

**Whittemberg da Silva Oliveira**

***TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE INDUZIDA POR  
DESORDEM E INTERAÇÃO  
ELÉTRON-ELÉTRON***

Belo Horizonte – MG

Março / 2010

**Whittemberg da Silva Oliveira**

***TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE INDUZIDA POR  
DESORDEM E INTERAÇÃO  
ELÉTRON-ELÉTRON***

Dissertação apresentada à UNIVERSIDADE  
FEDERAL DE MINAS GERAIS, como requi-  
sito parcial para a obtenção do grau de mestre  
em Física, sob orientação da Professora Maria  
Carolina de Oliveira Aguiar.

Belo Horizonte – MG

Março / 2010

Dissertação de conclusão de curso de mestrado em física sob o título “*Transição Metal-Isolante Induzida por Desordem e Interação Elétron-Elétron*”, defendida por Whittemberg da Silva Oliveira e aprovada em 15 de março de 2010, em Belo Horizonte, Minas Gerais, pela banca examinadora constituída pelos professores:

---

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Maria Carolina de Oliveira Aguiar  
Departamento de Física - UFMG  
Orientadora

---

Prof. Dr. Antônio Sérgio Teixeira Pires  
Departamento de Física - UFMG

---

Prof. Dr. Hans-Dieter Pfannes  
Departamento de Física - UFMG

---

Prof. Dr. José Rachid Mohallem  
Departamento de Física - UFMG  
Suplente

*“Nossa maior glória não está em nunca termos caído,  
mas de termos levantado depois de cada queda.”*

***Ralph Waldo Emerson***

# ***AGRADECIMENTOS***

A Deus.

Aos meus pais, pelo apoio incondicional.

À Prof<sup>ª</sup>. Maria Carolina de Oliveira Aguiar, por todo o conhecimento transmitido através das discussões sempre produtivas e pela paciência.

À CAPES pelo apoio financeiro.

Ao departamento de física da UFMG, pelo apoio e estrutura sempre acessíveis.

Aos demais professores que contribuíram para minha formação.

Aos meus colegas, pela amistosa convivência.

## **RESUMO**

Sistemas em que a energia de interação elétron-elétron é comparável à ou dominante sobre a energia cinética podem passar por uma transição metal-isolante. Na ausência de impurezas químicas (desordem), essa transição é chamada de transição de Mott, que pode ser descrita pelo modelo de transferência de carga. Esse modelo consiste de duas bandas, onde uma é larga o suficiente para desprezarmos as interações elétron-elétron, correspondendo aos elétrons de condução, e a outra é estreita o suficiente para que as interações elétron-elétron sejam fortes, correspondendo aos elétrons localizados ou tipo  $f$ . Além disso, no modelo de transferência de carga, a soma, por sítio, do número de ocupação dos elétrons de condução e do número de ocupação dos elétrons tipo  $f$  é igual a um. Dentro desse modelo, a proximidade com a fase isolante é obtida quando a energia dos elétrons tipo  $f$ ,  $E_f$ , diminui, transferindo carga para os estados tipo  $f$  e diminuindo a ocupação dos elétrons de condução. A transição de Mott ocorre quando o número de elétrons de condução por sítio se anula.

No caso de sistemas eletrônicos desordenados e não interagentes, uma transição metal-isolante também pode ocorrer, agora devido à desordem, que produz efeitos de localização de Anderson. Nosso interesse é o de estudar sistemas desordenados correlacionados, onde uma combinação ou competição dos efeitos da interação elétron-elétron e da desordem podem levar os sistemas a uma transição metal-isolante. Além disso, nesses sistemas observamos na fase metálica uma fase eletrônica de Griffiths com comportamento não líquido de Fermi. Esse comportamento não líquido de Fermi aparece para valores intermediários de desordem, bem antes da transição e corresponde à emergência da fase de Griffiths, em que há dois tipos de spins: os que se comportam como livres e os que formam um estado singleto com os elétrons de condução. Os spins que se comportam como livres dominam a resposta termodinâmica do sistema, dando origem ao comportamento não líquido de Fermi.

Neste trabalho, usamos uma combinação da teoria de campo médio dinâmico e da teoria do meio típico para resolver o modelo de transferência de carga desordenado e estudar a emergência da fase de Griffiths e a transição metal-isolante. A desordem é considerada na energia local dos elétrons de condução, que segue uma distribuição gaussiana de desvio padrão  $W$ . Analisamos tanto os resultados obtidos para diferentes valores de energia dos elétrons tipo  $f$ ,  $E_f$ , quando a desordem é mantida constante, quanto resultados obtidos para diferentes valores de desordem, quando  $E_f$  é mantido constante. Em ambos os casos o método é capaz de reproduzir tanto a transição metal-isolante quanto a fase de Griffiths. Para  $E_f/D = -1.3$  (onde  $D$  é a largura da banda dos elétrons de condução no caso limpo), observamos a fase de Griffiths surgir para desordem  $W/D \approx 0.3$ , deixando de existir muito antes da transição, que acontece para o valor de desordem  $W/D \approx 6.1$ . Para desordem fixa,  $W/D = 1.5$ , vemos o surgimento da fase de Griffiths a partir do valor  $E_f/D \approx -1.3$  e se mantendo até a transição ocorrer, para  $E_f/D \approx -3.1$ . Vale ressaltar que todos os resultados foram obtidos em temperatura nula.

# ABSTRACT

A metal-insulator transition takes place in systems for which the electron-electron interaction energy gets comparable or larger than the kinetic energy. In the absence of chemical impurities (disorder), this corresponds to the Mott transition, which can be described by the charge transfer model. This consists of a two band model: one band correspond to conduction electrons and the other to localized or  $f$ -electrons. The former is large, which makes the electron-electron relatively negligible, while the latter is narrow, meaning that electron-electron interaction is relatively strong. In the charge transfer model, the sum, per site, of the occupation number for conduction electrons and the occupation number for  $f$ -electrons is equal to one. The proximity to the insulating phase is obtained when the  $f$ -electron energy,  $E_f$  decreases, implying in the transfer of charge to the  $f$ -electron states and in the decrease of the occupation for conduction electrons. The Mott transition occurs when the number of conduction electrons per site becomes zero.

In the case of disordered non-interacting systems, a metal-insulator transition can also occur, due to disorder, which produces Anderson localization effects. Our interest is to study correlated disordered systems, where an interplay between electron-electron interaction and disorder effects drive can systems through a metal-insulator transition. Moreover, in the metallic phase of these systems, an electronic Griffiths phase with non-Fermi liquid behavior is observed. This non-Fermi liquid behavior appears for values of disorder smaller than that where the transition happens, and corresponds to the emergence of the Griffiths phase. In this phase two types of spins exist, those which behave as free spins and those that form a singlet state with conduction electrons. The former dominate the thermodynamic response of the system, giving rise to non-Fermi liquid behavior.

In this work, we use a combination of dynamical mean field theory and typical-medium theory to solve the disordered charge transfer model and to study the emergence of the Griffiths phase and the metal-insulator transition. Disorder is considered in the on-site energy for conduction electrons, which follows a gaussian distribution of standard deviation  $W$ . We analyze both the results obtained for different values of  $E_f$ , when disorder is kept constant, as well as the results obtained for different values of disorder, when  $E_f$  is kept constant. In both cases the method is able to describe the metal-insulator transition and the Griffiths phase. When  $E_f/D = -1.3$  (where  $D$  is the conduction electron bandwidth in the clear case), the Griffiths phase appears for disorder  $W/D \gtrsim 0.3$  but ceases to exist long before the transition, which happens for disorder  $W/D \approx 6.1$ . For fixed disorder,  $W/D = 1.5$ , the Griffiths phase emerges for  $E_f/D \approx -1.3$  and persists up to the transition, which occurs for  $E_f/D \approx -3.1$ . All results were obtained at zero temperature.

## ***LISTA DE FIGURAS***

1	Resultado experimental da condutividade em função da temperatura para o Si:B.	2
2	Resultado experimental para o Si:P,B. . . . .	3
3	Metais e isolantes na teoria de bandas. . . . .	9
4	Distinção entre estados estendidos e localizados em termos da função de onda de Bloch. . . . .	10
5	Largura de Banda. . . . .	11
6	Figura esquemática da transição de Mott. . . . .	12
7	Transição de Mott dentro da descrição da teoria de campo médio dinâmico para o modelo de Hubbard. . . . .	13
8	Pico de quase-partícula do $V_2O_3$ . . . . .	13
9	Figura esquemática da transição de Anderson. . . . .	14
10	Distribuição energética dos sítios na rede. . . . .	15
11	Figura da transição de Anderson para desordem maior que a largura da banda. . . . .	16
12	Isolantes de Anderson, Mott e Mott-Anderson. . . . .	16
13	Mapeamento produzido pela TCMD. . . . .	19
14	Fluxograma utilizado no cálculo numérico da TCMD. . . . .	23
15	Exemplo de uma rede de Bethe com $z = 3$ . . . . .	26
16	Interpretação física das grandezas $Z$ e $\tilde{\epsilon}_f$ num problema de uma impureza. . . . .	30
17	Exemplo de uma distribuição log-normal . . . . .	36
18	Susceptibilidade magnética em função da temperatura para o problema Kondo de uma única impureza (obtida exatamente usando o “Ansatz” de Bethe) [26]. . . . .	42
19	Distribuição de temperaturas Kondo obtidas dentro do modelo de desordem Kondo. . . . .	43

20	Distribuição de $T_K$ à medida que a desordem aumenta. . . . .	47
21	Resultados da TCMD estatística para as distribuições binária e uniforme da desordem. . . . .	48
22	Ilustração do isolante no modelo de transferência de carga . . . . .	51
23	Fluxograma utilizado no cálculo numérico da TCMD-TMT. . . . .	53
24	Densidade de estados simétrica. . . . .	56
25	Comparativo entre as funções de Green de entrada e saída no eixo real para o caso simétrico. . . . .	56
26	Comparativo entre as funções de Green de entrada e saída no eixo imaginário para o caso simétrico. . . . .	57
27	Densidade de estados assimétrica. . . . .	57
28	Comparação entre as funções de Green de entrada e de saída da subrotina da transformada de Hilbert para o caso da densidade de estados assimétrica dada na figura 27. . . . .	58
29	Gráfico comparativo da densidade de estados para diferentes valores de desordem e dois números de sítios bem distintos. . . . .	59
30	Densidade de estados no nível de Fermi em função da desordem. . . . .	60
31	Densidade de estados típica dos elétrons de condução para diferentes valores de desordem. . . . .	61
32	Ampliação do gráfico da densidade de estados típica dos elétrons de condução. . . . .	61
33	Gráfico comparativo entre as densidades de estados média e típica. . . . .	62
34	Gráfico de $Z$ vs $\epsilon$ obtido pela TCMD-TMT. . . . .	63
35	Gráfico dos valores típico e médio de $Z$ para diferentes valores de desordem obtidos com a TCMD e TCMD-TMT. . . . .	64
36	Gráfico da densidade de estados dos elétrons de condução no nível de Fermi em função das energias locais. . . . .	64
37	Distribuição de $Z$ para diferentes valores de desordem. . . . .	65
38	Linearização das caudas da distribuição de $Z$ para os valores de $W = 0.20, 0.30$ e $1.20$ . . . . .	66

39	Gráfico de $\alpha$ vs $W$ obtido tanto para os resultados da TCMD-TMT como da TCMD para identificação do início da fase de Griffiths. . . . .	67
40	Densidade de estados no nível de Fermi em função de $E_f$ . . . . .	67
41	Densidade de estados típica dos elétrons de condução para diferentes valores de $E_f$ . . . . .	68
42	Gráfico de $Z$ vs $\epsilon$ para diferentes valores de $E_f$ , obtido pela TCMD-TMT. . . . .	69
43	Gráfico dos valores típico e médio de $Z$ para diferentes valores de $E_f$ , obtidos com a TCMD e TCMD-TMT. . . . .	70
44	Gráfico da densidade de estados local no nível de Fermi em função das energias locais para a TMT-TCMD. . . . .	70
45	Gráfico da energia renormalizada em função das energias locais. . . . .	71
46	Distribuição de $Z$ para diferentes valores de $E_f$ . . . . .	72
47	Linearização das caudas da distribuição de $Z$ para os valores de $E_f = -1.26, -1.28$ e $-2.00$ . . . . .	72
48	Gráfico de $\alpha$ vs $E_f$ obtido com a TCMD-TMT e a TCMD para identificação do início da fase de Griffiths. . . . .	73

## ***LISTA DE TABELAS***

1	Principais transições metal-isolante. . . . .	8
2	Correspondências entre a teoria de campo médio de um sistema clássico e a teoria de campo médio dinâmico de um sistema quântico. . . . .	24
3	Exemplos de ligas desordenadas de férmions pesados que exibem comportamento NFL. . . . .	41

# *SUMÁRIO*

<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>1 Transição Metal-Isolante</b>	<b>7</b>
<b>2 Interação Elétron-Elétron</b>	<b>18</b>
2.1 Teoria de Campo Médio Dinâmico . . . . .	18
2.1.1 Campo Médio do Clássico ao Quântico . . . . .	18
2.2 Modelo da Rede de Anderson . . . . .	24
2.3 Bósons Escravos . . . . .	27
<b>3 Desordem</b>	<b>31</b>
3.1 Aproximação do Potencial Coerente . . . . .	31
3.2 Localização de Anderson . . . . .	34
3.3 Teoria do Meio Típico . . . . .	36
<b>4 Interação Elétron-Elétron e Desordem</b>	<b>40</b>
4.1 Comportamento Não-Líquido de Fermi . . . . .	40
4.2 Modelo Efetivo para a Fase Eletrônica de Griffiths . . . . .	44
<b>5 Resultados</b>	<b>50</b>
5.1 Modelo de Transferência de Carga . . . . .	50
5.2 Alterações do Código TCMD-TMT . . . . .	52
5.2.1 Eixo Real . . . . .	54
5.2.2 Eixo Imaginário . . . . .	54

<i>Sumário</i>	xi
5.3 Testes Realizados . . . . .	55
5.4 Resultados Obtidos . . . . .	58
5.4.1 Desordem Variável . . . . .	59
5.4.2 Fase de Griffiths . . . . .	65
5.4.3 Desordem Fixa . . . . .	67
5.4.4 Fase de Griffiths . . . . .	71
<b>Conclusão</b>	<b>74</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>77</b>

# INTRODUÇÃO

O estudo de sistemas fortemente correlacionados, ou seja, sistemas em que a energia de interação elétron-elétron é comparável a ou dominante sobre a energia cinética, surgiu por volta de 1960, motivado por resultados experimentais em amostras de óxidos de metais de transição, onde uma competição entre as energias cinética e de interação elétron-elétron está presente nas camadas tipo  $d$  ou  $f$  incompletas [1]. Nestes sistemas a variação do potencial de interação elétron-elétron pode levá-los a passar por uma transição metal-isolante, que na ausência de impurezas químicas, ou ausência de desordem, é conhecida como transição de Mott.

No caso oposto, de elétrons não interagentes na presença de desordem, também pode haver uma transição metal-isolante provocada pelo aumento da desordem, transição que é conhecida como transição de Anderson. A desordem “bagunça” o sistema, dando origem a estados localizados. O aumento da desordem provoca o aumento desse tipo de estado, tornando o sistema isolante quando todos os estados se tornam localizados, efeito este que é conhecido como localização de Anderson. Em sistemas que apresentam tanto interação elétron-elétron quanto desordem, o aumento tanto do potencial de interação quanto da desordem leva o sistema a uma transição metal-isolante. Quando aumentamos apenas um deles mantendo o outro fixo, o sistema também passa por uma transição metal-isolante, transição que apresenta uma fase isolante que se “parece mais” com a transição de Mott quando a desordem é mantida fixa; transição mais “próxima” à transição de Anderson é obtida quando o potencial de interação é mantido constante e variamos a desordem.

Alguns sistemas fortemente correlacionados e desordenados apresentam uma fase com comportamento não líquido de Fermi, comportamento assim chamado por ser diferente do da teoria do líquido de Fermi de Landau, a qual afirma que a susceptibilidade magnética,  $\chi(T)$ , e o calor específico dividido pela temperatura,  $C(T)/T$ , tendem a valores constantes no limite em que  $T \rightarrow 0$ . No comportamento não líquido de Fermi essas mesmas grandezas divergem de forma logarítmica ou como lei de potência nesse mesmo limite. O aparecimento desse comportamento não líquido de Fermi em resultados experimentais de diversos trabalhos serviu de motivação para o estudo teórico dos mesmos.

Uma motivação para o nosso trabalho teórico é o estudo da condutividade em dez amostras

de Si:B: a figura 1, mostra a condutividade medida nessas amostras em função da temperatura, que varia entre 55 mK e 4.2 K. Nesta figura as diferentes curvas foram obtidas a partir de diferentes valores da concentração de boro. A seta do lado direito da figura indica o sentido de aumento da concentração  $n$ . Nessa figura observamos quatro curvas inferiores em que a condutividade diminui com a diminuição da temperatura, característica de um bom isolante, indicando que essas amostras se apresentam na fase isolante. As curvas restantes no gráfico apresentam comportamento diferente, quando a temperatura diminui a condutividade aumenta, característica de um bom metal, ou seja, essas amostras estão na fase metálica. Na região intermediária que separa as quatro curvas inferiores das demais superiores temos uma concentração crítica,  $n_c$ , que separa a região metálica da isolante. Assim, no caso de amostras com concentração menor que a crítica,  $n < n_c$ , o material é um isolante, e os valores com concentração maior que a concentração crítica,  $n > n_c$ , o material é um metal. Como podemos ver, experimentalmente a transição metal-isolante se dá com a variação da concentração das impurezas químicas, que nesse caso é o boro.

