{\text{av}}(\omega)$, especially close to the Fermi level. In the next sections, we shall analyze both quantities, $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ and $\rho_{\text{av}}(\omega)$, and characterize the phases appearing in the AHM phase diagram.

III. DISORDER VERSUS DOPING PHASE DIAGRAMS

In Fig. 1, we present the disorder W vs doping δ phase diagram of the doped AHM obtained for three different values of correlation: weak correlation $U = 1$, intermediate correlation $U = 2$, and strong correlation $U = 3$.

For rather small disorder ($W < 3$), at half filling the three cases analyzed in Fig. 1 are different [22]: for $U = 1$ the system is in a metallic phase, for $U = 3$ it is in a Mott insulating phase (represented by the orange line at $\delta = 0$ in the phase diagram), and $U = 2$ is an intermediate case since it is a Mott insulator for small disorder (orange line in Fig. 1) and a metal for intermediate W . It is well known that in the correlated case, upon doping the Mott insulator, states appear at the Fermi level [14]. Thus, for all three values of U in Fig. 1

we observe a correlated metallic phase for a large range of doping and small disorder.

As disorder increases, a transition to the Anderson-Mott insulator takes place in the three cases at a critical disorder W_c . For $U = 1$ and $U = 3$ at small and intermediate values of doping, W_c is practically doping independent. We remark that W_c is smaller for $U = 3$ than for $U = 1$, and in particular for the former case W_c is smaller than $W_c \simeq U$, the critical disorder value separating the correlated Mott insulator from the AMI-0 at half filling (end of the orange line in the phase diagram). If we now look at the results for $U = 2$, the (red) W_c line shows a dependence on doping: it is close to the half-filling value at small doping, and by increasing δ , it decreases towards the same value observed for $U = 3$ (compare W_c for $U = 2$ and $U = 3$ at $\delta \approx 0.7$). W_c vs δ for $U = 2$ thus interpolates between what is observed for $U = 1$ and $U = 3$.

The comparison between the weakly ($U = 1$) and strongly ($U = 3$) correlated phase diagrams described above seems then to suggest that the metal that appears upon doping the Mott insulator is more susceptible to disorder-induced localization than the metal which sets at small U . At larger U , correlations strongly reduce the quasiparticle bandwidth at the Fermi level (by a factor of Z , the quasiparticle residue) by transferring spectral weight from low to high energies. This forms the well-known Mott-peak-Hubbard-band electronic structure [14]. In this region of the phase diagram, the narrow peak indicates that quasiparticles are less itinerant and therefore more easily localized by disorder. A critical W_c , smaller than that in the weak-correlation region, is sufficient to localize quasiparticles. Indeed, if we compare the typical DOSs for the different values of U at $W = 1.5$, shown in Fig. 2, we observe that $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ decreases as U increases. The transition occurs when $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ vanishes since that indicates that extended states of the system fully localize (we will discuss this in more detail in Sec. IV A). This fact lead us to conclude that the system with $U = 3$ is closer to the Anderson MIT than the one with $U = 1$.

The comparison between $U = 1$ and $U = 3$ results indicates that the metal-Anderson-Mott-insulator transition in the weak-correlation regime, where the AMI-0 arises (see the next section for details), and the transition in the strong-correlation regime, where the AMI arises, are sharply different. The AMI,

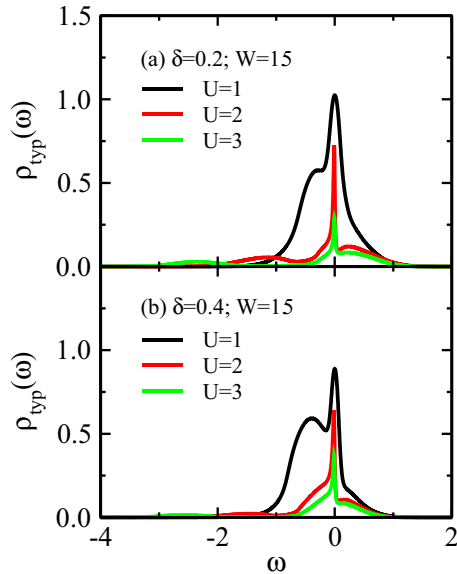


FIG. 2. Comparison of the typical DOS as a function of frequency for $U = 1$, $U = 2$, and $U = 3$ at a disorder value chosen such that the systems are in the metallic phase, (a) $\delta = 0.2$ and (b) $\delta = 0.4$. Although disorder is $W = 1.5$ in all cases, as U increases, the system is closer to the MIT.

in fact, is the by-product of the interplay of disorder with correlation and doping, which suppress empty sites. We shall discuss this in more detail in Sec. IV. For even larger U , the properties of the system are similar to the ones at $U = 3$ when we consider the same doping and disorder values (see Appendix A for details).