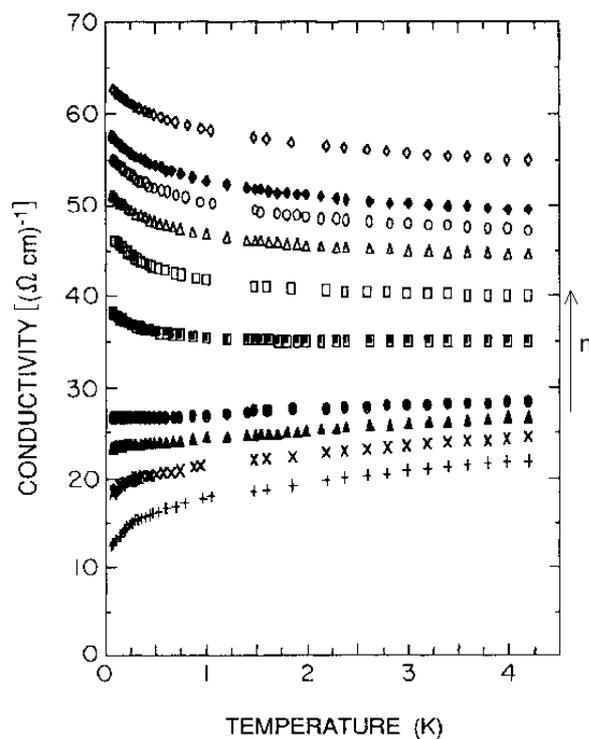


Figura 1: Condutividade em função da temperatura de dez amostras de Si:B. Em unidades de  $10^{18} \text{cm}^{-3}$ , suas concentrações de boro são as seguintes: +, 4.1; ×, 4.20; ▲, 4.30; ●, 4.38; ■, 4.57; □, 4.72; △, 4.86; ○, 4.95; ◆, 5.01; ◇, 5.22 [2].

Outro exemplo é o caso do estudo por ressonância de spin eletrônico do composto de silício dopado com fósforo, Si:P, compensado com boro B, próximo à transição metal-isolante [3]. Nesse trabalho são estudadas as propriedades de três compostos tipo  $n$  de Si:P,B próxi-

mos à transição metal-isolante, mostrando que há divergência da susceptibilidade  $\chi$  (relativa à  $\chi_{Pauli} = 3\mu_B^2/2k_B T_F$ ) no regime de baixas temperaturas, da ordem de 30mK. Nesse trabalho as propriedades magnéticas encontradas são similares na fase metálica e isolante, como podemos observar na susceptibilidade magnética mostrada no gráfico da figura 2 por exemplo. Assim como na figura 1, a distinção entre metal e isolante se dá através da concentração de impurezas, ou seja, para  $n/n_c = 0.58$  o material é um isolante e para os demais valores de  $n/n_c$  o material é um metal. Essa similaridade nas propriedades magnéticas nas fases metálica e isolante sugere que momentos magnéticos locais persistem dentro da fase metálica desordenada e dominam as propriedades termodinâmicas em baixa temperatura, o que seria responsável pelo comportamento não líquido de Fermi observado.

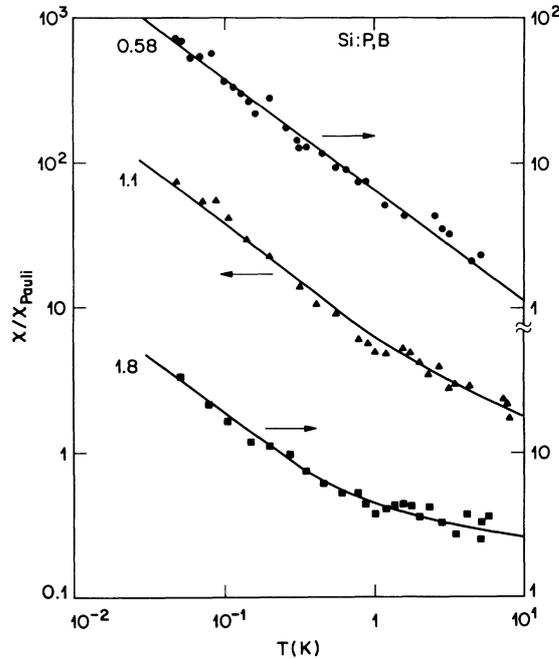


Figura 2: Dependência com a temperatura da susceptibilidade  $\chi/\chi_{Pauli}$  de três amostras de Si:P,B com diferentes densidades eletrônicas normalizadas,  $n/n_c = 0.58, 1.1, e 1.8$ . As linhas sólidas são guias para o observador [3].

A figura mostra como a susceptibilidade aumenta com a diminuição da temperatura aproximadamente como uma lei de potência  $\chi \propto T^{-\alpha}$ . Uma proporcionalidade exata entre a temperatura e a susceptibilidade é encontrada acidentalmente quando  $\alpha = 1/2$ . No artigo citado na legenda da figura 1 é sugerido o uso de cálculos computacionais para checar os méritos desse argumento [3]. Isso foi feito, por exemplo, no trabalho dos pesquisadores Milavanovic, Sachadev e Bhatt [4], que resolveram numericamente o modelo de Hubbard desordenado com centros dispostos aleatoriamente, e os resultados obtidos se mostraram de acordo com os resultados experimentais no Si:P,B. O estudo das ressonâncias do spin eletrônico de amostras de Si:P compensado com boro B próximo à transição metal-isolante suportam a abordagem do modelo

de spins localizados e elétrons itinerantes na fase metálica. Modelo, também chamado de modelo de dois fluidos, que se caracteriza por apresentar uma fração dos elétrons localizados pela localização de Mott e o restante dos elétrons localizados devido aos efeitos de localização de Anderson como discutido na referência [5]. A interação entre os dois fluidos leva ao espalhamento dos elétrons itinerantes, efeito causador do aparecimento do comportamento não líquido de Fermi na fase metálica, como o comportamento visto no caso do Si:P,B.

A abordagem teórica desses sistemas necessita de algumas aproximações, em decorrência de tratar de um problema de muitos corpos. A aproximação mais conhecida é feita no limite de dimensão infinita, mapeando o sistema de muitos corpos no problema de um corpo embebido por um banho autoconsistente do restante do sistema, ou seja, se pensarmos no sistema como um banho de elétrons dispostos sobre uma rede de muitos sítios em que cada sítio representa um átomo com um orbital livre ou ocupado, essa aproximação é feita através do mapeamento do problema da rede no problema de uma impureza localizada num dos sítios da rede e embebida por um banho efetivo que é determinado autoconsistentemente. Essa teoria é conhecida como teoria de campo médio dinâmico (TCMD) e é similar à teoria de campo médio de Weiss, para sistemas de spin.

Como os sistemas de nosso interesse são além de fortemente correlacionados também desordenados, então precisamos de uma teoria que descreva tanto a transição de Mott quanto a transição de Anderson. A TCMD não é capaz de descrever efeitos de localização de Anderson, em decorrência do cálculo do banho levar em consideração a média aritmética dos outros sítios da rede, eliminando com isso as flutuações locais, justamente as responsáveis pela transição de Anderson. Em decorrência disso combinamos a TCMD com outra teoria, a teoria do meio típico (TMT), onde uma supre a outra. A teoria do meio típico vem com uma proposta interessante para suprir essa deficiência, que é olhar para o valor típico da densidade de estados dos elétrons de condução, ou melhor o valor mais provável dessa grandeza, como uma medida da condutividade do sistema, e isso a faz capaz de descrever os efeitos de localização de Anderson e a correspondente transição de Anderson. Porém a proposta original da TMT, que trata apenas desordem, não é capaz de descrever a transição de Mott, que a TCMD descreve bem. Por isso, no início do parágrafo, quando se fala da conjunção das duas teorias é comentado que uma supre a outra na descrição das duas transições metal-isolante, transição de Mott e transição de Anderson.

O trabalho intitulado “Comportamento crítico na transição de Mott-Anderson: uma perspectiva da teoria do meio típico” [5] é a nossa principal motivação para esta dissertação. Nesse trabalho é apresentada uma análise detalhada do comportamento crítico próximo da transição

de Mott-Anderson, baseado na combinação de resultados numéricos e analíticos obtidos a partir da combinação da TCMD com a TMT, aplicada ao modelo de Hubbard desordenado. Nesse trabalho ficou evidente que a combinação das duas teorias TCMD e TMT é uma alternativa viável para se descrever a transição de Mott-Anderson. Um dos principais resultados deste trabalho foi o aparecimento de um comportamento de dois fluidos caracterizando a transição de Mott-Anderson para desordem forte, ou seja, na transição foi observado que uma fração dos elétrons se torna localizada por efeitos de localização de Mott, enquanto que o restante dos elétrons se localiza devido a efeitos de localização de Anderson. A transição se deu de forma descontínua. E essa descontinuidade, presente também em outros modelos, como o modelo de transferência de carga, serviu como motivação para nosso trabalho.

Nosso objetivo central é o de estudar a conjunção entre a interação elétron-elétron e a desordem, utilizando o modelo de transferência de carga, citado acima. Esse modelo é composto do modelo da rede de Anderson, que é caracterizado por dois tipos de elétrons, de condução ( $c$ ) e localizados ( $f$ ), suplementado pelo vínculo de que a soma do número de ocupação dos elétrons tipo  $c$  e  $f$  seja igual a 1. A interação elétron-elétron está presente nos elétrons tipo  $f$ , que são localizados. Um dos nossos objetivos é identificar os valores de desordem e da energia dos elétrons tipo  $f$ ,  $E_f$ , correspondentes ao início da fase de Griffiths e da transição metal-isolante, tanto quando mantemos a desordem fixa e variamos  $E_f$ , quanto quando mantemos  $E_f$  fixo e variamos a desordem.

Nesta dissertação estudamos métodos teóricos para sistemas correlacionados e desordenados. Para o melhor entendimento do conteúdo aqui apresentado, a presente dissertação está organizada em cinco capítulos, detalhados da seguinte maneira.

No capítulo 1 é apresentada uma discussão qualitativa de três tipos de transição metal-isolante, a partir da descrição qualitativa de três diferentes isolantes, o isolante de bandas, o isolante de Mott e o isolante de Anderson, bem como as principais diferenças entre os três tipos de transição e entre suas fases metálicas e isolantes.

No capítulo 2 é apresentada a teoria de campo médio dinâmico, sua essência e principais expressões a partir de uma comparação qualitativa com o caso clássico dado pela teoria de campo médio de Weiss. É apresentada a idéia principal da teoria, que é a de mapear o problema da rede no problema de uma impureza embebida num banho calculado autoconsistentemente, e as expressões da teoria de campo médio dinâmico quando aplicada ao modelo da rede de Anderson, no caso limpo, sem desordem.

No capítulo 3 é abordada a desordem, e os principais métodos para o tratamento de sistemas desordenados, bem como as principais consequências ao sistema devido à presença de

desordem.

No capítulo 4 é abordada a conjunção entre interação elétron-elétron e desordem no modelo da rede de Anderson, suas principais características, tais como o aparecimento de um comportamento não-líquido de Fermi numa fase denominada fase eletrônica de Griffiths, que aparece no sistema bem antes da transição metal-isolante. As principais equações apresentadas nos capítulos anteriores são adequadas ao caso correlacionado e desordenado, que é o principal interesse desta dissertação.

No capítulo 5 é apresentado o modelo de transferência de carga, a partir do modelo da rede de Anderson. Também são apresentadas as alterações realizadas no código da teoria de campo médio dinâmico para a combinação com a teoria do meio típico, incluindo os principais testes realizados para a confirmação de sua eficácia. Em seguida são discutidos os resultados obtidos neste trabalho.

Para finalizar, são apresentadas as conclusões gerais obtidas nesta dissertação.

# 1 TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE

Pela teoria de bandas, materiais com bandas completamente preenchidas ou completamente vazias são isolantes e materiais com banda parcialmente preenchida são metais. Porém existem alguns materiais que fogem a essa regra, visto que alguns compostos que, pela teoria, deveriam ser metálicos (isolantes) mostraram-se experimentalmente como isolantes (metais). Para alguns tipos de sistemas, isso se deve ao fato da teoria de bandas não considerar os efeitos da interação elétron-elétron e da desordem. No limite de elétrons não interagentes, na presença de desordem, o sistema pode passar por uma transição metal-isolante devido aos efeitos de localização de Anderson. Outro caso em que a teoria de bandas falha ocorre quando a energia de interação elétron-elétron é comparável à ou dominante sobre a energia cinética, em que o sistema pode sofrer outro tipo de transição metal-isolante, conhecida como transição de Mott. Um exemplo deste último tipo é a transição metal-isolante que ocorre em óxidos de metais de transição que possuem as camadas tipo *d* ou *f* incompletas. Neste capítulo, discutimos os três tipos de isolante e de transição metal-isolante.

Para introduzir algumas das principais idéias da transição metal-isolante, a tabela 1 mostra os três tipos de transições metal-isolante citados no parágrafo anterior. O primeiro tipo de transição é encontrada dentro da teoria de bandas para sólidos cristalinos.

O problema de elétrons num sólido é um problema de muitos corpos, seu Hamiltoniano contém não apenas o potencial que descreve a interação dos elétrons com os núcleos, mas também potenciais referentes às interações elétron-elétron. Uma maneira de resolver isso é usando a aproximação de elétron independente, onde as interações são representadas por um potencial efetivo  $V(\vec{r})$ . Esse potencial efetivo é espacialmente periódico,  $V(\vec{r}-a) = V(\vec{r})$ , onde *a* é a constante da rede, quando o cristal apresenta periodicidade espacial. As soluções da equação de Schrödinger  $H\psi_k = E_k\psi_k$  são funções de Bloch da forma  $\psi_k(\vec{r}) = e^{ik\vec{r}}u_k(\vec{r})$ , onde  $u_k(\vec{r})$  são funções espacialmente periódicas. Os números quânticos que caracterizam cada função de onda são  $k(-\pi/a < k < \pi/a)$ , e os autovalores das funções de onda são  $E_k$  ou  $E(k)$  [6].

O efeito de se colocar um grande número de átomos próximos num sólido pode ser compre-

Transição	Função de Onda		Energia Característica	Mudança na Transição M → I	Localização
	Lado Metálico	Lado Isolante			
Bloch	Estendida	Estendida	Largura de Banda $D$	Bandas parcialmente preenchidas ↓ Bandas completamente preenchidas ou vazias	—
Mott	Estendida	Localizada	Energia de Interação Elétron-Elétron $U \sim \left(\frac{e^2}{r_{ij}}\right)$	Localização Induzida pela Interação Elétron-Elétron	$U > D$
Anderson	Estendida	Localizada	Largura $W$ da Distribuição das energias aleatórias dos sítios	Localização Induzida por Desordem	$W > D$

Tabela 1: Principais transições metal-isolante. Tabela da referência [6].

endido se considerarmos primeiro dois átomos apenas e depois generalizarmos para  $n$  átomos. Vamos considerar o caso de dois átomos apenas, que estão inicialmente distantes um do outro. No sistema como um todo a parte espacial da autofunção dos elétrons é uma combinação das autofunções espaciais de cada átomo, que pode ser simétrica para uma troca de pares de coordenadas eletrônicas ou anti-simétrica. Quando os átomos estão bem afastados, os dois tipos distintos de autofunção possuem a mesma energia e, portanto, cada um dos níveis de energia é duplamente degenerado. Mas, quando os átomos são aproximados, essa degenerescência é quebrada. Como a densidade de carga eletrônica na região entre os átomos depende da autofunção espacial ser simétrica ou anti-simétrica, quando os átomos estão muito próximos, as autofunções se sobrepõem e a energia do sistema dependerá da simetria da autofunção espacial resultante dessa sobreposição. Consequentemente, quando começa a haver superposição, cada nível de energia é desdobrado em dois níveis distintos energeticamente e a separação entre esses níveis aumenta à medida que a distância entre os átomos diminui [7].

Se um número maior de átomos está disposto com átomos bem próximos entre si, a quantidade de níveis de energia também aumenta. Logo, se considerarmos agora um sólido contendo algo como  $10^{23}$  átomos/mol em que a distância entre os átomos é da ordem de alguns angstroms, veremos que os níveis estarão tão próximos que, na verdade, constituirão praticamente

uma banda contínua de energia, cuja largura é representada por  $D$  na figura 5.

A condição ideal para diferenciar metais de isolantes seria no regime de temperatura nula, onde todos os estados com energia menor que a energia de Fermi  $E_F$  estão ocupados, enquanto todos os estados com energia maior que  $E_F$  estão vazios. Num metal, a estrutura de banda e o número de elétrons faz com que  $E_F$  fique dentro de uma banda, tornando-a parcialmente preenchida. Já no isolante,  $E_F$  fica entre bandas e existe um gap separando a banda completamente preenchida (banda de valência) da banda vazia (banda de condução) [6].

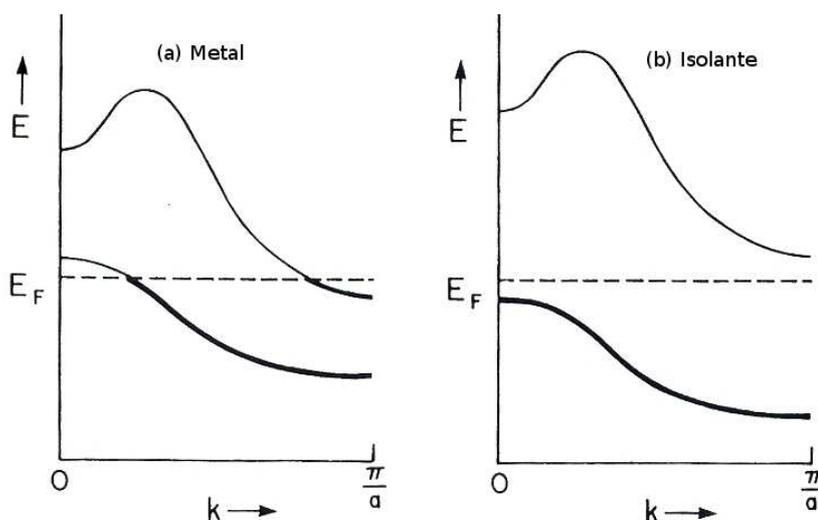


Figura 3: Dentro da teoria de bandas para os elétrons em cristais, uma transição metal-isolante pode ocorrer através de uma mudança na estrutura das bandas que remove a superposição entre as bandas preenchidas e vazias [6].