Moving now to large doping, a region that we identify as a *band* AMI appears for each U value. In this case (see Sec. IV A for further details), while electronic states are always present at the Fermi level [$\rho_{\text{av}}(\omega = 0) \neq 0$], the typical DOS that describes the extended states shifts to negative frequency and acquires a zero value at the Fermi level, $\rho_{\text{typ}}(\omega = 0) = 0$, like the DOS of a band insulator typically does.

By further increasing disorder W , in the strong-correlation regime and for small doping, the system crosses over from the AMI to the AMI-0, where empty sites are present. This AMI-0 appears at all values of the interaction U (as displayed in Fig. 1) at an Anderson-Mott-like MIT in the weak-correlation regime ($U = 1$) and as a crossover within the Anderson-Mott insulating phase in the strong-correlation regime ($U = 3$). We discuss the properties of this region in detail in the following section.

A. The AMI-0 region

We explore in this section how the AMI-0 arises within the Anderson-Mott insulating phase in the large disorder region of the $U = 3$ phase diagram in Fig. 1. This phase is the same kind of insulator that arises at the Anderson-Mott localization at half filling (see the results for $W = 3.5$ in Appendix B), as we shall show by displaying the spectral function.

In Fig. 3 we show $\rho_{\text{av}}(\omega)$ as a function of frequency for $\delta = 0.2$ and $W = 4$, just above the crossover into the AMI-0 region (when coming from smaller values of W for fixed δ).

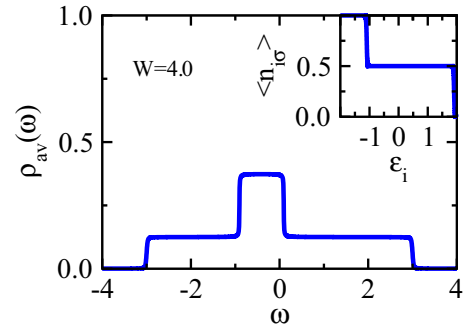


FIG. 3. Average DOS $\rho_{\text{av}}(\omega)$ as a function of frequency for $W = 4$ and $\delta = 0.2$, that is, for parameters inside the AMI-0 region of the phase diagram. Inset: occupation number per site and per spin as a function of the on-site energy. $U = 3$ and $T = 0.01$.

The average DOS follows the bare distribution of ϵ_i , and it is simply given, in the low-temperature limit and for $W > U$, by the superposition of two rectangles. In this regime in fact, the DMFT-TMT theory reduces to the superposition of isolated impurities, as we explained in Sec. II [see Eqs. (5)–(7)], and an analytical expression can be derived.

The occupation per site and per spin as a function of on-site energy corresponding to the DOS in Fig. 3 is shown in the inset. Note that empty sites start to appear in addition to those which are doubly and singly occupied. We have analyzed other values of δ for $U = 3$, as well as results for $U = 1$ and $U = 2$, and concluded that the AMI-0 arises for all U , as presented in Fig. 1, arising directly from the metal for small U .

We shall now analyze how the AMI-0 region depends on doping δ and interaction U . As doping increases, carriers are added to the system, and more sites become doubly occupied in comparison with a smaller δ , as can be seen in Fig. 4(a). As a consequence, more disorder has to be added to the system [compare the results for $W = 4.0$ and $W = 4.75$ in Fig. 4(a) for $\delta = 0.3$] to empty some sites. The AMI-0 thus appears for larger values of disorder when the doping δ increases, as we observe in the phase diagrams of Fig. 1.

We now show in Fig. 4(b) the occupation per site and per spin for $W = 4$, $\delta = 0.4$, and the different values of U . Since single occupation is a characteristic of Mott insulators, the plateau at $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$ becomes larger as U increases. For the values of W and δ considered in Fig. 4(b), the empty sites present for $U = 1$ and $U = 2$ become occupied as we move to $U = 3$. Thus, empty sites “disappear” with either the increase of doping or correlations, and for large U , most of the disorder versus doping phase diagram corresponds to an AMI without empty sites, as we describe in detail in the following section.