O tipo de transição metal-isolante da teoria de bandas é ilustrada na figura 3. Um material cristalino, composto de átomos com um número par de elétrons suficiente para popular um número inteiro de bandas, possui banda parcialmente preenchida no caso do gráfico à esquerda da figura 3, e portanto é um metal. Para o caso do gráfico à direita da figura 3, o nível de Fermi, linha pontilhada, encontra-se no gap entre as bandas, produzindo bandas completamente cheias abaixo dele e completamente vazias acima dele, o que caracteriza um isolante. Uma transição entre os casos apresentados nos dois gráficos da figura 3 pode ocorrer devido a algum agente externo, como uma variação de temperatura, pressão ou aplicação de um campo elétrico, etc. Um comportamento parecido é visto na transição metal-isolante do Ytérbio, na qual a variação de pressão produz uma configuração intermediária, entre as estruturas de banda ilustradas na figura 3.

Na primeira linha da tabela 1, os dois lados (metálico e isolante) da transição de Bloch correspondem a estados estendidos. A função de onda nesse caso tem amplitude apreciável sobre todo o sólido. Em cristais, estas funções são as funções de Bloch e têm a forma esboçada

na figura 4a. Para a função de Bloch particular mostrada na figura 4a,  $k$  é aproximadamente  $0.3(\pi/a)$  [6]. O caso oposto, de uma função localizada, é mostrado na figura 4b. A função de onda é concentrada próxima a um centro composto de apenas uns poucos átomos, e a amplitude da função de onda é significativa nessa região. Portanto essa pequena região contém essencialmente toda a probabilidade  $\int |\psi|^2 dr$ . Esse comportamento é esquematicamente mostrado pela linha pontilhada do pacote de onda da figura 4b, que decai com  $e^{-\alpha R}$  a longas distâncias  $R$  a partir do centro de localização. A quantidade  $\alpha$  é conhecida como o inverso do comprimento de localização. A linha sólida na figura representa a parte real (ou parte imaginária) de  $\psi$ , enquanto a linha pontilhada indica o pacote de onda plana correspondendo ao autovalor  $k$ , como especificado na tabela 1. Funções de onda localizadas aparecem no lado isolante da transição de Mott e da transição de Anderson que serão discutidas mais adiante.

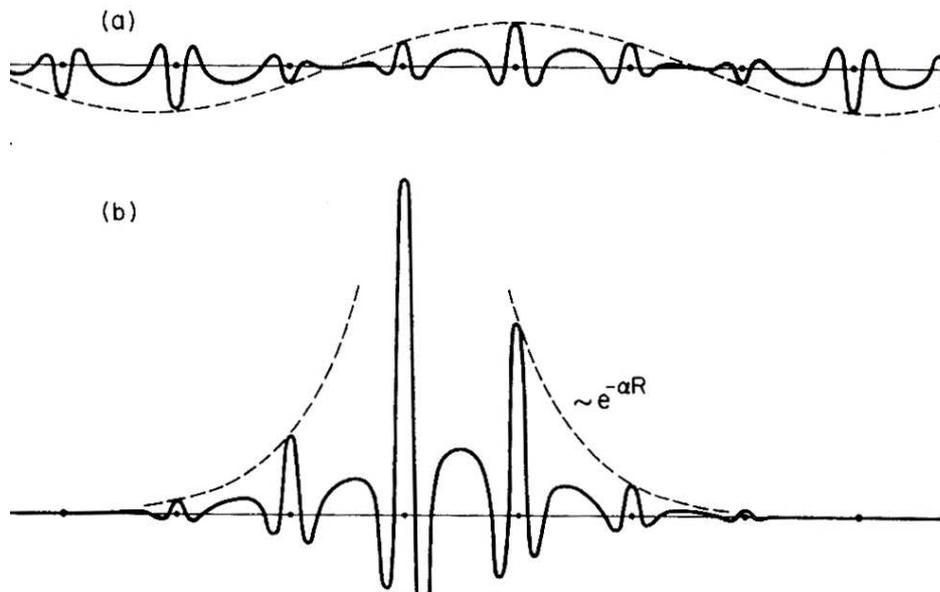


Figura 4: A distinção entre estados estendidos e localizados dos elétrons. Uma função de onda tipo Bloch é ilustrada em *a* e uma função de onda do estado localizado é ilustrada em *b* [6].

Um dos regimes em que a teoria de um elétron ou partícula independente falha em sólidos cristalinos é quando a energia de interação elétron-elétron é comparável à ou dominante sobre a energia cinética, o que pode levar o sistema à transição de Mott. A teoria de bandas não contempla a possibilidade das correlações entre os elétrons, também chamada de energia de interação elétron-elétron, produzirem num sólido um estado fundamental isolante, pois na teoria de bandas não considera que a energia de interação elétron-elétron seja comparável à ou dominante sobre a energia cinética. Um material com este estado fundamental isolante na teoria de bandas é predito como um metal. Tal sólido (por exemplo o  $\text{NiS}_2$ ) é chamado isolante de Mott, e a condição necessária para isso ocorrer é mostrada nas figuras 5 e 6 [6].

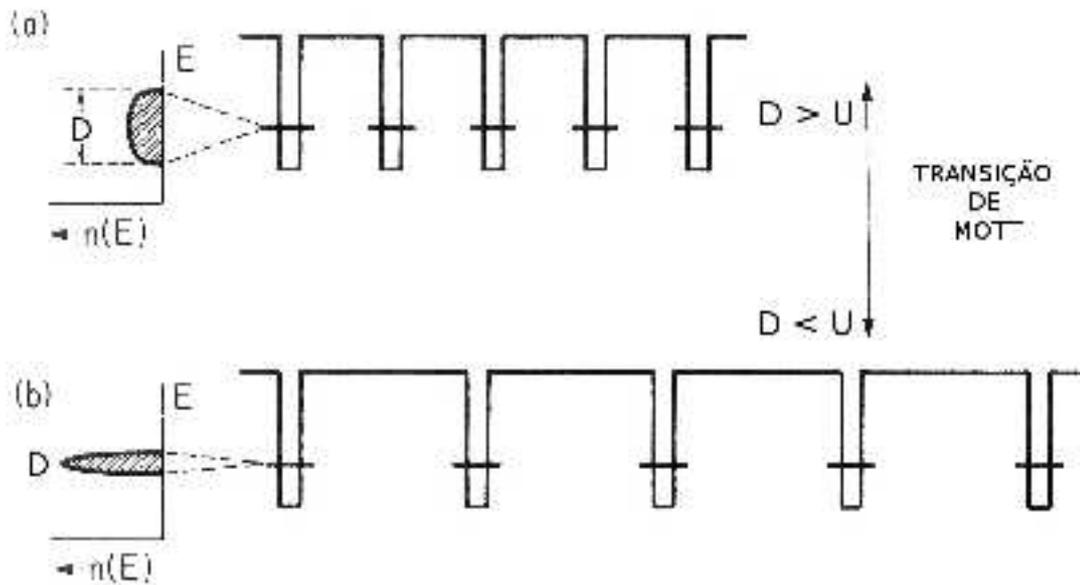


Figura 5: Figura esquemática da largura de banda. Quando os átomos são afastados a largura de banda diminui e a interação elétron-elétron ganha força [6].

Na figura 5, os átomos são representados por poços de potenciais ocupados com um elétron de valência cada. Quando os átomos são aproximados os níveis de energia se desdobram dando origem à largura de banda  $D$ , como esboçado à esquerda. Tomando como referência os níveis de energia dos átomos livres, a banda de energia de um cristal desse tipo se estende aproximadamente de  $-D/2$  a  $D/2$ . Se a banda estiver apenas semipreenchida, a energia média de um elétron de valência no cristal é aproximadamente  $-D/4$ , o que é inferior à energia dos elétrons livres, e é responsável pela coesão metálica. A largura de banda  $D$  é alterada mediante a variação da distância entre os átomos  $a$ , anulando-se no limite atômico ( $a \rightarrow \infty$ ).

Na figura 5b uma simples linha horizontal em cada poço representa o nível de energia dos elétrons de valência dos átomos isolados. Esses níveis de energia são duplamente degenerados, acomodando dois elétrons de spins opostos. Um mesmo nível pode ser ocupado por zero, um ou dois elétrons de spins opostos. Porém, nesse ponto de vista a interação de Coulomb, proporcional à  $e^2/r$ , onde  $e$  é a carga elementar e  $r$  é a distância entre os dois elétrons, é desprezada. Quando há dois elétrons no mesmo sítio, sabemos que a interação é repulsiva e que ela elevará a energia do nível atômico. O custo energético da dupla ocupação num átomo com um par de elétrons de valência, com mesma energia de Coulomb média ( $e^2/r$ ), quando ambos os elétrons estão em orbitais do mesmo sítio atômico, é denotado pelo símbolo  $U$ . Na figura 6, cada sítio é associado a dois níveis de energia. O nível inferior corresponde ao nível usado nas figuras 5a e 5b que é reservado ao primeiro elétron. O nível superior, que realmente existe apenas quando o nível inferior é preenchido, é elevado pelo fator  $U$  devido à repulsão coulombiana. Assim o

sistema da figura 6 é um isolante de Mott, pois é preciso vencer uma  $\text{gap} \sim U$  para ir para o primeiro estado excitado, como ilustrado na figura 6b.

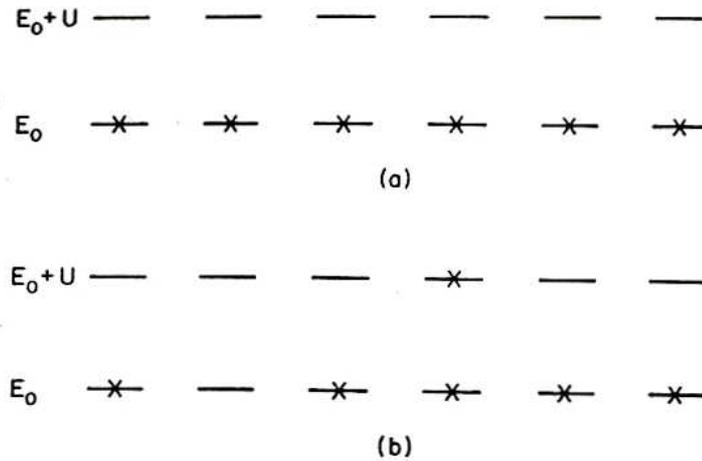


Figura 6: Diagrama dos níveis de energia para alguns sítios, no limite em que não há sobreposição entre os sítios vizinhos. (a) Estado fundamental. (b) Um primeiro estado excitado [8].

A condição para a ocorrência de um isolante de Mott é que a energia do potencial coulombiano seja maior que a largura de banda  $D$ . Quando essa condição é satisfeita, os elétrons se localizam, numa localização que é induzida pela interação elétron-elétron. Diferentemente da transição metal-isolante de Bloch (que possui estados estendidos em ambas as fases, metálica e isolante), a transição de Mott apresenta estados estendidos apenas na fase metálica, caracterizando-se por uma transição do tipo delocalização-localização para os estados eletrônicos. Ela acontece quando uma alteração na separação interatômica provoca uma mudança relativa das duas energias características do sistema (a largura de banda  $D$  e a energia de interação elétron-elétron  $U$ ), como mostrado na figura 5 [6].

Um dos modelos mais utilizados na descrição da transição de Mott é o modelo de Hubbard, cujo Hamiltoniano é constituído apenas de um termo referente à energia cinética e outro referente à energia de interação elétron-elétron. Em decorrência disso, a competição entre energia cinética e interação elétron-elétron é bem evidente nele, em decorrência dele apresentar apenas esses dois termos. Ele é capaz de descrever toda a transição, como mostrado na figura 7, que evolui desde um estado metálico, na faixa superior da figura 7, até o isolante de Mott, ilustrado na faixa inferior da figura 7. A transição é mostrada para o modelo de Hubbard numa rede de Bethe, que possui densidade de estados semicircular, no contexto da teoria de campo médio dinâmico, que será discutida no próximo capítulo.

O trabalho intitulado “Pico de quase-partícula proeminente do espectro de fotoemissão na fase metálica do  $V_2O_3$ ” apresenta a primeira observação experimental de um pico de quase-

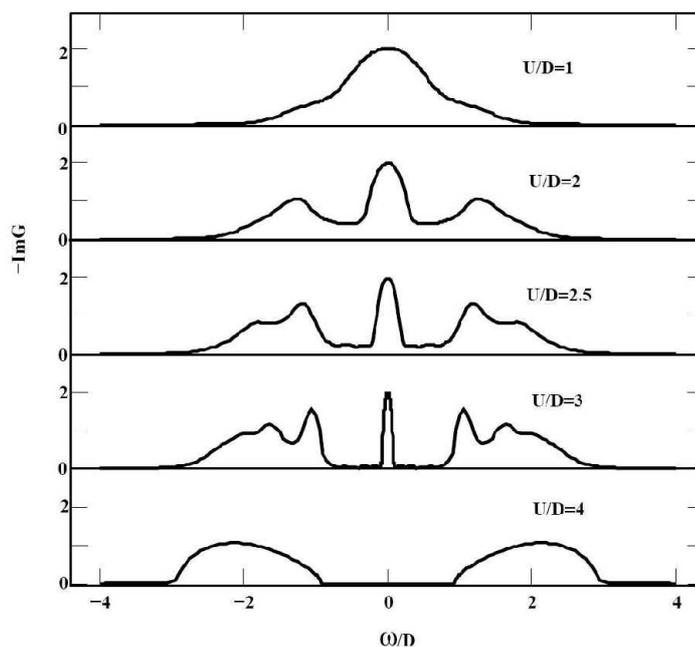


Figura 7: Gráfico da transição de Mott dentro da teoria de campo médio dinâmico para o modelo de Hubbard com densidade de estados semicircular semipreenchida numa rede de Bethe [9].

partícula na fase metálica do  $V_2O_3$ . A figura 8 mostra o espectro de fotoemissão no nível  $3d$  do vanádio para valores de energia,  $h\nu$ , a partir de  $60eV$  a  $700eV$ . Na região inferior a  $-1eV$ , o pico de  $E_F$  cresce monotonicamente com o aumento de  $h\nu$ . O pico da curva correspondente à média do momento,  $k$ , nunca é maior que a curva de  $500eV$ . Esse pico de quase-partícula que é mostrado na figura 8 é o mesmo pico central visto na figura 7, que no caso teórico é bem descrito pela teoria de campo médio dinâmico [10].

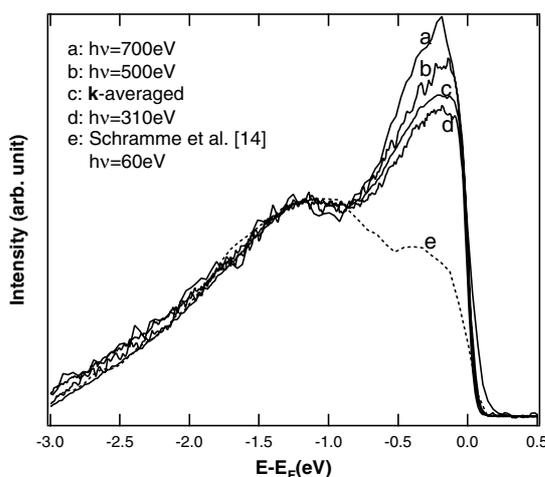


Figura 8: Espectro de fotoemissão do  $V_2O_3$  na fase metálica para vários valores de  $h\nu$  [10].

O tipo de transição metal-isolante listada na última linha da tabela 1 é a transição de Ander-

son. Nesse tipo de transição o lado isolante corresponde não a uma banda totalmente preenchida de estados delocalizados, mas na verdade a estados localizados. Num formato similar ao usado na figura 5 para a transição de Mott, uma ilustração da transição de Anderson é mostrada na figura 9. Diferente do caso da transição de Mott, a transição de Anderson não apresenta formação do gap. A transição delocalização  $\rightarrow$  localização na figura 9 ocorre devido à desordem “bagunçar” os níveis de energia dos sítios atômicos, como mostrado na figura 9 através da alteração das profundidades dos poços na figura 9b, em comparação com a figura 9a, favorecendo assim a localização dos estados eletrônicos.

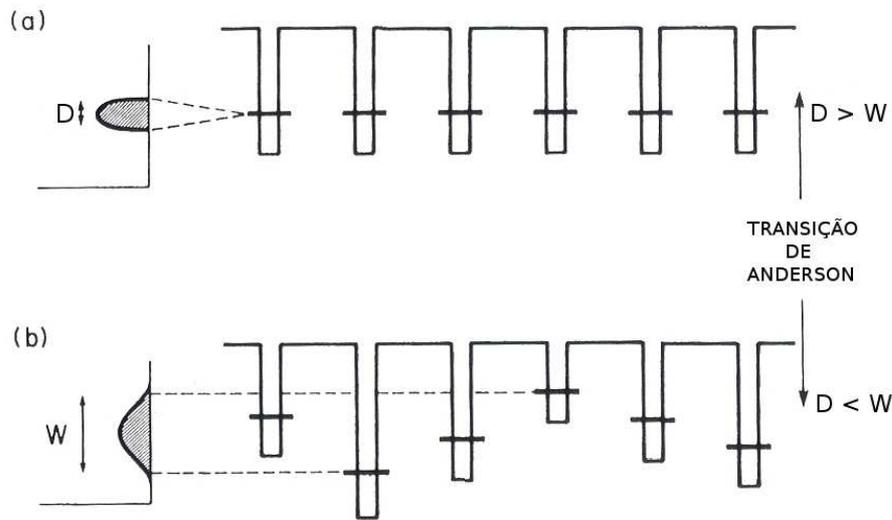


Figura 9: Figura da transição de Anderson. Quando a largura  $W$  da desordem excede a largura de banda  $D$ , a localização é induzida por desordem [6].