IV. AMI PHASE RESULTS FOR $U = 3.0$

We shall now study the AMI without empty sites that appears by increasing interaction U , sandwiched between the AMI-0 and the metallic phase in a large part of the phase diagram. To this purpose, we consider the $U = 3$ case [Fig. 1(c)] and study the Anderson-Mott transition from the disordered metal by increasing the disorder strength W and various

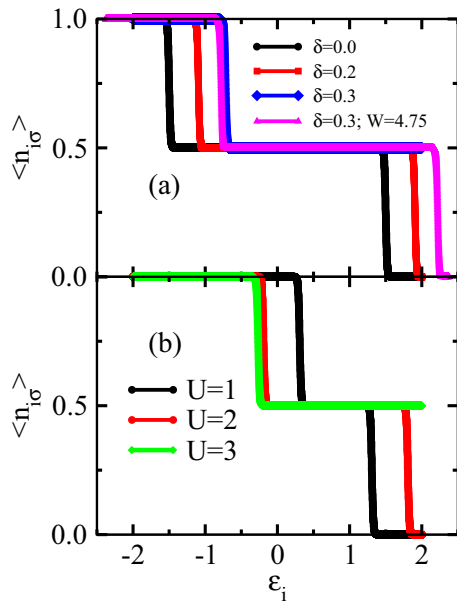


FIG. 4. (a) Site occupation per spin as a function of the on-site energy for different values of doping and $W = 4$, except for the magenta curve with triangles, for which $W = 4.75$. $U = 3$, and $T = 0.01$. (b) Site occupation per spin as a function of the on-site energy for different values of the electronic correlation. $W = 4$, $\delta = 0.4$, and $T = 0.01$.

dopings δ . We analyze in particular the behavior of typical and average DOSs.

A. Metal-insulator transitions

The DMFT-TMT results for $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ and $\rho_{\text{av}}(\omega)$ are shown, respectively, in Figs. 5(a) and 5(b) for fixed $\delta = 0.2$ and different values of disorder W . Since we have small doping,

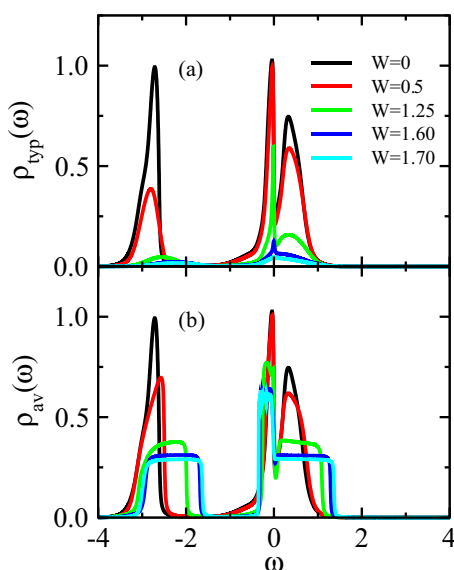


FIG. 5. (a) Typical and (b) average DOSs as a function of frequency for different values of disorder W and fixed doping $\delta = 0.2$. $U = 3$, and $T = 0.01$.

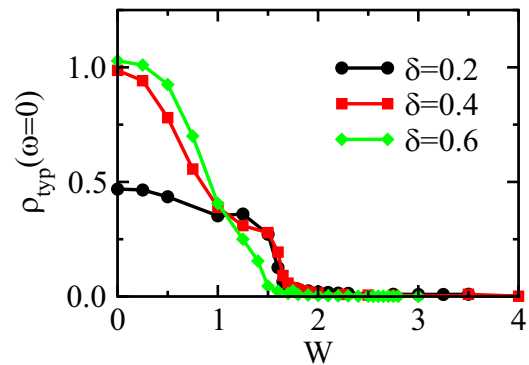


FIG. 6. Typical DOS at the Fermi level as a function of disorder for different values of doping. Results for $\delta = 0.2$ correspond to $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ in Fig. 5(a). $U = 3$, and $T = 0.01$.

the typical DOS presents a structure of three peaks: two Hubbard bands separated by an energy of the order of U and a quasiparticle-like peak at the Fermi level $\omega = 0$, as previously reported in the clean case [30]. According to our results, it holds for small disorder as well, characterizing the system as a correlated metal in this region of parameters.

As disorder W increases, Anderson localization starts to play a role: its effects can be seen by comparing the results for $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ [Fig. 5(a)] and $\rho_{\text{av}}(\omega)$ [Fig. 5(b)] since the former takes into account only extended states, while the latter includes both extended and localized states of the system. As W increases, states at the band edges localize [15], and we observe that the bands in the typical DOS become smaller. For even more disordered systems, $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ vanishes on the whole frequency axis, signaling that the system has gone through a disorder-driven MIT. We notice that disorder acts differently on different energy scales. In $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ Hubbard-like bands around larger values of energy shrink faster than the quasiparticle-like one close to the Fermi level. Notice that $\rho_{\text{av}}(\omega)$ remains instead finite at the Anderson-Mott transition. The general effect of disorder appears to be a spreading in energy of the spectral weight, both in the Hubbard bands and at the low-energy quasiparticle peak. This spreading is not symmetrical like at half filling (see the results in Appendix B) because of the combined effect of disorder and doping.

To determine the critical disorder W_c at which the MIT takes place, it is easier to track the typical DOS at the Fermi level as a function of disorder, as we display in Fig. 6 for different values of doping. This quantity plays the role of an order parameter for the disorder-induced MIT since it is different from zero in the metallic region ($W < W_c$) and is zero in the Anderson-Mott insulator ($W > W_c$). Based on the behavior of $\rho_{\text{typ}}(\omega = 0)$ as a function of disorder, we have determined the transition line between the metallic and AMI phases shown in Fig. 1 (red line with dots). Notice that for $\delta = 0.2$ the maximum of $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ is close to $\omega = 0$ but not exactly at $\omega = 0$ (in accordance with the results of Ref. [30]); this observation explains why $\rho_{\text{typ}}(\omega = 0) \approx 0.5$ for the clean system in Fig. 6, instead of the maximum value of ≈ 1 for $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ seen in Fig. 5(a).

A key observation is that there exists only a small dependence of W_c on doping δ . As mentioned in Sec. III and

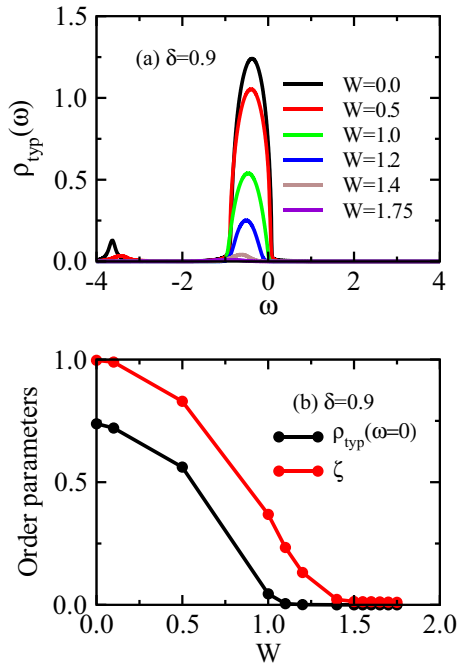


FIG. 7. (a) Typical DOS as a function of energy for different values of disorder W and fixed doping $\delta = 0.9$. (b) Typical DOS at the Fermi level and $\zeta = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\text{typ}}(\omega) d\omega$ as a function of disorder corresponding to the results in (a). $U = 3$, and $T = 0.01$.

observed in Fig. 5(a), the transition to the AMI takes place when all extended states of the system localize. For fixed $U = 3$ (look now at Fig. 2), the range in energy where $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ extends is roughly doping independent. If doping increases, we observe mainly a transfer of spectral weight from above the Fermi level to energies below it. This result might justify the fact that W_c is practically constant for small to moderate δ . A similar behavior is observed for $U = 1$, but not in the intermediate case of $U = 2$, as we discussed in Sec. III.

More interesting is the fact that W_c for the doped case is smaller than U , which is the critical disorder at which the transition from the Mott insulator to AMI-0 is seen at half filling (end of the orange line in Fig. 1). This means that the doped Mott insulator is more susceptible to disorder-induced localization, as we already mentioned in Sec. III. By introducing carriers into the system, in fact, a narrow band rises within the gap, as seen in our results in Fig. 5(a). By adding disorder to the doped system, this narrow band localizes at a disorder strength which is smaller than the one required to Anderson localize the Mott insulator, which requires that the wide Mott gap is filled due to disorder effects. (For details on how the transition is approached at half filling see Appendix B.) As mentioned in the previous section, a similar behavior is not observed for $U = 1$ and $U = 2$, probably because for these values of U the system is in a metallic state at half filling and the wide Mott gap is replaced by a wide band of itinerant states around the Fermi level that can Anderson localize only at higher disorder strengths.