Na figura 9, os poços de potencial representando os sítios atômicos não possuem todos a mesma profundidade. Na verdade, a profundidade dos poços varia de sítio para sítio de forma aleatória. Tais potenciais apresentados estão desordenados. Em vez de poços com a mesma profundidade (e mesmos níveis no estado fundamental) como no caso cristalino da figura 9a, existe uma distribuição de profundidades de poços (e níveis correspondentes) como no caso esquematizado na figura 9b, onde  $W$  é a largura da distribuição das energias dos sítios atômicos, como, por exemplo, uma distribuição uniforme indo de  $-W/2$  a  $W/2$ .

A competição entre as energias, cinética e de interação elétron-elétron é modificada com a adição de desordem ao sistema. A desordem altera os estados eletrônicos por um fator de  $W/D$ , onde  $D$  é a largura de banda do cristal na ausência de desordem. A idéia principal dos efeitos da desordem no sistema foi matematicamente demonstrada por Anderson em seu famoso artigo intitulado “Ausência de Difusão em certas redes aleatórias” [11]. Anderson mostrou que, quando o parâmetro de desordem  $W/D$  é suficientemente grande todos os estados na banda de

valência se tornam localizados. Por isso ela é listada na tabela 1 como localização induzida por desordem [6].

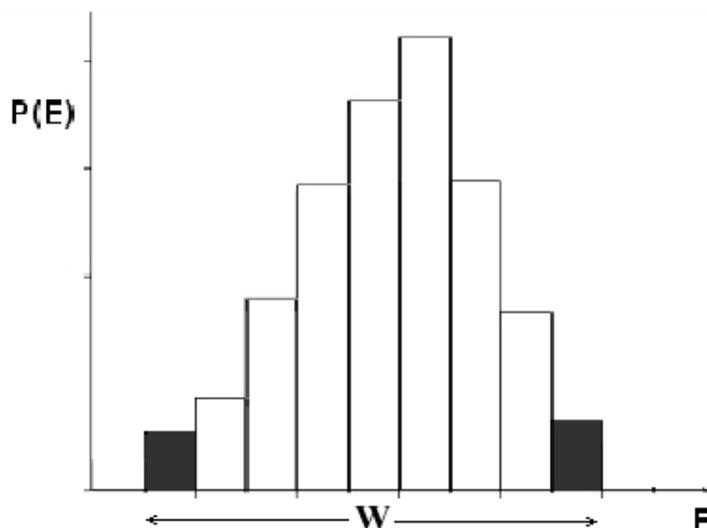


Figura 10: Figura ilustrativa da distribuição energética de sítios numa rede devido à desordem [12].

Os estados nas bordas da distribuição da figura 9b são mais susceptíveis à localização do que os estados no centro da distribuição, o que pode ser entendido de várias maneiras. Uma delas é atentar para o transporte quântico sobre os sítios desordenados. Se pensarmos numa rede em que os sítios estão com diferentes níveis energéticos distribuídos conforme a figura 10, um elétron pode mover-se com relativa facilidade entre os sítios vizinhos, de um sítio à outro, apenas se a diferença entre os níveis de energia dos dois sítios for  $\ll t$ , onde  $t$  é a amplitude de “hopping” de sítio para sítio, proporcional à largura da banda  $D$ . Isso é válido no limite em  $t \ll W$ , ao tratarmos o “hopping” como uma perturbação, caso que será descrito com mais detalhes no capítulo 3. Quando o elétron encontra-se no centro da distribuição, como ilustrado na figura 10, há maior probabilidade de um sítio vizinho satisfazer a condição acima do que no caso em que o elétron se encontra na borda da distribuição, regiões cinzas da figura 10. Portanto os elétrons da borda da distribuição energética se localizam primeiro do que os que estão no centro, onde a localização ocorre da borda para o centro até que todos se tornem localizados na transição. Essa é a razão porque muita desordem gera localização dos elétrons nas extremidades da densidade de estados e de chamarmos essa borda de borda de mobilidade, como mostrado na figura 11.

Na existência de desordem menor que a desordem crítica, os estados da borda da banda começam a se localizar, enquanto no meio de cada banda os estados estão estendidos. Com o aumento da desordem, a região de estados estendidos começa a diminuir, devido ao avanço da localização pelas bordas, até a desordem atingir o valor crítico e a transição ocorrer. A

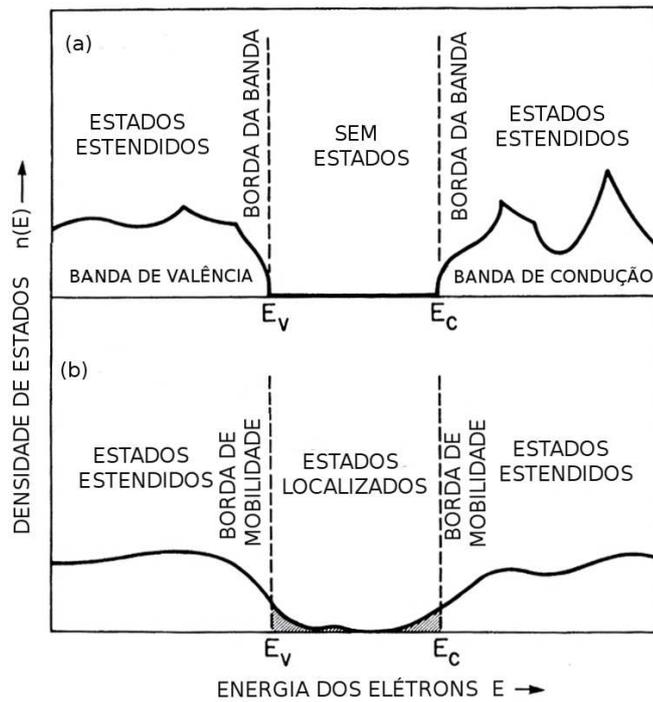


Figura 11: Figura da transição de Anderson. Quando a desordem  $W$  está presente no sistema a localização se inicia pelas bordas que se movem em direção ao centro da banda à medida que a desordem aumenta. [6].

distinção entre localizados e estendidos refere-se à diferença essencial ilustrada na figura 4. Na figura 11b, as demarcações das energias separando as regiões de estados localizados das de estados estendidos representam as bordas de mobilidade. Assim, a transição de Anderson é uma transição do tipo delocalização  $\leftrightarrow$  localização pois ocorre a localização de todos os estados.

O tipo de transição metal-isolante que levaremos em consideração é na verdade a conjunção dos dois últimos tipos de transição, ilustrados nas duas últimas linhas da tabela 1 e discutidos anteriormente. A figura 12 ilustra um tipo de isolante para o modelo de Hubbard, que é similar ao que daremos atenção nesta dissertação.

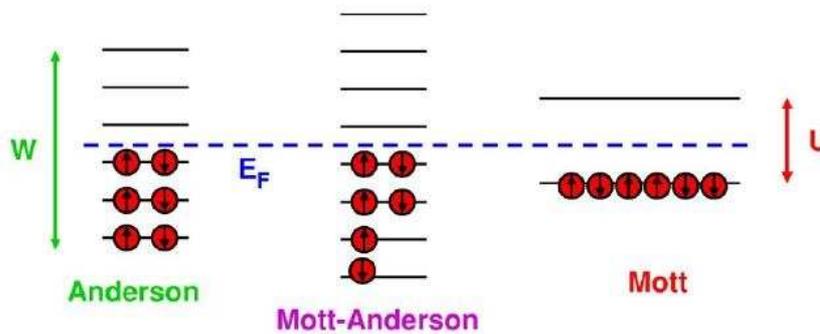


Figura 12: Ilustração no limite localizado dos isolantes de Anderson (esquerda), Mott (direita) e Mott-Anderson (centro) para o modelo de Hubbard. O potencial químico é representado pela linha pontilhada [13].

No isolante de Mott-Anderson, mostrado no centro da figura 12, a desordem  $W$  é comparável à repulsão coulombiana  $U$ , e um comportamento de dois fluidos emerge. Aqui, uma fração dos sítios encontra-se duplamente ocupada, como no isolante de Anderson, representado no lado esquerdo da figura 12. Esses sítios coexistem com outros que permanecem com ocupação simples, formando momentos magnéticos locais, como no isolante de Mott, ilustrado à direita da figura 12. Nota-se que os spins dos momentos locais são orientados aleatoriamente, indicando ausência de ordenamento magnético.

Nos capítulos posteriores discutiremos como essas transições metal-isolantes podem ser descritas teoricamente.

## 2 *INTERAÇÃO ELÉTRON-ELÉTRON*

### 2.1 Teoria de Campo Médio Dinâmico

Tratar sistemas fortemente correlacionados é um problema teórico notoriamente difícil. Por mais simples que seja o modelo, a obtenção das propriedades físicas do sistema não é uma tarefa fácil. Uma larga variedade de métodos analíticos e técnicas numéricas tem sido desenvolvidas para tratar sistemas eletrônicos fortemente correlacionados. O desenvolvimento de técnicas quantitativas é essencial para o entendimento e resolução de algumas questões-chaves de problemas em aberto, ou parcialmente entendidos atualmente.

Nesse capítulo, explicaremos os princípios básicos da teoria de campo médio dinâmico (TCMD), a partir de uma comparação com a conhecida teoria de campo médio de Weiss. A TCMD foi desenvolvida em 1989 com o trabalho de W. Metzner e D. Volhardt [14] e tem contribuído com avanços significativos em nosso entendimento de correlações fortes. No nosso problema ela é aplicada ao modelo da rede Anderson, mapeando a rede de Anderson num problema de uma impureza, como será explicado nas próximas seções.

#### 2.1.1 Campo Médio do Clássico ao Quântico

A teoria de campo médio mapeia o problema de uma rede com muitos graus de liberdade num problema efetivo de sítio único com poucos graus de liberdade. A dinâmica num certo sítio pode ser obtida através das interações do problema local do sítio com o banho externo criado pelos outros sítios, como ilustrado na figura 13.

A ilustração mais simples desta idéia é para o modelo de Ising,

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (2.1)$$

onde o fator  $1/2$  remove a dupla contagem de um mesmo par no termo de interação,  $h$  é o campo magnético externo, e  $J_{ij}$  é o termo de interação entre os spins  $S_i$  e  $S_j$  dos sítios  $i$  e  $j$ , que

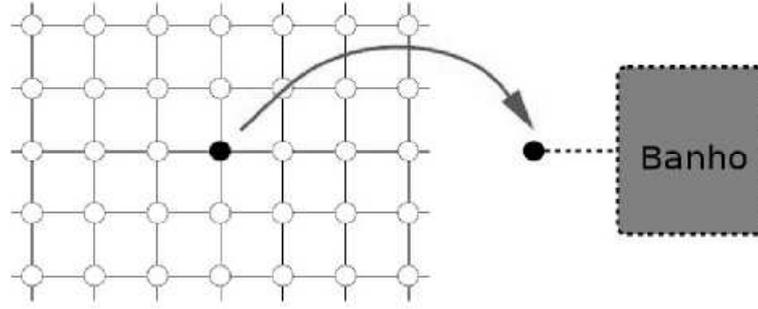


Figura 13: Teoria de campo médio transformando o modelo de uma rede no problema de um sítio acoplado a um banho determinado de forma autoconsistente.

é definido por

$$J_{ij} = J, \quad i \text{ e } j \text{ são primeiros vizinhos}, \quad (2.2)$$

$$J_{ij} = 0, \quad \text{em outro caso.} \quad (2.3)$$

Nesse caso focamos num spin particular do sistema e assumimos que o papel dos outros spins vizinhos é o de formar um campo magnético médio que age no spin escolhido. Veja a figura 13. Essa aproximação, no entanto, despreza efeitos das flutuações que se estendem a escalas de comprimento associadas às interações de segundos e demais vizinhos. O método inclui apenas flutuações que ocorrem dentro do sítio escolhido, desde que esse envolva um único spin. Assim o método se resume em reduzir o problema de muitos corpos num problema de um corpo embebido num banho efetivo. Procedimentos desse tipo nunca são exatos, mas frequentemente eles podem ser muito acurados e bastante úteis.

No caso uniforme, em que  $\langle S_i \rangle = m$ , independente do sítio  $j$ . Nesse caso, o Hamiltoniano de campo médio  $H_{CM}$  é dado por

$$H_{CM} = N \frac{Jz}{2} m^2 - h_{CM} \sum_i S_i, \quad (2.4)$$

$$h_{CM} = zJm. \quad (2.5)$$

onde  $z$  o número de primeiros vizinhos em volta de um dado sítio e  $N$  o número de sítios. Fisicamente, a magnetização média dos vizinhos age como um campo magnético efetivo  $h_{CM}$ , chamado de campo efetivo de Weiss.

Escolhendo o sítio  $i$  e somando sobre todos os vizinhos, a partir do Hamiltoniano da equação 2.1, temos a seguinte função de partição

$$Q = \text{Tre}^{-\beta H} = \text{Tre}^{-N\beta h \sum_i S_i + \frac{\beta J}{2} \sum_i \sum_j S_i S_j}. \quad (2.6)$$

A função de partição é obtida pelo somatório sobre todos os sítios, desde 1 à N, dos valores possíveis do spin, aqui considerados +1 e -1, de tal forma que a função de partição pode ser reescrita como

$$Q \approx \sum_{S_1} \dots \sum_{S_N=-1}^1 \exp\left[(\beta h + \frac{\beta J z m}{2}) \sum_i S_i\right], \quad (2.7)$$

$$Q \approx \left\{ \sum_{S_i=-1}^1 \exp\left[(\beta h + \frac{\beta J z m}{2}) S_i\right] \right\}^N, \quad (2.8)$$

onde  $S_i = 1$  ou  $S_i = -1$ , então

$$Q \approx 2^N \left\{ \frac{\exp[-\beta h + \frac{\beta J z m}{2}] + \exp[\beta h + \frac{\beta J z m}{2}]}{2} \right\}^N, \quad (2.9)$$

$$Q \approx 2^N \cosh^N \left[ \beta h + \frac{\beta J z m}{2} \right]. \quad (2.10)$$

Sabendo que a magnetização média por sítio é  $m = \frac{\langle M \rangle}{N}$  e que  $\langle M \rangle = \frac{\partial \ln Q}{\partial (\beta h)}$  temos

$$\begin{aligned} m &= \frac{\sinh[\beta h + \beta J m z]}{\cosh[\beta h + \beta J m z]}, \\ m &= \tanh[\beta h + \beta J m z]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

A equação 2.11 é a equação autoconsistente da magnetização. A aproximação de campo médio se torna exata no limite em que a conectividade  $z$  da rede se torna grande [15].

Essa construção pode ser estendida para os sistemas quânticos de muitos corpos. Assim como no caso clássico tomamos o limite de coordenação grande ( $z \rightarrow \infty$ ) em modelos de férmions interagentes [16], que deu origem à TCMD [14].

Vamos considerar inicialmente o modelo de Hubbard, cujo Hamiltoniano é dado por

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + (\epsilon_0 - \mu) \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}, \quad (2.12)$$

onde  $c_{i\sigma}^\dagger$  e  $c_{i\sigma}$  são os operadores de criação e aniquilação de um elétron com spin  $\sigma$  no sítio  $i$ ,  $t_{ij}$  é o termo de *hopping* de sítio para sítio na rede, o somatório sobre  $\langle i,j \rangle$  é restrito aos primeiros vizinhos,  $U$  é a energia de repulsão colombiana ou interação elétron-elétron decorrente da repulsão coulombiana,  $n_{i\downarrow}$  e  $n_{i\uparrow}$  são os operadores número no sítio  $i$  de spin  $\downarrow$  e  $\uparrow$ ,  $\epsilon_0$  é a energia de cada sítio,  $n_{i\sigma}$  é o operador número de elétrons no sítio  $i$  com spin  $\sigma$  e  $\mu$  é o potencial químico. Ele descreve uma coleção de “átomos” de orbitais únicos colocados nos nós  $\vec{R}_i$  de uma rede periódica. Os orbitais se sobrepõem de um sítio a outro, de tal maneira que os férmions podem

saltar com uma amplitude  $t_{ij}$ . O sítio alvo 0 terá quatro autoestados possíveis:  $|0\rangle$ ,  $|\uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$  e  $|\uparrow\downarrow\rangle$  com energias 0,  $\epsilon_0$ ,  $\epsilon_0$  e  $U + 2\epsilon_0$ , respectivamente.

Na teoria de campo médio de Weiss, para se calcular a magnetização local  $m$ , considera-se que o spin no sítio  $i$  está acoplado a um campo efetivo, no caso o campo efetivo de Weiss. De forma análoga, a teoria de campo médio dinâmica mapeia o problema da rede no problema de um átomo acoplado a um banho efetivo. Este último problema pode ser descrito pelo modelo de Anderson de uma impureza, cujo Hamiltoniano é

$$H_{AI} = H_{atomo} + H_{banho} + H_{acoplamento}, \quad (2.13)$$

no qual

$$\begin{aligned} H_{atomo} &= Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow} + (\epsilon_0 - \mu)(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}), \\ H_{banho} &= \sum_{j\sigma} \tilde{\epsilon}_j a_{j\sigma}^\dagger a_{j\sigma}, \\ H_{acoplamento} &= \sum_{j\sigma} V_j (a_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Nestas expressões, um conjunto de férmions não interagentes (descritos pelos  $a_{j\sigma}^\dagger$  e  $a_{j\sigma}$ ) são introduzidos. Os operadores  $c_{i\sigma}$  e  $c_{i\sigma}^\dagger$  correspondem aos férmions interagentes e localizados, e  $\tilde{\epsilon}_j$  e  $V_j$  são parâmetros que são escolhidos de tal maneira que a função de Green do orbital  $c$  (impureza) da equação (2.14) coincida com a função de Green local da rede do modelo de Hubbard em consideração (condição que será imposta adiante, na equação 2.24) [16]. De fato, estes parâmetros entram apenas através da função de hibridização, que é a função responsável pelo acoplamento entre os férmions tipo  $c$  e tipo  $a$

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_j \frac{|V_j|^2}{i\omega_n - \tilde{\epsilon}_j}, \quad (2.15)$$

onde  $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$  em que  $\beta = 1/K_B T$ , e a função é tomada no eixo imaginário em decorrência da função de Green ser mais estável no eixo imaginário.