For large doping ($0.75 < \delta < 1.0$), we observe a region within the Anderson-Mott insulator that, with abuse of language, we identify as a band AMI. Starting with the clean system, $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ shrinks as disorder increases, similar to

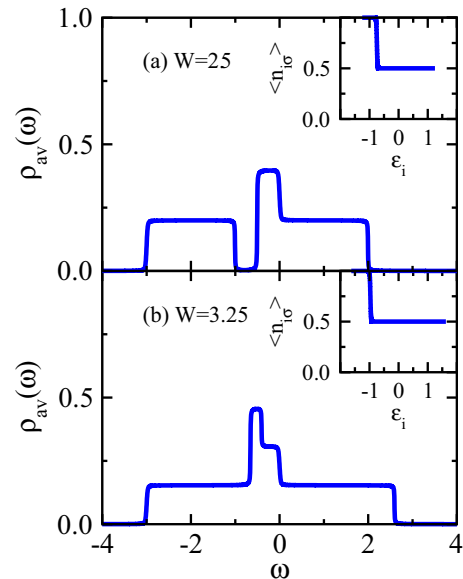


FIG. 8. Average DOS as a function of energy for $U = 3$ and (a) $W = 2.50$ and (b) $W = 3.25$. The insets show the occupation number per site and per spin as a function of the on-site energy for the same parameters of the results in the main panels. $\delta = 0.2$ and $T = 0.01$.

what happens for small doping. However, for large doping, $\rho_{\text{typ}}(\omega = 0)$ becomes zero for a value of disorder (W_c) smaller than that at which the whole band vanishes (W_{c2}). This means that, different from the low-doping case where the whole $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ vanishes, for $W_c < W < W_{c2}$ the system still has a band of extended states, which is located below the Fermi energy. This behavior is exemplified in Fig. 7 for the case of $\delta = 0.9$: Fig. 7(a) shows $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ for different values of disorder, while Fig. 7(b) presents both $\rho_{\text{typ}}(\omega = 0)$ and $\zeta = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\text{typ}}(\omega) d\omega$ as a function of W . As we can see, for this value of doping, the system enters the insulating phase [$\rho_{\text{typ}}(\omega = 0) = 0$] at $W_c \approx 1.1$, while all states are localized ($\zeta = 0$) only at $W_{c2} \approx 1.75$. This behavior of $\rho_{\text{typ}}(\omega = 0)$ at W_c is reminiscent of that of a band insulator, although the total spectral intensity $\rho_{\text{av}}(\omega = 0)$ remains in all cases finite at the Fermi level. Note that W_{c2} approximately coincides with the disorder at which the system enters the AMI region for $\delta < 0.6$, as expected if the vanishing of ζ mainly depends on the U value.

B. Character of the Anderson-Mott insulator

We want now to characterize the physical properties of the AMI region. To this purpose, we shall focus on the (arithmetic) average DOS $\rho_{\text{av}}(\omega)$ [defined in Eq. (5)], which can be directly connected to spectroscopic experiments. Figure 8 shows two examples of $\rho_{\text{av}}(\omega)$ for $\delta = 0.2$ and $U = 3$: one for which the disorder $W < U$ [Fig. 8(a)] and another for which $W > U$ [Fig. 8(b)]. In both cases the system is in the AMI region, where all states are localized. Since the typical DOS is zero, meaning that there is no bath for the impurities to hybridize, within our TMT approximation impurity sites are effectively in the atomic limit, and the DOS can be calculated with Eqs. (5)–(7) described in Sec. II. In this case, in the

absence of disorder ε_i the DOS of a single-impurity problem presents two Dirac δ peaks, one at $\omega = -U/2$ and another at $\omega = U/2$. As disorder ε_i is added, these peaks spread in energy following the flat uniform distribution of the disorder. If disorder is large enough, these rectangles overlap at small frequencies, giving rise to the form of the average DOS seen in Fig. 8.

By looking at the results in Fig. 8(a), for $W < U$, we observe that there is a well-defined gap at negative energies in $\rho_{av}(\omega)$. This profile for the DOS reminds us of that of the slightly doped Mott insulator. In the case of $W > U$ [Fig. 8(b)], on the contrary, a gap is not seen in $\rho_{av}(\omega)$ anymore. This reminds us of an Anderson insulator. In the insets, we show the corresponding occupation $\langle n_{i\sigma} \rangle$ per site and per spin as a function of the on-site energy ε_i . In both cases [27], there are sites that are doubly occupied ($\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$), as in an Anderson insulator, and sites that are singly occupied ($\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$), as in a Mott insulator (but no empty site as in the AMI-0 region). Since the two systems have characteristics of Anderson and Mott insulators, we identify both cases as AMI in the phase diagram of Fig. 1. However, we are tempted to say that in the case of Fig. 8(a) the role played by the Mott mechanism of localization is stronger than that of Anderson effects. Indeed, the correlation U is larger than disorder W , and a gap is observed in the average DOS. On the other hand, the Anderson mechanism may dominate over the Mott one in the case where disorder is larger than correlations [Fig. 8(b)]. In the phase diagram, the first case is observed whenever $W_c < W < U = 3$, while the second corresponds to $W > U = 3$. Similar behavior occurs for $U = 2$ and $\delta > 0.5$, for which there is a region where $W_c < U$.

We recall that at half filling ($\delta = 0$) the Mott-dominated region for $W < W_c \approx U$ presents only singly $\langle n_{i\sigma} \rangle = 0.5$ occupied sites, with double occupation $\langle n_{i\sigma} \rangle = 1$ being absent [20]. On the other hand, for $W > U$, there exist doubly and singly occupied sites, as well as empty ones, and the average DOS has no gap. The presence of this third kind of site—the empty ones—gives rise to the AMI-0 region, as we described in Sec. III A.

In the next section, we discuss how the doped system crosses over from the AMI region to the AMI-0 one.

C. Crossover to the AMI-0 region

Finally, it is useful to see the behavior of the chemical potential μ as a function of disorder for fixed doping, shown in Fig. 9, again for $U = 3$. In the metallic phase (for small values of W), the μ vs W curve is markedly horizontal. By entering the AMI, above $W \approx 1.75$, the μ vs W follows closely a linear law $\mu = (\delta - 0.5)W + U$. By further increasing disorder, the μ vs W curve displays once again a sharp change in slope when entering the AMI-0 that presents empty sites. For δ values in this AMI-0 region, μ always increases with W .

The linear μ vs W behavior in the AMI region allows us to establish an equation determining the disorder dependence of the line separating the AMI-0 and AMI regions. We take advantage again of the fact that within the DMFT-TMT method in the AMI region each impurity site is in the atomic limit (as described in Sec. II). In this case, the site is empty if its on-site energy $\varepsilon_d = \varepsilon_i - \mu > 0$ [Eq. (6)]. The value of the

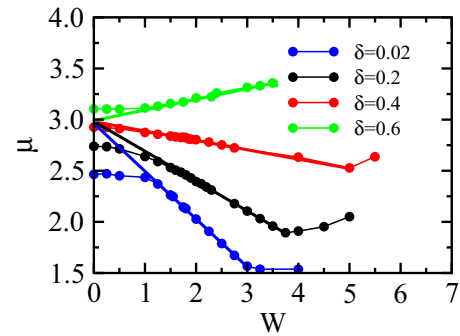


FIG. 9. Chemical potential μ obtained to keep the values of δ fixed as a function of disorder strength. Straight lines correspond to fittings of the numerical results in the range where a linear behavior is observed; note that the lines meet at the point $\mu = U = 3$, $U = 3$, and $T = 0.01$.

disorder where the first empty site forms must coincide with the highest possible value of on-site energy $\varepsilon_i = W/2$, i.e., $W/2 = \mu$. Plugging this value of μ into the μ vs W linear relation, which holds up to the crossover to the AMI-0 region, we obtain

$$W = \frac{U}{1 - \delta}. \quad (8)$$

Equation (8), which we display in Fig. 1 as a dashed gray line, well describes the crossover between the AMI and AMI-0 regions that we establish numerically (brown diamonds in Fig. 1).

V. CONCLUSION

In this work, we solved the Anderson-Hubbard model in the doped case by using a combination of dynamical mean-field theory and typical medium theory. The former describes the Mott transition, while the latter takes into account Anderson localization effects. We built the disorder versus doping phase diagram for three values of U : $U = 1$, $U = 2$, and $U = 3$, in units of the clean, noninteracting bandwidth. For any interaction, there is a region of the phase diagram where we observe an Anderson-Mott insulator similar to the one that exists at half filling, with the presence of empty sites in the system (AMI-0). As doping (and thus the number of carriers in the system) increases, the empty sites that exist at small doping become occupied, giving rise to a different Anderson-Mott insulator. When the electronic interaction becomes stronger, the AMI wedges between the metallic phase and the AMI-0, occupying a large part of the phase diagram in the strongly correlated regime for $U = 3$. This is a consequence of the fact that the disorder-driven MIT takes place for a much smaller disorder strength in the doped, strongly correlated regime than in the weakly correlated regime or at half filling. An intermediate behavior should appear in the intermediate-correlation regime, with the critical disorder W_c monotonically decreasing with doping, as portrayed in the phase diagram (Fig. 1) for $U = 2$.