Para se chegar no problema auxiliar de uma impureza descrito acima, mediante a equação 2.12, que envolve todos os sítios, escolhemos um sítio e integramos sobre os graus de liberdade de todos os outros sítios. Obtemos a ação efetiva para o orbital da impureza,

$$S_{ef} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{i\sigma}^\dagger(\tau) G_0^{-1}(\tau - \tau') c_{i\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau), \quad (2.16)$$

em que

$$G_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \epsilon_0 - \Delta(i\omega_n). \quad (2.17)$$

O problema descrito pela ação da equação 2.16 corresponde ao mesmo problema de uma impureza da equação 2.13. O primeiro termo dessa ação local representa a dinâmica efetiva do sítio 0 sobre consideração: um férmion é criado nesse sítio 0 no tempo  $\tau$  (quando o férmion “vem do banho externo”) e é destruído no tempo  $\tau'$  (indo de volta ao banho). Toda vez que dois férmions (com spins opostos) estão presentes no sítio 0 no mesmo instante, um custo de energia  $U$  é incluído. Daí essa ação efetiva descrever as flutuações entre os quatro estados atômicos ( $|0\rangle$ ,  $|\uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$  e  $|\uparrow\downarrow\rangle$ ) induzidos pelo acoplamento ao banho. Podemos interpretar  $G_0(\tau - \tau')$  como a generalização quântica do campo efetivo de Weiss no caso clássico. A principal diferença com o caso clássico é que esse campo médio é dinâmico, ou seja, é uma função da energia (ou tempo) em vez de um número simples. Isso é necessário para levarmos em consideração as flutuações quânticas locais, que é a principal proposta da TCMD. ( $G_0(\tau - \tau')$  não deve ser confundida com a função de Green local não interagente ( $U = 0$ ) do modelo da rede original [16]).

Vamos agora relacionar a função de Weiss à função de Green local  $G(i\omega_n)$  do problema de um átomo acoplado a um banho efetivo. Para o modelo efetivo de uma impureza (2.16), podemos definir a autoenergia local a partir da função de Green interagente  $G(\tau - \tau') = -\langle T c(\tau) c^\dagger(\tau') \rangle$  e do campo médio dinâmico de Weiss como

$$\begin{aligned}\Sigma_{imp}(i\omega_n) &\equiv G_0^{-1}(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n) \\ \Sigma_{imp}(i\omega_n) &= i\omega_n + \mu - \epsilon_0 - \Delta(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n).\end{aligned}\quad (2.18)$$

A autoenergia do modelo original é definida como usualmente a partir da função de Green interagente  $G_{ij}(\tau - \tau') = -\langle T c_{i,\sigma}(\tau) c_{j,\sigma}^\dagger(\tau') \rangle$  por (no espaço das frequências)

$$G(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_0 - \epsilon_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n)},\quad (2.19)$$

onde  $\epsilon_{\vec{k}}$  é a transformada de Fourier do termo de “hopping”,

$$\epsilon_{\vec{k}} \equiv \sum_j t_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)},\quad (2.20)$$

ou seja, corresponde à relação de dispersão da banda de condução no caso não interagente.

No limite  $z \rightarrow \infty$ , a autoenergia é local, ou seja, independe de  $\vec{k}$  [14]. Além disso, uma das considerações da TCMD é a de que a autoenergia da rede coincida com a autoenergia da impureza. Assim

$$\Sigma(\vec{k}, i\omega_n) = \Sigma(i\omega_n) = \Sigma_{imp}(i\omega_n).\quad (2.21)$$

Outra consideração da TCMD é que  $\sum_{\vec{k}} G(\vec{k}, i\omega_n) = G(i\omega_n)$ , ou seja, somando a função

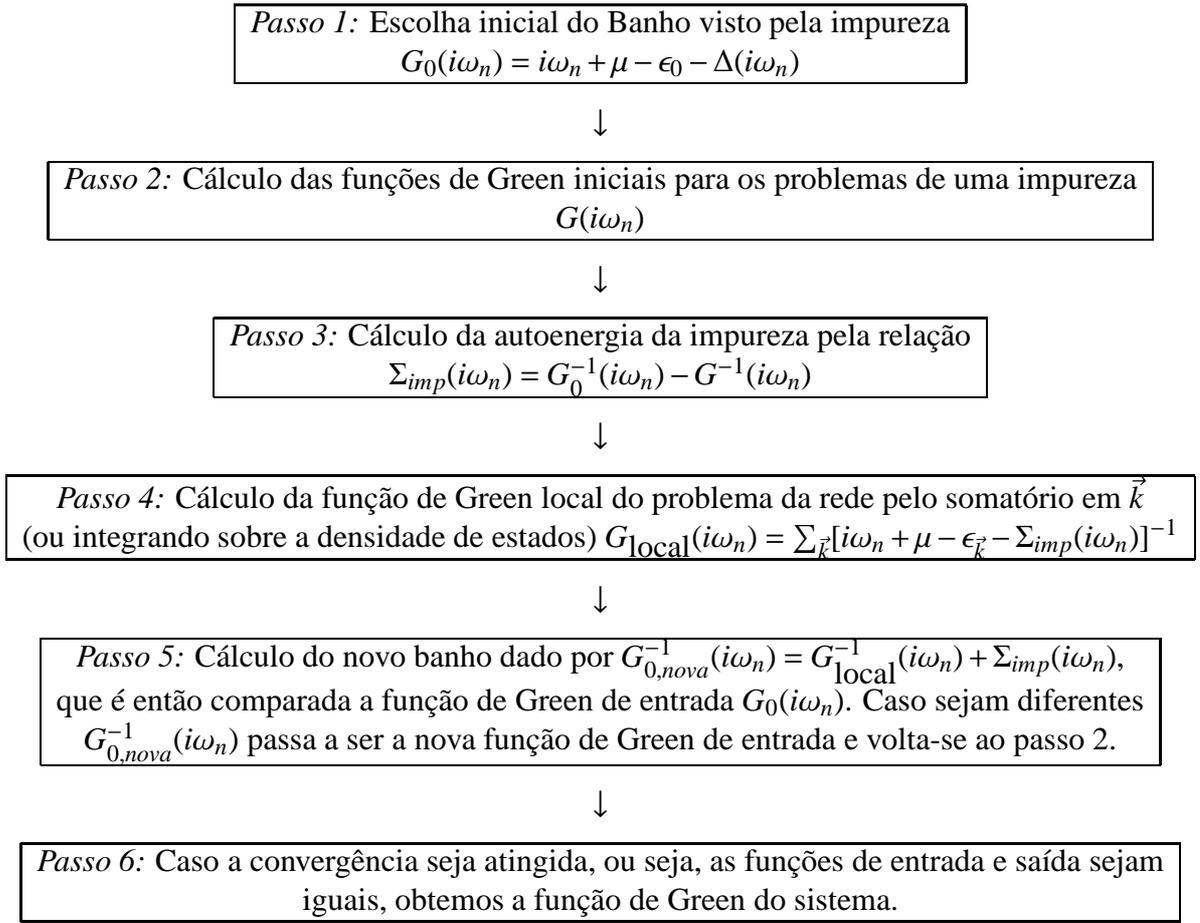


Figura 14: Fluxograma utilizado no cálculo numérico da TCMD.

de Green da rede (equação 2.19) sobre  $\vec{k}$  obtemos a função de Green local correspondente ao problema da rede, que deve ser igual à função de Green do problema auxiliar de uma impureza. Usando a 2.18, temos que

$$\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\Delta(i\omega_n) + G^{-1}(i\omega_n) - \epsilon_{\vec{k}}} = G(i\omega_n). \quad (2.22)$$

Outra forma de obtermos a função de Green local é através da densidade de estados não interagente, definida por

$$\rho(\epsilon) \equiv \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{k}}). \quad (2.23)$$

Em termos dela, a equação 2.22 passa a ser escrita como

$$\int d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)}{\Delta(i\omega_n) + G(i\omega_n)^{-1} - \epsilon} = G(i\omega_n). \quad (2.24)$$

Essa é uma condição de autoconsistência, que fornece, para cada frequência, o campo médio

dinâmico  $G_0(i\omega_n)$  através de  $\Delta(i\omega_n)$  e a função de Green interagente do modelo efetivo de uma impureza definido pela equação 2.14 ou 2.16 é obtida da função de Green do problema original. Portanto, temos um conjunto fechado de equações que determinam completamente em princípio as duas funções  $\Delta(i\omega_n)$  e  $G(i\omega_n)$  (ou  $G_0, G$ ). Na prática, é usado um procedimento iterativo, como representado na figura 14. Esse procedimento iterativo, em alguns casos, converge para uma solução única independentemente da escolha inicial de  $G_0(i\omega_n)$ .

A analogia entre a construção do campo médio clássico e o quântico (TCMD) é mostrada na tabela 2.

Caso Clássico	Caso Quântico	
$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i$	$-\sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_i H_{atomo}(i)$	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
$H_{ef} = -h_{ef} S$	$H_{ef} = H_{atomo} + \sum_{j\sigma} \tilde{\epsilon}_j a_{j\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \sum_{j\sigma} V_j (a_{j\sigma}^\dagger c_\sigma + c_\sigma^\dagger a_{j\sigma}) - \epsilon_0$	Hamiltoniano Efetivo de um sítio
$h_{ef}$ $h_{ef} = Jmz$	$G_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n),$ onde $\Delta(i\omega_n) = \sum_j \frac{ V_j ^2}{i\omega_n - \tilde{\epsilon}_j}$	Campo / Função de Weiss
$m = \tanh[\beta h + \beta Jmz]$	$G(i\omega_n) = \sum_{\vec{k}} [\Delta(i\omega_n) + G(i\omega_n)^{-1} - \epsilon_{\vec{k}}]^{-1}$	Relação de Autoconsistência

Tabela 2: Correspondências entre a teoria de campo médio de um sistema clássico e a teoria de campo médio dinâmico de um sistema quântico. Tabela da referência [16].

Como foi dito anteriormente a TCMD mapeia o problema da rede de Anderson num único problema de uma impureza. Existem vários métodos para se resolver o problema de uma impureza, dentre eles está o método de bósons escravos, que será discutido na seção 2.3.

## 2.2 Modelo da Rede de Anderson

O modelo da rede de Anderson é caracterizado por elétrons tipo  $f$  localizados e elétrons tipo  $c$  estendidos, também chamados de elétrons de condução. Nos elétrons localizados a interação elétron-elétron  $U$  é forte e nos elétrons estendidos  $t$  é o termo de “hopping” de sítio para sítio. As interações elétron-elétron nos elétrons de condução, por serem estendidos sobre toda a rede, são menos relevantes em magnitude e por isso são desprezadas. O Hamiltoniano do modelo é

dado por

$$\begin{aligned}
H_{And} = & \sum_{\vec{k}\sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + V \sum_{j\sigma} (c_{j\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + f_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}) \\
& + (E_f - \mu) \sum_{j\sigma} f_{j\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + U \sum_j f_{j\uparrow}^\dagger f_{j\uparrow} f_{j\downarrow}^\dagger f_{j\downarrow},
\end{aligned} \tag{2.25}$$

onde  $f_{j\sigma}$  e  $c_{j\sigma}$  ( $f_{j\sigma}^\dagger$  e  $c_{j\sigma}^\dagger$ ) são os operadores de aniquilação (criação) para os elétrons tipo  $f$  e os elétrons de condução, respectivamente, onde  $\epsilon_{\vec{k}}$  é a energia dos elétrons de condução,  $\mu$  é o potencial químico,  $V$  é o potencial de hibridização entre os elétrons estendidos e localizados, e  $E_f$  é a energia dos elétrons localizados [17]. Esse é o modelo que daremos mais atenção nessa dissertação e sua notação é a que será usada de agora em diante. As funções de Green para os elétrons tipo  $f$  e de condução são dadas por

$$G_f(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_f(i\omega_n) - \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}}}}, \tag{2.26}$$

$$G_c(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}} - \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_f(i\omega_n)}}, \tag{2.27}$$

onde  $\Sigma_f(i\omega_n)$  é a autoenergia dos elétrons tipo  $f$ , que independe do vetor de onda  $\vec{k}$ , no limite  $d \rightarrow \infty$  [14].

Dentro da TCMD, devemos considerar um único elétron tipo  $f$ , num sítio  $o$ , e integrar sobre todos os graus de liberdade dos demais elétrons tipo  $f$  e dos elétrons de condução. Nesse caso, o problema da rede se reduz à seguinte ação efetiva, correspondente ao problema de uma impureza

$$S = \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma f_{o\sigma}^\dagger(\tau) G_0^{-1}(\tau - \tau') f_{o\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{fo\uparrow}(\tau) n_{fo\downarrow}(\tau). \tag{2.28}$$

A condição exigida pela TCMD é que a função de Green local dos elétrons tipo  $f$  coincida com a função de Green do problema auxiliar,  $G_f(i\omega_n)$ . Escrevendo na forma de equação, a condição significa

$$G_f(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau G_f(\tau) e^{i\omega_n \tau} = \sum_{\vec{k}} G_f(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{G_0^{-1}(i\omega_n) - \Sigma(i\omega_n)}, \tag{2.29}$$

onde  $G_f(\tau - \tau')$  é calculada sob a ação da equação 2.28, ou seja,

$$G_f(\tau - \tau') = -\langle T_\tau f(\tau) f^\dagger(\tau') \rangle, \tag{2.30}$$

onde  $\omega_n$  são as frequências,  $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$  é a auto energia do problema auxiliar,  $T_\tau$  é o operador de ordenamento temporal.

A outra condição da TCMD é que  $\Sigma_f(i\omega_n) = \Sigma_{imp}(i\omega_n)$ .

A equação 2.26 para  $G_f(i\omega_n)$  pode ser reescrita como

$$G_f(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_f(i\omega_n)} + \frac{V^2}{[i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_f(i\omega_n)]^2} G_c(i\omega_n), \quad (2.31)$$

em termos da função de Green local dos elétrons de condução,  $G_c(i\omega_n)$ , dada pela equação 2.27 por

$$G_c(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\epsilon)d\epsilon}{i\omega_n + \mu - \epsilon - \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_f(i\omega_n)}}, \quad (2.32)$$

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

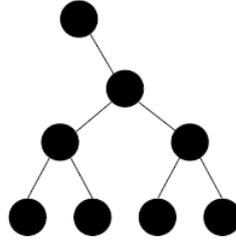


Figura 15: Exemplo de uma rede de Bethe com  $z = 3$ .

A natureza da rede aparece nas equações de campo médio apenas através da densidade de estados  $\rho(\epsilon)$ . Nos cálculos realizados, consideramos apenas o caso de uma *rede de Bethe*, em que cada sítio conecta-se a outros  $z$  sítios, como representado na figura 15 para  $z = 3$ . Além disso, no limite em que a TCMD é exata, temos  $z \rightarrow \infty$ . Nesse caso, a densidade de estados é semicircular

$$\rho(\epsilon) = \begin{cases} \frac{2}{\pi D} \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon}{D}\right)^2} & |\epsilon| < D \\ 0 & |\epsilon| > D \end{cases}, \quad (2.33)$$

onde  $D = 2t$ , em que  $D$  é a largura de banda e  $t$  é o termo de “hopping” correspondente a metade da largura da banda.

Para a rede de Bethe, cuja densidade de estados é dada pela equação 2.33, a resolução da integral da equação 2.32 nos dá [17]

$$G_c(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - t^2 G_c(i\omega_n) - \Phi(i\omega_n)}. \quad (2.34)$$

onde

$$\Phi(i\omega_n) = \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_{imp}(i\omega_n)}. \quad (2.35)$$

Substituindo a equação acima e a equação 2.29 para o problema de uma impureza na equação 2.31, chegamos à seguinte equação para  $G_0(i\omega_n)$  em função de  $G_c(i\omega_n)$

$$G_0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - E_f - \Delta(i\omega_n)}, \quad (2.36)$$

onde

$$\Delta(i\omega_n) = \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - t^2 G_c(i\omega_n)} \quad (2.37)$$

As equações 2.28 e 2.29 são as equações de campo médio para o modelo de Anderson. No caso específico da rede de Bethe, essas equações se reduzem às equações 2.34 e 2.36, dadas acima. Além delas, o cálculo autoconsistente envolve a resolução do problema de uma impureza que é apresentado na próxima seção. O cálculo autoconsistente é feito a partir da escolha de um valor inicial para o banho  $\Delta(i\omega_n)$ , onde partimos para a resolução do problema de uma impureza associado ao banho  $\Delta(i\omega_n)$  e para o cálculo de  $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$ , em seguida calculamos  $\Phi(i\omega_n)$  e  $G_c(i\omega_n)$ , aplicamos na equação 2.34, e testamos se a convergência não for atingida, calculamos o novo banho a partir da  $G_c(i\omega_n)$  e repetimos o processo até a convergência ser atingida. Como vimos, na TCMD, o modelo da rede de Anderson é mapeado no problema de uma impureza mais uma condição de autoconsistência. A equação 2.34 mostra que os elétrons de condução “vêm” a impureza através de  $\Phi(i\omega_n)$ .

## 2.3 Bósons Escravos

Para resolver a equação 2.28 referente ao problema de uma impureza usaremos o método de bósons escravos [18] em temperatura nula e  $U$  infinito. O método de bósons escravos é uma aproximação de campo médio que consiste na introdução de operadores bosônicos auxiliares aos operadores fermiônicos de tal maneira que as informações importantes sobre a física envolvida sejam preservadas e levadas em conta através deles.