Upon doping, the properties of the system are therefore strongly determined by the combined effect of disorder, interaction, and doping to form an insulator presenting at the same

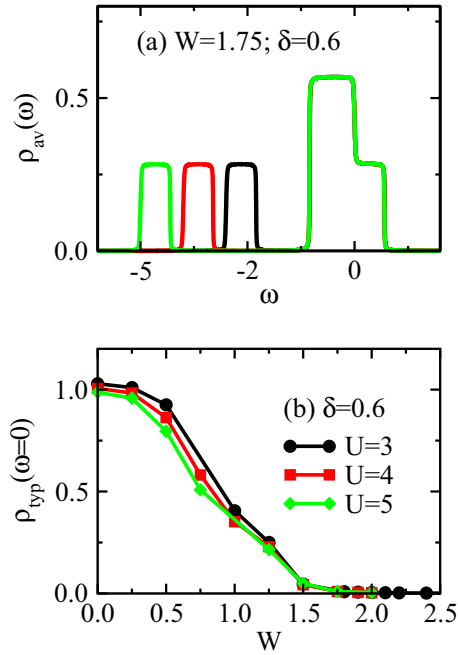


FIG. 10. Results for large values of the interaction, $U = 3$, $U = 4$, and $U = 5$. (a) Average DOS as a function of frequency when $W = 1.75$. (b) Typical DOS at the Fermi level as a function of W , showing that the order parameter goes to zero for the same value of W_c (for $U \geq 3$). $\delta = 0.6$, and $T = 0.01$.

time the Anderson and Mott-Hubbard features. The evolution of the phase diagram as a function of disorder and doping, which we presented in this work from the weak to strongly correlated regimes, should determine the universal properties of the disorder-driven MIT.

ACKNOWLEDGMENTS

We acknowledge E. Miranda and M. Rozenberg for discussions and J. Vučićević and D. Tanasković for the development of the iterated perturbation theory (IPT) single-impurity code used in our calculations. This work is supported by FAPEMIG, CNPq (in particular through INCT-IQ 465469/2014-0), and CAPES [in particular through programs CAPES-COFECUB-0899/2018 and CAPES-PrInt-UFMG (M.C.O.A.)]. M.C. acknowledges support from Agence Nationale de la Recherche (ANR) NEPTUN Grant No. ANR-19-CE30-0019-04.

APPENDIX A: SPECTRA AND METAL-INSULATOR TRANSITION AT STRONG $U > 3$

We shall show here that the results for the MIT that we established for the $U = 3$ case are qualitatively similar for

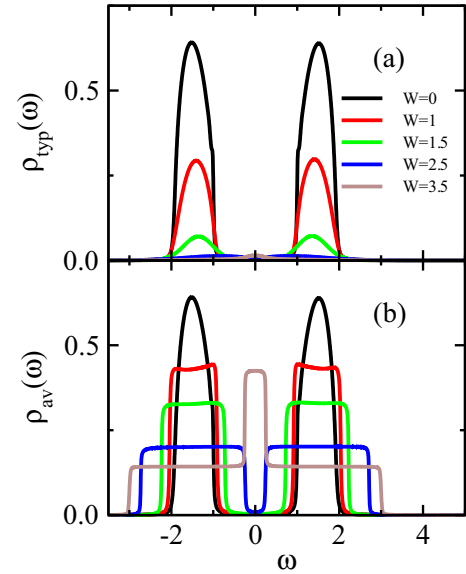


FIG. 11. (a) Typical and (b) average DOSs as a function of energy for different values of disorder W at half filling, $U = 3$, and $T = 0.01$.

larger interaction U . Interaction has the effect of changing the position of the DOS bands. In the presence of doping, only the low-energy band moves proportionally to the U value. A quasiparticlelike band remains around the Fermi level; its position does not change by increasing U to keep the doping δ fixed. In Fig. 10(a), where we display the average DOS $\rho_{av}(\omega)$, we can see an example of this behavior: increasing the interaction does not change the Fermi level band. This causes the value of W_c not to change, as can be seen in Fig. 10(b). This phenomenon occurs only when the bands are far apart (in the Mott regime $W < U$ of the doped AHM).