O Hamiltoniano do problema de Anderson de uma impureza é dado pela equação 2.25. O caso considerado é o com  $U \rightarrow \infty$  que torna impossível a dupla ocupação devido ao preço infinito de  $U$ , e por isso os estados possíveis na impureza são apenas o estado vazio  $|0\rangle$  e simplesmente ocupado  $|\uparrow\rangle$  ou  $|\downarrow\rangle$ . Com isso o número de ocupação da impureza será  $n_f \leq 1$ , ou seja, uma desigualdade. Para tornar essa relação uma igualdade adicionamos um bóson  $b$  ao

estado vazio  $|0\rangle$ , mudando o operador  $f$ ,

$$\begin{aligned} f_\sigma &\longrightarrow b^\dagger \tilde{f}_\sigma, \\ f_\sigma^\dagger &\longrightarrow \tilde{f}_\sigma^\dagger b, \\ n_{f\sigma} = f_\sigma^\dagger f_\sigma &\longrightarrow \tilde{f}_\sigma^\dagger b b^\dagger \tilde{f}_\sigma \end{aligned} \quad (2.38)$$

então

$$\begin{aligned} n_{f\sigma} &\longrightarrow n_{\tilde{f}\sigma}, \\ \sum_\sigma (n_{f\sigma}) \leq 1 &\longrightarrow \sum_\sigma (n_{\tilde{f}\sigma}) + b^\dagger b = 1. \end{aligned} \quad (2.39)$$

A expressão acima estabelece uma condição de vínculo de forma que, se a impureza estiver vazia  $\sum_\sigma (n_{\tilde{f}\sigma}) = 0$ , então  $b^\dagger b = 1$  e, se a impureza estiver ocupada  $\sum_\sigma (n_{\tilde{f}\sigma}) = 1$ , então  $b^\dagger b = 0$ . O operador bosônico  $b^\dagger b$  denota o número de estados vazios. Os bósons são introduzidos para que a desigualdade vire uma igualdade, sendo assim chamados de bósons escravos. Com isso o Hamiltoniano da equação 2.25 fica

$$H_{\text{And}} = \sum_{\vec{k}\sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + E_f \sum_\sigma \tilde{f}_\sigma^\dagger b b^\dagger \tilde{f}_\sigma + V \sum_{\vec{k}\sigma} (c_{\vec{k}\sigma}^\dagger b^\dagger \tilde{f}_\sigma + \tilde{f}_\sigma^\dagger b c_{\vec{k}\sigma}). \quad (2.40)$$

O vínculo 2.39 é introduzido por meio de um multiplicador de Langrange [19]. Com isso o Hamiltoniano fica

$$H_{\text{And}} = \sum_{\vec{k}\sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \tilde{\epsilon}_f \sum_\sigma n_{\tilde{f}\sigma} + V \sum_{\vec{k}\sigma} (c_{\vec{k}\sigma}^\dagger b^\dagger \tilde{f}_\sigma + \tilde{f}_\sigma^\dagger b c_{\vec{k}\sigma}) + \lambda (b^\dagger b - 1) \quad (2.41)$$

onde  $\tilde{\epsilon}_f = E_f + \lambda$  é a energia do estado localizado renormalizada pelo multiplicador de Lagrange  $\lambda$ . A aproximação de campo médio para o método de bósons escravos consiste em substituir os operadores bosônicos  $b$  e  $b^\dagger$  pelos seus respectivos valores esperados  $\langle b^\dagger \rangle = \langle b \rangle \equiv Z^{\frac{1}{2}}$ , de maneira a tornar o Hamiltoniano no Hamiltoniano efetivo de partículas independentes dado por

$$H_{\text{And}} = \sum_{\vec{k}\sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \tilde{\epsilon}_f \sum_\sigma n_{\tilde{f}\sigma} + V Z^{\frac{1}{2}} \sum_{\vec{k}\sigma} (\langle c_{\vec{k}\sigma}^\dagger \tilde{f}_\sigma + \tilde{f}_\sigma^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \rangle + \lambda [(Z^{\frac{1}{2}})^2 - 1]). \quad (2.42)$$

O Hamiltoniano acima depende apenas dos parâmetros  $Z$  e  $\lambda$ , onde  $Z$  está associado à ausência de elétrons na impureza. Estes parâmetros são determinados pela minimização da energia livre do sistema  $\langle H_{\text{And}}^{ef} \rangle$  dado por

$$H_{\text{And}}^{ef} = \sum_{\vec{k}\sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) \langle c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \rangle + \tilde{\epsilon}_f \sum_\sigma \langle n_{\tilde{f}\sigma} \rangle + V \sqrt{Z} \sum_{\vec{k}\sigma} (\langle c_{\vec{k}\sigma}^\dagger \tilde{f}_\sigma \rangle + \langle \tilde{f}_\sigma^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \rangle) + \lambda (Z - 1). \quad (2.43)$$

As condições para a minimização são

$$\frac{\partial \langle H_{\text{And}}^{ef} \rangle}{\partial \lambda} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial \langle H_{\text{And}}^{ef} \rangle}{\partial Z} = 0. \quad (2.44)$$

Logo

$$\frac{\partial \langle H_{\text{And}}^{ef} \rangle}{\partial \lambda} = \sum_{\sigma} \langle n_{\tilde{f}\sigma} \rangle + Z - 1 = 0 \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial \langle H_{\text{And}}^{ef} \rangle}{\partial Z} = \frac{1}{2Z^{\frac{1}{2}}} V \sum_{\vec{k}\sigma} (\langle c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} \tilde{f}_{\sigma} \rangle + \langle \tilde{f}_{\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} \rangle) + \lambda = 0, \quad (2.46)$$

como  $\lambda = \tilde{\epsilon}_{\tilde{f}} - E_f$ , então temos

$$Z - 1 = - \sum_{\sigma} \langle n_{\tilde{f}\sigma} \rangle \quad (2.47)$$

$$2Z^{\frac{1}{2}}(\tilde{\epsilon}_{\tilde{f}} - E_f) = -V \sum_{\vec{k}\sigma} (\langle c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} \tilde{f}_{\sigma} \rangle + \langle \tilde{f}_{\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} \rangle) \quad (2.48)$$

onde

$$\sum_{\sigma} \langle n_{\tilde{f}\sigma} \rangle = 2 \int_{-\infty}^{E_F} \rho_{\tilde{f}}(\omega) d\omega = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} \text{Im} G_{\tilde{f}}(\omega) d\omega, \quad (2.49)$$

$$\sum_{\vec{k}\sigma} \langle c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} \tilde{f}_{\sigma} \rangle = \sum_{\vec{k}\sigma} \langle \tilde{f}_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} \rangle = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} \text{Im} G_{\tilde{f}c}(\omega) d\omega, \quad (2.50)$$

onde  $\rho_{\tilde{f}}(\omega)$  é a densidade de estados dos elétrons tipo  $\tilde{f}$ ,  $G_{\tilde{f}}(\omega)$  e  $G_{\tilde{f}c}(\omega)$  são as funções de Green dos elétrons tipo  $\tilde{f}$  e da hibridização entre os elétrons tipo  $\tilde{f}$  e de condução, respectivamente, dada por [20]

$$G_{\tilde{f}}(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \tilde{\epsilon}_{\tilde{f}} - \frac{(V\sqrt{Z})^2}{\omega - \Delta_c(\omega)}} = \frac{1}{\omega + \mu - \tilde{\epsilon}_{\tilde{f}} - Z\Delta_{\tilde{f}}(\omega)}, \quad (2.51)$$

$$G_{\tilde{f}c}(\omega) = \frac{V\sqrt{Z}}{\omega - \Delta_c(\omega)} G_{\tilde{f}}(\omega) = \frac{\sqrt{Z}}{V} \Delta_{\tilde{f}}(\omega) G_{\tilde{f}}(\omega), \quad (2.52)$$

onde  $\Delta_c(\omega)$  e  $\Delta_{\tilde{f}}(\omega)$  correspondem ao banho de elétrons de condução e dos elétrons localizados, respectivamente. As duas equações acima (2.51 e 2.52) são calculadas no eixo real, porque queremos calcular a densidade de estados. Substituindo as equações 2.51 e 2.52 em 2.49 e 2.50,

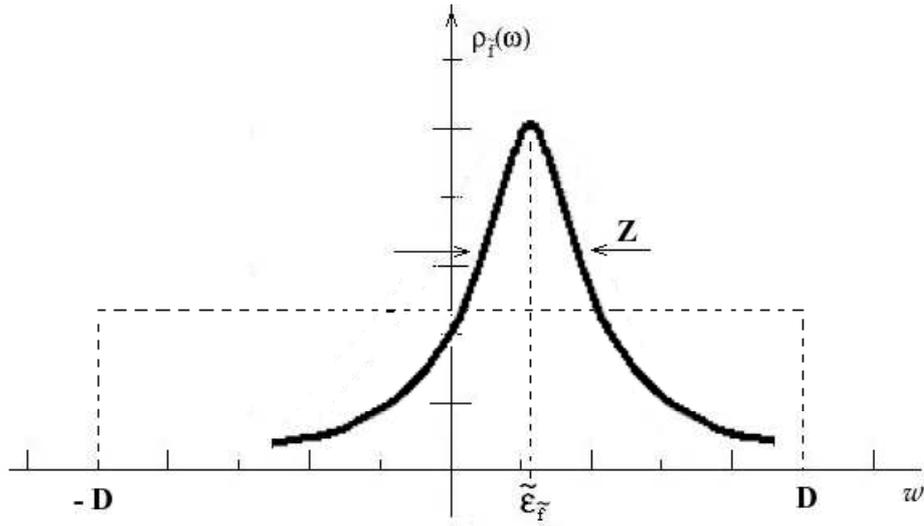


Figura 16: Interpretação física das grandezas  $Z$  e  $\tilde{\epsilon}_f$  num problema de uma impureza.

vem

$$(1 - Z) = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} \text{Im} \left[ \frac{1}{\omega + \mu - \tilde{\epsilon}_f - Z\Delta_f(\omega)} \right] d\omega \quad (2.53)$$

$$(E_f - \tilde{\epsilon}_f) = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} \text{Im} \left[ \frac{\Delta_f(\omega)}{\omega + \mu - \tilde{\epsilon}_f - Z\Delta_f(\omega)} \right] d\omega. \quad (2.54)$$

Essas são as equações a serem resolvidas para determinar  $Z$  e  $\tilde{\epsilon}_f$ , ou seja, para resolver o problema de uma impureza usando bósons escravos. A introdução dos operadores bosônicos renormaliza o nível  $f$ , de tal maneira que a densidade de estados dos elétrons tipo  $f$  torna-se uma lorentziana ressonante em  $\tilde{\epsilon}_f$  de largura  $Z$ . A figura 15 ilustra a interpretação de  $Z$  e  $\tilde{\epsilon}_f$  para um problema de uma impureza.

## 3 **DESORDEM**

Neste capítulo abordaremos como a teoria de campo médio dinâmico trata sistemas desordenados. Em seguida discutiremos o efeito de localização de Anderson, que segundo Anderson, está sempre presente em sistemas desordenados. E por fim discutiremos a teoria do meio típico, sua essência e como a utilizaremos no cálculo autoconsistente do nosso sistema.

### 3.1 Aproximação do Potencial Coerente

O tratamento da desordem, dentro da teoria de campo médio dinâmico, é equivalente ao tratamento da aproximação do potencial coerente, já que ambas são exatas no limite de dimensão infinita [17]. A aproximação do potencial coerente CPA consiste no cálculo autoconsistente da função de Green média da rede, associada à função de Green local, a partir da determinação do potencial coerente  $\Sigma(i\omega)$ , demandando que as flutuações da função de onda dos elétrons sejam flutuações locais em torno da média efetiva [21]. A média efetiva é feita sobre a função de Green da rede.

Consideremos o Hamiltoniano seguinte, com desordem presente a partir de um potencial aleatório

$$\begin{aligned}
 H &= H_0 + H_1, \\
 H_0 &= -t \sum_{\langle ij \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \\
 H_1 &= \sum_{i\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma},
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde  $t$  representa o *hopping* dos elétrons de um sítio para outro,  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{j\sigma}$ ) são os operadores de criação (aniquilação) de um elétron de condução no sítio  $i$  ( $j$ ) com spin  $\sigma$ , e  $H_1$  é o termo correspondente à desordem, onde  $\epsilon_i$  encontra-se distribuído segundo uma distribuição de probabilidade  $P(\epsilon_i)$ .

A função de Green para  $H_0$  é

$$G_0(\vec{k}, i\omega) = \frac{1}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}}}, \quad (3.2)$$

onde  $\omega$  é a frequência, e  $\epsilon_{\vec{k}}$  é a transformada de Fourier do “hopping”  $t$ , correspondente à dispersão dos elétrons estendidos. A CPA assume que o efeito de  $H_1$  na função de Green média do sistema é deslocar a frequência de  $\Sigma(i\omega)$ , logo

$$\bar{G}(\vec{k}, i\omega) = G_0[\vec{k}, i\omega - \Sigma(i\omega)] = \frac{1}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}} - \Sigma(i\omega)}. \quad (3.3)$$

Fisicamente falando, seria como se o “potencial coerente”  $\Sigma(i\omega)$  estivesse presente em cada sítio da rede, ou seja, é um potencial local, que, por isso, independe de  $\vec{k}$ . Desse modo o potencial aleatório no sítio  $i$  é dado por:  $\tilde{\epsilon}_i = \epsilon_i - \Sigma(i\omega)$  e isso representa uma perturbação do meio uniforme, dada pela função de Green média  $\bar{G}(\vec{k}, i\omega)$ .

Podemos tratar  $\tilde{\epsilon}_i$  por teoria de espalhamento [21]. Nesse caso, a matriz de espalhamento é

$$t_i(i\omega) = \frac{\epsilon_i - \Sigma(i\omega)}{1 - \bar{G}^l(i\omega)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]}, \quad (3.4)$$

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

$$\bar{G}^l(i\omega) = \sum_{\vec{k}} \bar{G}(\vec{k}, i\omega). \quad (3.5)$$

Como o efeito do potencial aleatório já foi considerado na função de Green média, a média da matriz de espalhamento deve ser nula, ou seja

$$\langle t_i(i\omega) \rangle = \left\langle \frac{\epsilon_i - \Sigma(i\omega)}{1 - \bar{G}^l(i\omega)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]} \right\rangle = 0, \quad (3.6)$$

onde  $\langle \rangle$  significa a média. Podemos reescrever a equação 3.6, como

$$\left\langle \frac{\bar{G}^l(i\omega)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]}{1 - \bar{G}^l(i\omega)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]} \right\rangle = 0. \quad (3.7)$$

Somando 1 em ambos os lados da equação 3.7 temos

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\bar{G}^l(i\omega)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]}{1 - \bar{G}^l(i\omega)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]} + 1 \right\rangle &= 1, \\ \left\langle \frac{\bar{G}^l(i\omega)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega)] + 1 - \bar{G}^l(i\omega)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]}{1 - \bar{G}^l(i\omega)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]} \right\rangle &= 1, \\ \left\langle \frac{1}{1 - \bar{G}^l(i\omega)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]} \right\rangle &= 1, \end{aligned}$$

e, multiplicando ambos os lados por  $\bar{G}^l(i\omega)$  temos

$$\begin{aligned}\bar{G}^l(i\omega) &= \left\langle \frac{\bar{G}^l(i\omega)}{1 - \bar{G}^l(i\omega)[\epsilon_i - \Sigma(i\omega)]} \right\rangle, \\ \bar{G}^l(i\omega) &= \left\langle \frac{1}{[\bar{G}^l(i\omega)]^{-1} - \epsilon_i - \Sigma(i\omega)} \right\rangle,\end{aligned}\quad (3.8)$$

que representa a equação para determinar o potencial coerente  $\Sigma(i\omega)$  [17].

A equação 3.8 pode ser particularizada para a rede de Bethe, que é uma rede de conectividade  $z$ . Um exemplo da rede de Bethe com  $z = 3$  é dado na figura 15 do capítulo anterior. No nosso caso tomaremos o limite em que o número de vizinhos vai a infinito  $z \rightarrow \infty$ , em que a densidade de estados é semicircular.

Para o caso de um sistema sem desordem, com densidade de estados semicircular temos

$$G_0^l(i\omega) = \frac{1}{i\omega - t^2 G_0^l(i\omega)}, \quad (3.9)$$

onde  $G_0^l(i\omega)$  é dado pela equação 3.5, por

$$G_0^l(i\omega) = \sum_{\vec{k}} G_0(\vec{k}, i\omega).$$

Substituindo a equação 3.9 na equação 3.3 para o caso local, temos

$$\begin{aligned}\bar{G}^l(i\omega) &= G_0^l(i\omega - \Sigma(i\omega)), \\ \bar{G}^l(i\omega) &= \frac{1}{i\omega - \Sigma(i\omega) - t^2 G_0^l(i\omega - \Sigma(i\omega))}, \\ \bar{G}^l(i\omega) &= \frac{1}{i\omega - \Sigma(i\omega) - t^2 \bar{G}^l(i\omega)}.\end{aligned}\quad (3.10)$$

Substituindo o resultado acima na equação 3.8, temos

$$\begin{aligned}\bar{G}^l(i\omega) &= \left\langle \frac{1}{i\omega - \Sigma(i\omega) - t^2 \bar{G}^l(i\omega) - \epsilon_i + \Sigma(i\omega)} \right\rangle, \\ \bar{G}^l(i\omega) &= \left\langle \frac{1}{i\omega - \epsilon_i - t^2 \bar{G}^l(i\omega)} \right\rangle.\end{aligned}\quad (3.11)$$

A equação 3.11 acima é a condição autoconsistente que dá a solução, dentro da CPA, para o problema de elétrons numa rede de Bethe, sem interação elétron-elétron, mas com desordem presente na energia local, ou seja, para o problema descrito pelo Hamiltoniano da equação 3.1. Reconhecemos que  $\Delta(i\omega) = t^2 \bar{G}^l(i\omega)$  funciona como o banho que cada problema local “vê”.

## 3.2 Localização de Anderson

Anderson [22] mostrou que elétrons não interagentes num sistema têm autoestados estendidos ou localizados dependendo do grau de desordem do sistema, e que estados localizados não transportam carga ou energia que é assumido na teoria dos metais. A importância desses estados para a teoria de semicondutores dopados e transições metal-isolante foi de grande valor [23], porque proporcionou novas idéias para a abordagem teórica desses sistemas.

Consideremos o exemplo do sistema de elétrons da seção anterior,

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1, \\ H_0 &= -t \sum_{\langle ij \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \\ H_1 &= \sum_{i\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

onde  $\epsilon_i$  encontra-se distribuído segundo  $P(\epsilon)$ , que é caracterizada pela largura  $W$ . No limite de  $t \ll W$  tratamos o termo  $H_1$  como o termo não perturbado do Hamiltoniano e  $H_0$  como a perturbação. Dessa forma, podemos expandir em torno dos estados localizados com energia  $\epsilon_i$  [17]. A função de Green do  $H_1$  no eixo real, é  $G_i(\omega + is) = [\omega + is - \epsilon_i]^{-1}$  e a função de Green para  $H_0 + H_1$ , no eixo real, é dada por

$$G_i(\omega + is) = \frac{1}{\omega + is - \epsilon_i - \Sigma_i(\omega + is)}, \quad (3.13)$$

onde  $s \rightarrow 0^+$  e  $\Sigma_i(\omega + is)$  é a autoenergia do sítio  $i$ .

Na expansão perturbativa, a primeira correção diferente de zero para a autoenergia é de segunda ordem

$$\Sigma_i(\omega + is) = t^2 \sum_{j \neq i} \frac{1}{\omega + is - \epsilon_j}, \quad (3.14)$$

e pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \Sigma_i(\omega + is) &= t^2 \sum_{j \neq i} \frac{\omega - is - \epsilon_j}{(\omega - \epsilon_j)^2 + s^2}, \\ \Sigma_i(\omega + is) &= t^2 \sum_{j \neq i} \frac{\omega - \epsilon_j}{(\omega - \epsilon_j)^2 + s^2} - ist^2 \sum_{j \neq i} \frac{1}{(\omega - \epsilon_j)^2 + s^2}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Ou seja, a parte real de  $\Sigma_i(\omega + is)$  é a correção na energia do estado não perturbado localizado no sítio  $i$ , enquanto a parte imaginária de  $\Sigma_i(\omega + is)$  corresponde à taxa de decaimento desse estado localizado para os sítios vizinhos devido ao “hopping” [17]. Em decorrência disso a função

de onda do estado com energia  $\omega = \epsilon_i$  se estende apenas nas direções em que  $|\epsilon_i - \epsilon_j| \ll t$ ; quando essa condição é pouco satisfeita ela tende a se localizar numa dada região do espaço. Como  $\epsilon_j$  encontra-se distribuída, geralmente essa contribuição não é muito expressiva, dando a possibilidade da função de onda se localizar numa dada região do espaço.

Como dito anteriormente, o decaimento do estado no sítio  $i$  devido ao “hopping” é dado pela parte imaginária da auto energia

$$\text{Im}\Sigma_i(\omega + is) = -st^2 \sum_{i \neq j} \frac{1}{(\omega - \epsilon_j)^2 + s^2}. \quad (3.16)$$

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

$$\langle \text{Im}\Sigma_i(0 + is) \rangle = -szt^2 \left[ \int_{-\frac{W}{2}}^{-\frac{W}{2}} \frac{d\epsilon P(\epsilon)}{\epsilon^2 + s^2} \right] = -szt^2 \left[ \frac{2}{s} \text{arctg} \left( \frac{W}{2s} \right) \right] \quad (3.17)$$

$$\langle \text{Im}\Sigma_i(0 + is) \rangle = -2zt^2 \text{arctg} \left( \frac{W}{2s} \right) \quad (3.18)$$

$$\langle \text{Im}\Sigma_i(0) \rangle \rightarrow -\pi zt^2 \text{ com } (s \rightarrow 0) \quad (3.19)$$

onde  $z$  é o número de coordenação da rede. Como o valor médio da parte imaginária da autoenergia  $\langle \text{Im}\Sigma_i(0 + is) \rangle$  é finito, como mostrado acima, isso deveria significar que o sistema está num estado estendido, o que não é verdade, porque a probabilidade de que, para o sítio  $i$ ,  $\text{Im}\Sigma_i(0)$  assumia esse valor é muito pequena, pois a distribuição dessa grandeza é singular [17].

Em algumas distribuições de probabilidade o valor médio não é igual ao valor mais provável, valor típico, como mostrado na figura 17 para uma distribuição log-normal. Nesse caso, o valor médio (linha cheia) não é igual ao valor típico (linha pontilhada), e nestas distribuições o valor médio pode não ser o melhor parâmetro para descrever o que acontece no sistema. Logo conclui-se que o valor médio da parte imaginária da autoenergia não é o melhor parâmetro para identificar se o sistema está ou não num estado localizado.

Segundo Anderson [22],

*... nenhum átomo real é um átomo médio, e nenhum experimento é realizado em um “ensemble” de amostras.*

Com isso conclui-se que deve-se trabalhar com toda distribuição  $P(\text{Im}\Sigma)$  ou com o valor mais provável ou típico.

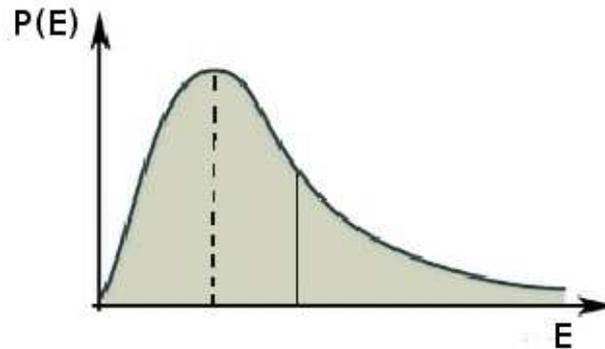


Figura 17: Exemplo de uma distribuição log-normal

A abordagem usada pela CPA na resolução de problemas de sistemas desordenados mapeia o problema da rede em vários problemas locais, tratando o banho como uma média, como na equação 3.11, o que faz o problema local não ver as flutuações espaciais do banho de elétrons de condução. Com o objetivo de ir além da aproximação do potencial coerente, Anderson propôs uma abordagem diferente, capaz de descrever a transição metal-isolante induzida por desordem [17].

A teoria de campo médio dinâmico estatística, TCMD estatística, é uma extensão da TCMD. Ela incorpora não apenas efeitos de localização correlação, como a TCMD, mas também efeitos de localização de Anderson, não descritos pela TCMD. A TCMD estatística mapeia o problema da rede no problema de um sítio acoplado a um banho determinado de forma autoconsistente, como é feito na TCMD, porém, enquanto na TCMD o banho é obtido pela média sobre todos os outros sítios da rede, na TCMD estatística o banho é calculado levando em conta todas as flutuações locais, ou seja, toda a distribuição dos problemas locais, por causa disso ela é capaz de descrever os efeitos de localização de Anderson enquanto a TCMD não descreve [17]. Embora a TCMD estatística seja mais completa que a TCMD, nós não a utilizaremos porque ela exige um tempo computacional muito grande. Por causa disso é que utilizamos como método alternativo uma combinação da TCMD com a teoria do meio típico, que supre a não descrição dos efeitos de localização de Anderson vista na TCMD, o qual será discutida com mais detalhes na próxima seção.

### 3.3 Teoria do Meio Típico

A teoria do meio típico é uma teoria autoconsistente da localização de Anderson que possui algoritmo simples e que considera a densidade de estados típica como um parâmetro de ordem, como será visto adiante. Ela produz os fatores essenciais de um diagrama de fase da tran-

sição quântica localização-delocalização para o problema desordenado. Essa teoria pode ser facilmente combinada com a TCMD para elétrons fortemente correlacionados, abrindo uma via atrativa para um tratamento não perturbativo das interações fortes e desordem forte [24].

O ponto de partida da teoria é motivado pela formulação original de Anderson, que adota um ponto de vista local, e investiga a possibilidade de um elétron se localizar num dado sítio com energia muito inferior aos seus vizinhos mais próximos. Isso é melhor acompanhado pela densidade de estados local (não média), dada por

$$\rho_i(\omega) = \sum_n \delta(\omega - \omega_n) |\psi_n(i)|^2, \quad (3.20)$$

ou seja, a densidade de estados local mede a amplitude das funções de onda eletrônicas num dado sítio  $i$ , varrendo todos os autoestados possíveis, analisando assim a probabilidade da função de onda se localizar ou não neste sítio. Em contraste à densidade de estados média, que não se anula na transição de Anderson, como mostramos na seção anterior, a densidade de estados local sofre mudanças significativas na transição, como foi primeiramente notado por [11]. Isso acontece em decorrência da densidade de estados local medir diretamente as amplitudes locais das funções de onda eletrônicas. Quando os elétrons se localizam, o espectro local passa do contínuo ao discreto e o valor típico ou mais provável da densidade de estados se anula. Apenas na fase metálica, bem próximo da transição, estes picos das funções delta permanecem com longo tempo de vida e assim adquirem uma taxa de escape finita para um dado sítio [24].

Segundo a regra de ouro de Fermi, a probabilidade de transição de um estado quântico,  $i$ , para outro estado,  $j$ , é dada por  $\tau^{-1} = (2\pi/\hbar) |\langle i|H_p|j \rangle|^2 \rho_f$ , onde  $H_p$  é a perturbação potencial responsável pelas transições e  $\rho_f$  é a densidade de estados final [25]. No nosso caso,  $\langle i|H_p|j \rangle$  corresponde ao “hopping”  $t$  e, portanto,  $\tau^{-1} \sim t^2 \rho$ . A taxa de escape típica ou mais provável é assim determinada pelo valor típico da densidade de estados local, que, portanto é uma medida da condutividade dos elétrons no sistema. O valor típico da densidade de estados é bem estimado pela média geométrica. Dada uma rede de  $m$  sítios, cada um com energia  $\epsilon_i$ , e distribuição de probabilidade normalizada, temos

$$\rho_{tip}(\omega, \epsilon) = (\rho(\omega, \epsilon_1) \cdot \rho(\omega, \epsilon_2) \cdot \rho(\omega, \epsilon_3) \dots \rho(\omega, \epsilon_m))^{\frac{1}{m}}. \quad (3.21)$$

Rearranjando os termos temos:

$$\ln \rho_{tip}(\omega, \epsilon) = \ln \prod_{i=1}^m \rho^{\frac{1}{m}}(\omega, \epsilon_i) = \sum_{i=1}^m \frac{1}{m} \ln \rho(\omega, \epsilon_i) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \ln \rho(\omega, \epsilon_i). \quad (3.22)$$

Como a distribuição está normalizada, temos

$$\ln \rho_{tip}(\omega, \epsilon) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \ln \rho(\omega, \epsilon_i) = \langle \ln \rho(\omega, \epsilon) \rangle. \quad (3.23)$$

Logo,

$$\rho_{tip}(\omega, \epsilon) = \exp[\langle \ln \rho(\omega, \epsilon) \rangle]. \quad (3.24)$$

Se  $P(\epsilon)$  é conhecido, a equação 3.24 pode ser escrita como

$$\rho_{tip}(\omega) = \exp\left[\int d\epsilon P(\epsilon) \ln \rho(\omega, \epsilon)\right], \quad (3.25)$$

Para formular uma teoria autoconsistente para o parâmetro de ordem, copia-se a estratégia geral da teoria de campo médio dinâmico [24]. Nessa estratégia, um dado sítio é visto como embebido num meio efetivo caracterizado por uma função banho  $\Delta(\omega)$ . Por simplicidade, nós nos concentramos num modelo sem interação elétron-elétron ( $U = 0$ ), cuja função de Green local no eixo real toma a seguinte forma

$$G(\omega, \epsilon_i) = [\omega - \epsilon_i - \Delta(\omega)]^{-1}, \quad (3.26)$$

em que a densidade de estados local  $\rho(\omega, \epsilon_i)$  apresentada na equação 3.25 é definida por

$$\rho(\omega, \epsilon_i) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\omega, \epsilon_i). \quad (3.27)$$

Na equação 3.26 o  $\Delta(\omega)$  representa o banho efetivo na presença de desordem e, como em CPA, é dado por

$$\Delta(\omega) = \Delta_0(\omega - \Sigma(\omega)), \quad (3.28)$$

onde  $\Sigma(\omega)$  é a autoenergia (para tratar o “hopping”) e  $\Delta_0(\omega)$  corresponde ao banho efetivo na ausência de desordem. Este último pode ser escrito em termos da função de Green do caso limpo como

$$\Delta_0(\omega) = \omega - \frac{1}{G_0(\omega)}, \quad (3.29)$$

obtida tomando  $\epsilon_i = 0$  na equação 3.26.

A função de Green sem desordem  $G_0(\omega)$ , no caso mais geral, é dada pela transformada de Hilbert da densidade de estados despida  $D(\omega)$ , ou seja,

$$G_0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{D(\omega')}{\omega - \omega'}. \quad (3.30)$$

A função de Green correspondente à densidade de estados típica também é dada pela transfor-

mada de Hilbert e escrita como:

$$G_{tip}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\rho_{tip}(\omega')}{\omega - \omega'}. \quad (3.31)$$

onde  $\rho_{tip}(i\omega)$  é calculada pela equação 3.25.

Finalmente, a relação de autoconsistência é fechada pela condição de que a função de Green do meio efetivo seja igual à função de Green típica [24], logo

$$G_{mef}(\omega) = G_0(\omega - \Sigma(\omega)) = G_{tip}(\omega). \quad (3.32)$$

Para a rede de Bethe, em que a densidade de estados  $D(\omega)$  é dada pela equação 2.33, resolvendo-se a 3.30 e substituindo na 3.29, temos

$$\Delta_0(\omega) = t^2 G_0(\omega). \quad (3.33)$$

Assim, usando a 3.28 e 3.32, temos

$$\begin{aligned} \Delta(\omega) &= t^2 G_0(\omega - \Sigma(\omega)) \\ \Delta(\omega) &= t^2 G_{tip}(\omega). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Temos assim o cálculo autoconsistente:

1. Chutamos um banho  $\Delta(\omega)$ ;
2. calculamos as funções de Green locais usando a 3.26;
3. calculamos  $G_{tip}(\omega)$  usando a 3.31;
4. obtemos um novo banho usando 3.34;
5. continuamos o cálculo até obter a convergência.

## 4 *INTERAÇÃO ELÉTRON-ELÉTRON E DESORDEM*

Neste capítulo abordaremos o comportamento não-líquido de Fermi observado em sistemas correlacionados e desordenados, como os semicondutores dopados, discutidos na introdução desta dissertação. No nosso caso esse comportamento é visto na fase de Griffiths, que será detalhada mais adiante. Estudaremos também as equações da TCMD para o modelo da rede de Anderson, apresentadas no capítulo 2, para o caso em que a desordem está presente. Discutiremos como este modelo pode ser resolvido com o intuito de descrever o comportamento não-líquido de Fermi.

### 4.1 *Comportamento Não-Líquido de Fermi*

A teoria do líquido de Fermi de Landau prevê determinadas dependências com a temperatura de quantidades observáveis fisicamente em temperaturas suficientemente baixas (frequentemente  $T \leq 1\text{K}$ ). Por exemplo, o calor específico  $C$  dividido pela temperatura tende a uma constante, a susceptibilidade magnética também torna-se independente da temperatura, e a resistividade  $\rho$  comporta-se como  $\rho_0 + AT^2$ , onde  $\rho_0$  é a resistividade residual extrínseca e  $A$  é uma constante positiva,  $A > 0$ . A teoria do líquido de Fermi também prevê que as grandezas mensuráveis de metais a baixas temperaturas, como a condutividade elétrica por exemplo, apresentam resposta de curto alcance das interações entre os elétrons tanto no espaço quanto no tempo. Compostos que apresentam comportamento diferente do apresentado acima são chamados de compostos com comportamento não-líquido de Fermi (NFL). Nesse caso, a susceptibilidade magnética  $\chi(T)$  e o calor específico dividido pela temperatura  $C(T)/T$  divergem de forma logarítmica ou como lei de potência quando  $T \rightarrow 0$ , e  $\rho(T)$  varia linearmente com a temperatura  $T$ , por exemplo. Esse comportamento foi abordado através de resultados experimentais nas figuras da introdução.

Nesta seção, apresentaremos o comportamento não líquido de Fermi observado experimen-

talmente em muitos compostos, como as ligas de férmions pesados<sup>1</sup> por exemplo, que são chamados assim por causa da suas propriedades termodinâmicas, magnéticas, e de transporte corresponderem a aquelas de um gás de elétrons sem interação, no qual teria se alterado simplesmente a massa. Esta massa renormalizada é grande e leva o nome de “massa efetiva”, e traduz o fato das interações entre elétrons ou com os átomos do cristal alterarem a mobilidade dos elétrons de condução. Tal comportamento aparece em compostos que apresentam elementos da série dos actinídios e terras raras, que possuem as camadas d ou f incompletas. Este comportamento tem despertado a atenção de muitos pesquisadores em decorrência da física dele ser pouco estudada. As interações elétron-elétron apresentam respostas de longo alcance quando  $T \rightarrow 0$  devido à desordem, o que inibe o comportamento líquido de Fermi.

Diferentes abordagens foram propostas para explicar o comportamento não líquido de Fermi. Dentre elas há os modelos baseados na presença de desordem, que são os que daremos mais atenção. Exemplos de compostos de férmions pesados em que a desordem desempenha um

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

Tabela 3: Exemplos de ligas desordenadas de férmions pesados que exibem comportamento NFL. A,  $a > 0$  e  $\lambda < 1$ ; \*  $x = 1$  e  $x = 1.5$ ; \*\*  $x = 0.2 - 0.4$ . Tabela da referência [17].

papel dominante no aparecimento do comportamento NFL, juntamente com o comportamento observado experimentalmente, estão presentes na tabela 3.