APPENDIX B: RESULTS FOR $U = 3$ AT HALF FILLING

The evolution of the typical and average DOSs as disorder increases for the case of $U = 3$ and no doping is presented in Fig. 11. The clean system has a Mott gap, which starts to become filled with localized states as disorder increases. The gap eventually closes, and the system becomes an Anderson-Mott insulator, as illustrated in Fig. 11 for $W = 3.5$. At half filling, the Anderson-Mott insulator always presents empty sites and thus corresponds to the AMI-0 defined in the main text. This behavior is different from the one presented in Fig. 5 for the doped case, where the clean system is a metal.

[1] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions* (Taylor and Francis, London, 1974).
 [2] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **281**, 401 (1964).

[3] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).
 [4] E. Dagotto, *Science* **309**, 257 (2005).

- [5] D. McWhan, A. Menth, J. Remeika, W. F. Brinkman, and T. Rice, *Phys. Rev. B* **7**, 1920 (1973).
- [6] P. Limelette, A. Georges, D. Jérôme, P. Wzietek, P. Metcalf, and J. Honig, *Science* **302**, 89 (2003).
- [7] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [8] P. A. Lee and T. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
- [9] E. Miranda and V. Dobrosavljević, *Rep. Prog. Phys.* **68**, 2337 (2005).
- [10] E. Abrahams, S. V. Kravchenko, and M. P. Sarachik, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 251 (2001).
- [11] S. V. Kravchenko and M. P. Sarachik, in *50 Years of Anderson Localization*, edited by E. Abrahams (World Scientific, Singapore, 2010), Chap. 17, pp. 361–384.
- [12] E. Lahoud, O. N. Meetei, K. B. Chaska, A. Kanigel, and N. Trivedi, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 206402 (2014).
- [13] Z. Wang, Y. Okada, J. O'Neal, W. Zhou, D. Walkup, C. Dhital, T. Hogan, P. Clancy, Y.-J. Kim, Y. Hu *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **115**, 11198 (2018).
- [14] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [15] J. M. Ziman, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, Cambridge, 1979).
- [16] V. Dobrosavljević, A. A. Pastor, and B. K. Nikolić, *Europhys. Lett.* **62**, 76 (2003).
- [17] S. Mahmoudian, S. Tang, and V. Dobrosavljević, *Phys. Rev. B* **92**, 144202 (2015).
- [18] A. Ostlin, Y. Zhang, H. Terletska, F. Beuiseau, V. Popescu, K. Byczuk, L. Vitos, M. Jarrell, D. Vollhardt, and L. Chioncel, *Phys. Rev. B* **101**, 014210 (2020).
- [19] K. Byczuk, W. Hofstetter, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 056404 (2005).
- [20] M. C. O. Aguiar, V. Dobrosavljević, E. Abrahams, and G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 156402 (2009).
- [21] K. Byczuk, W. Hofstetter, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 146403 (2009).
- [22] H. Bragança, M. C. O. Aguiar, J. Vučićević, D. Tanasković, and V. Dobrosavljević, *Phys. Rev. B* **92**, 125143 (2015).
- [23] J. Skolimowski, D. Vollhardt, and K. Byczuk, *Phys. Rev. B* **92**, 094202 (2015).
- [24] C. E. Ekuma, S.-X. Yang, H. Terletska, K.-M. Tam, N. S. Vidhyadhiraja, J. Moreno, and M. Jarrell, *Phys. Rev. B* **92**, 201114(R) (2015).
- [25] S. Sen, H. Terletska, J. Moreno, N. S. Vidhyadhiraja, and M. Jarrell, *Phys. Rev. B* **94**, 235104 (2016).
- [26] S. Sen, N. S. Vidhyadhiraja, and M. Jarrell, *Phys. Rev. B* **98**, 075112 (2018).
- [27] M. C. O. Aguiar, V. Dobrosavljević, E. Abrahams, and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **73**, 115117 (2006).
- [28] D. B. McWhan, T. M. Rice, and J. P. Remeika, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 1384 (1969).
- [29] D. B. McWhan, J. P. Remeika, T. M. Rice, W. F. Brinkman, J. P. Maita, and A. Menth, *Phys. Rev. Lett.* **27**, 941 (1971).
- [30] H. Kajueter and G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 131 (1996).
- [31] M. Potthoff, T. Wegner, and W. Nolting, *Phys. Rev. B* **55**, 16132 (1997).
- [32] T. Wegner, M. Potthoff, and W. Nolting, *Phys. Rev. B* **57**, 6211 (1998).
- [33] A. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).