Um dos modelos teóricos que é muito utilizado no estudo dos férmions pesados é o modelo da rede de Anderson, que apresentamos no capítulo 2. O Hamiltoniano do modelo é dado pela equação 2.25, com a diferença que este aqui engloba tanto a interação elétron-elétron quanto a desordem, introduzida através da energia local  $\epsilon_j$  na banda de condução. No limite Kondo o

$$\begin{aligned}
H_{And} = & -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{j\sigma} (\epsilon_j - \mu) c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \\
& + V \sum_{j\sigma} (c_{j\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + f_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}) + E_f \sum_{j\sigma} f_{j\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + U \sum_j f_{j\uparrow}^\dagger f_{j\uparrow} f_{j\downarrow}^\dagger f_{j\downarrow}. \quad (4.1)
\end{aligned}$$

modelo da rede de Anderson recai no modelo da rede de Kondo [26], cujo Hamiltoniano é

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{i\alpha\beta} J_i \vec{S}_i \cdot (c_{i\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta}), \quad (4.2)$$

<sup>1</sup>Discutiremos o comportamento não-líquido de Fermi para férmions pesados porque, historicamente, as estensões da TCMD foram primeiramente utilizadas para descrever esse comportamento nessas ligas.

onde  $c_{\vec{k}\sigma}^\dagger$  ( $c_{\vec{k}\sigma}$ ) cria (destrói) um elétron no espaço recíproco com energia  $\epsilon_{\vec{k}}$  e spin  $\sigma$ , e  $c_{i\alpha}^\dagger$  e  $c_{i\beta}$  são operadores correspondentes aos anteriores no espaço real,  $\vec{S}_i$  representa um spin no sítio  $i$ ,  $J_i$  é a constante de acoplamento entre o spin do sítio  $i$  e o banho dos elétrons de condução, que pode mudar de sítio para sítio,  $\vec{\sigma}$  são as matrizes de Pauli [17]. Para o caso sem desordem, o acoplamento  $J$  constante entre os spins locais e o banho dos elétrons de condução é constante e é dado por

$$J = 2V^2 \left[ \frac{1}{E_f} + \frac{1}{|E_f + U|} \right], \quad (4.3)$$

em termos dos parâmetros do modelo de Anderson.

Cada sítio possui uma temperatura característica, chamada de temperatura Kondo e denotada por  $T_K$ , dada por

$$T_K \approx E_F \exp\left(-\frac{1}{\rho_0 J}\right), \quad (4.4)$$

onde  $E_F$  é a energia de Fermi e  $\rho_0$  é a densidade de estados dos elétrons de condução na superfície de Fermi. Dessa maneira, uma distribuição do parâmetro local  $J$  leva a uma distribuição da temperatura Kondo,  $P(T_K)$ . Por se tratar de uma relação exponencial entre  $T_K$  e  $J$ , mesmo para uma distribuição estreita de  $J$ , temos uma distribuição de  $P(T_K)$  correspondente bem larga, permitindo  $P(T_K) \neq 0$  quando  $T_K \rightarrow 0$ .

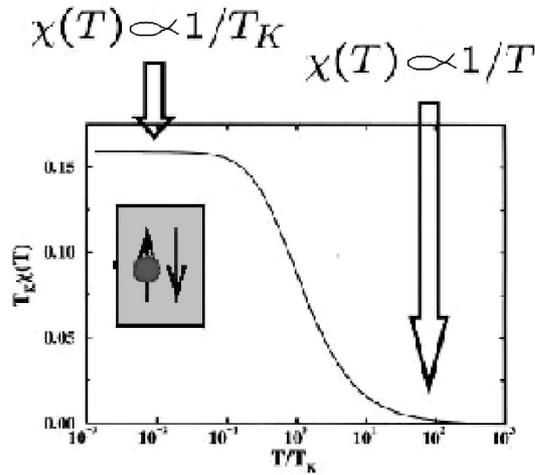


Figura 18: Susceptibilidade magnética em função da temperatura para o problema Kondo de uma única impureza (obtida exatamente usando o “Ansatz” de Bethe) [26].

Em cada sítio a susceptibilidade magnética apresenta dois comportamentos distintos com a variação da temperatura,  $T$ , como apresentado na figura 18. Para  $T_K < T$ , que corresponde à região à esquerda da figura 18, o spin local acopla com o spin resultante do banho formando um estado singlete [26]. Já para  $T > T_K$ , que corresponde à região à direita da figura 18,

a susceptibilidade apresenta um decaimento acentuado, os spins locais se comportam como elétrons livres, apresentando um comportamento singular quando  $T \rightarrow 0$ .

A susceptibilidade magnética do sistema pode ser obtida pela média da resposta de um spin sobre a distribuição  $P(T_K)$ , considerando os spins como independentes. Como visto na figura 18, o comportamento é dado pela lei de Curie,  $\chi(T) \approx 1/T$ , para  $T \gg T_K$  e tende a uma constante,  $\chi(T) \approx 1/T_K$ , quando  $T_K \rightarrow 0$  e um estado singleto é formado entre o spin e os elétrons de condução, pelo efeito Kondo [26]. Assim, a susceptibilidade para cada spin é dada aproximadamente por

$$\chi(T; T_K) = \frac{C}{T + aT_K}, \quad (4.5)$$

onde  $C$  e  $a$  são constantes e  $a \approx 1$ , e a resposta do sistema como um todo é dada pela susceptibilidade média, dada por

$$\langle \chi(T) \rangle = \int dT_K P(T_K) \frac{C}{T + aT_K}. \quad (4.6)$$

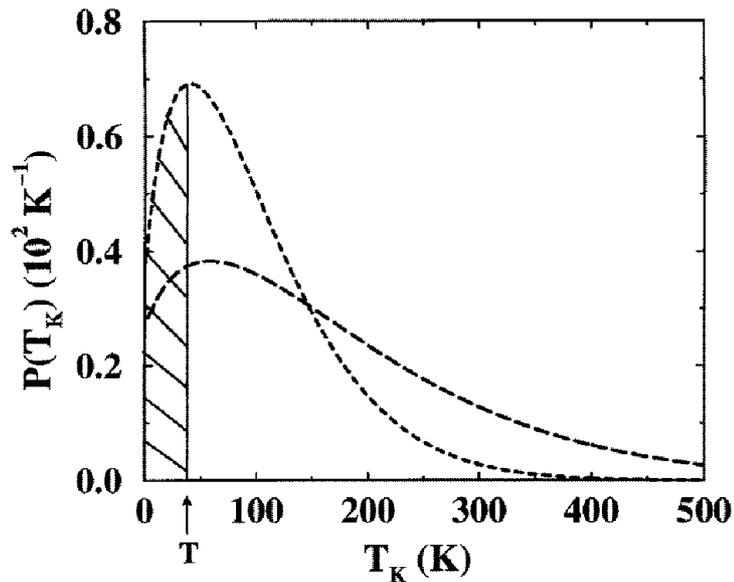


Figura 19: Distribuição de temperaturas Kondo obtidas dentro do modelo da rede de Anderson a partir da análise de compostos de férmions pesados  $UCu_{5-x}Pd_x$ . Spins com  $T_K < T$  (área hachurada) dominam a resposta termodinâmica [18].

Analisando a figura 19 podemos ver que, numa dada temperatura  $T$  em que se encontra a amostra, existem spins que possuem  $T < T_K$ , formando um singleto com o banho de elétrons de condução, e outros com  $T > T_K$ , que se comportam como se fossem aproximadamente livres, e estão na região hachurada mostrada na figura 19. Esses últimos têm uma contribuição dada pela lei de Curie, como visto na figura 18, dominam a susceptibilidade do sistema no limite de

baixas temperaturas. Isso é fácil de ver se reescrevermos a susceptibilidade dessa forma

$$\langle \chi(T) \rangle \approx \int_{\text{região hachurada}} dT_K P(T_K) \frac{Q_1}{T} + \int_{\text{restante}} dT_K P(T_K) \frac{Q_2}{T_K}, \quad (4.7)$$

onde  $Q_1$  e  $Q_2$  são constantes, e sabido que  $T$ , a temperatura do sistema, é mantida constante. No limite de baixas temperaturas o segundo termo do lado esquerdo da equação 4.7 tende a uma constante, enquanto o primeiro diverge nesse limite, dando origem ao comportamento NLF, pois a susceptibilidade do sistema como um todo diverge. Esse comportamento NLF geralmente se apresenta antes de uma transição metal-isolante como uma região que sinaliza que a transição está próxima. Essa região é também chamada de fase eletrônica de Griffiths pela existência dos dois tipos de spins: os que se comportam como livres e os que formam um singlete com os elétrons de condução.

## 4.2 Modelo Efetivo para a Fase Eletrônica de Griffiths

O aparecimento da fase eletrônica de Griffiths, região de comportamento não líquido de Fermi, se deve à presença de desordem no sistema, como discutido na seção anterior. Dentro da TCMD estatística, ela tem se estabelecido como um fenômeno universal, devido ao seu aparecimento independentemente do tipo de distribuição da desordem. Quando a desordem e a interação elétron-elétron estão presentes, o comportamento NFL aparece sempre antes da transição metal-isolante como um sinal anunciando a transição induzida por desordem ou interação elétron-elétron. Na referência [27], um simples modelo efetivo é construído e resolvido dentro da TCMD, mostrando como capturar todos os aspectos quantitativos e qualitativos da fase de Griffiths com menor esforço computacional do que o exigido pela TCMD estatística.

O modelo considerado é o da rede de Anderson desordenado. O Hamiltoniano dele foi dado na equação 4.1 do início deste capítulo. Consideramos que a energia local,  $\epsilon_j$ , introduzida na banda de condução, obedece uma distribuição gaussiana da forma

$$P(\epsilon_j) = (2\pi W^2)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{1}{2} \epsilon_j^2 / W^2\right], \quad (4.8)$$

onde  $W$  é o desvio padrão da distribuição. O motivo da escolha de uma distribuição da forma gaussiana será explicado adiante. No caso desordenado, as funções de Green para os elétrons

de condução e elétrons tipo  $f$  são

$$G_c(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{V^2 \left[ i\omega_n + \mu - \epsilon_j - \epsilon_{\vec{k}} - \frac{1}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_{fj}(i\omega_n)} \right]}, \quad (4.9)$$

$$G_f(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{V^2 \left[ i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_{fj}(i\omega_n) - \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_j - \epsilon_{\vec{k}}} \right]}, \quad (4.10)$$

em que  $\epsilon_{\vec{k}}$  é a transformada de Fourier do “hopping”  $t$ , correspondendo à dispersão dos elétrons de condução,  $\Sigma_{fj}(i\omega_n)$  é autoenergia do sítio  $j$ .

Para resolver estas equações, usamos a aproximação de  $U \rightarrow \infty$  no Hamiltoniano da equação 4.1 e, seguindo a TCMD, nos concentramos num sítio  $j$  com um elétron  $f$  e integramos sobre o banho dos elétrons de condução. Assim obtemos a ação efetiva para o elétron  $f$  no sítio  $j$

$$S_{imp}(j) = \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' f_{j\sigma}^{\dagger}(\tau) [\delta(\tau - \tau') (\partial_{\tau} + E_f) + \Delta_{fj}(\tau - \tau')] f_{j\sigma}(\tau'). \quad (4.11)$$

Aqui, devido à aproximação de  $U$ , a equação 4.11 não apresenta qualquer termo correspondente a  $U$ . A função de hibridização  $\Delta_{fj}(i\omega_n)$  entre os elétrons tipo  $f$  e os elétrons de condução é dada por

$$\Delta_{fj}(i\omega_n) = \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - \epsilon_j - \Delta_c(i\omega_n)}. \quad (4.12)$$

em que  $\Delta_c(i\omega_n)$  representa o banho dos elétrons de condução. Como temos vários valores para  $\epsilon_j$ , para cada um deles temos que resolver um problema de uma impureza.

Uma das condições exigidas pela TCMD é que a função de Green local coincida com a função de Green do problema auxiliar, como foi mostrado na equação 2.29. Dentro dessa descrição, as funções de Green locais (independentes de  $\vec{k}$ ) são dadas por

$$G_c(i\omega_n) = \frac{1}{V^2 \left[ i\omega_n + \mu - \epsilon_j - \Delta_c(i\omega_n) - \frac{1}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_{fj}(i\omega_n)} \right]}, \quad (4.13)$$

$$G_f(i\omega_n) = \frac{1}{V^2 \left[ i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_{fj}(i\omega_n) - \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_j - \Delta_c(i\omega_n)} \right]}. \quad (4.14)$$

O banho dos elétrons de condução assume uma forma simples no caso particular da rede de Bethe, em que a densidade de estados é semicircular, como é visto na equação 2.33. Todos os fatores qualitativos são independentes da forma da rede, e os resultados quantitativos dependem fracamente da estrutura eletrônica da banda para o caso de desordem fraca. Para a rede de Bethe  $\Delta_c(i\omega_n) = t^2 \bar{G}_c(i\omega_n)$ , onde  $\bar{G}_c(i\omega_n)$  é a função de Green média dos elétrons de condução.

Substituindo  $\Delta_c(i\omega_n)$  para a rede de Bethe e tomando a média, obtemos a seguinte equação autoconsistente para a função de Green média

$$\begin{aligned}\bar{G}_c(i\omega_n) &= \langle [i\omega_n + \mu - \epsilon_j - t^2 \bar{G}_c(i\omega_n) - \Phi_j(i\omega_n)]^{-1} \rangle, \quad \text{onde} \\ \Phi_j(i\omega_n) &= \frac{V^2}{i\omega_n + \mu - E_f - \Sigma_{fj}(i\omega_n)},\end{aligned}\quad (4.15)$$

que é similar à equação 3.11, da CPA.  $\Phi_j(i\omega_n)$  corresponde à desordem efetiva vista pelos elétrons de condução, enquanto  $\epsilon_j$ , representa a desordem despida (aquela que aparece no Hamiltoniano da equação 4.1). Com isso conclui-se que, dentro da TCMD, o problema da rede de Anderson desordenada é mapeado num conjunto de problemas de uma impureza, suplementado por uma condição de autoconsistência.

$\Sigma_{fj}(i\omega_n)$  é a autoenergia do problema de uma impureza no sítio  $j$ , que, pela equação 4.14, pode ser reescrita como

$$\Sigma_{fj}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - E_{fj} - \Delta_{fj}(i\omega_n) - G_f^{-1}(i\omega_n). \quad (4.16)$$

Existem vários métodos para se resolver o problema de uma impureza, dentre eles o método de bósons escravos, discutido na seção 2.3. Nele a função de Green dos elétrons tipo  $f$ , é dada por

$$\begin{aligned}G_f(i\omega_n) &= ZG_{\tilde{f}}(i\omega_n) \\ G_f(i\omega_n) &= \frac{Z}{i\omega_n - \tilde{\epsilon}_f - Z\Delta_{fj}(i\omega_n)},\end{aligned}\quad (4.17)$$

onde  $Z$  e  $\tilde{\epsilon}_f$  são soluções das equações 2.53 e 2.54. Note que o numerador da equação 4.17 é crucial. Ele é a consequência da presença dos bósons escravos na equação 2.38, e diferencia  $G_f(i\omega_n)$  da função de Green dos elétrons tipo  $\tilde{f}$ . Finalmente, usando a equação 4.16, podemos reescrever a expressão para a autoenergia dos elétrons tipo  $f$  como

$$\Sigma_{fj}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - E_f - \Delta_{fj}(i\omega_n) - \frac{i\omega_n + \mu - \tilde{\epsilon}_f - Z\Delta_{fj}(i\omega_n)}{Z}. \quad (4.18)$$

Essa pode ser introduzida na equação 4.15, simplificando a expressão para a desordem efetiva como

$$\Phi_j(i\omega_n) = \frac{ZV^2}{i\omega_n - \tilde{\epsilon}_f}, \quad (4.19)$$

que passa a ser calculada diretamente a partir dos parâmetros de bósons escravos.

A formulação original da TCMD não é capaz de descrever a fase de Griffiths em todos os sistemas desordenados e correlacionados; ela é capaz de fazê-lo apenas se alguns parâmetros forem cuidadosamente escolhidos para tal [18]. A partir da formulação da TCMD estatística viu-se que a emergência da fase eletrônica de Griffiths é um fenômeno universal em sistemas

correlacionados e desordenados [28]. Com base nessa universalidade, o modelo efetivo para a fase de Griffiths foi proposto. O modelo efetivo baseia-se na resolução do modelo usando a TCMD original com uma escolha particular da distribuição da desordem envolvida, escolha feita com o objetivo de complementar a TCMD original na descrição da fase eletrônica de Griffiths.

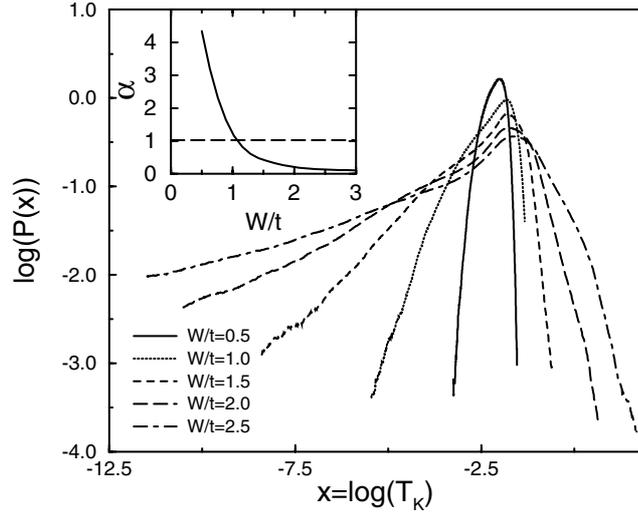


Figura 20: Distribuição de  $T_K$  (dada em unidades de  $t$ , ou seja, temos no eixo  $x$  da figura  $\log(T_K/t)$ ) à medida que a desordem aumenta. O comportamento linear observado para  $T_K$  pequeno implica que  $P(T_K)$  segue uma lei de potência. Na figura inserida é apresentado o expoente  $\alpha$  em função da desordem [29].

Quando ambas, interações e correlações estão presentes, o comportamento não líquido de Fermi emerge universalmente, como mencionado acima. Essa distribuição possui uma cauda, para  $T_K$  pequeno, como mostrado na figura 20, da forma de uma lei de potência,  $P(T_K) \sim T_K^{\alpha-1}$ , que independe dos detalhes microscópicos ou da forma específica da desordem presente. O expoente  $\alpha$  diminui com o aumento da desordem  $W$ , e o comportamento não líquido de Fermi surge para  $W$  maior que o valor crítico correspondente a  $\alpha = 1$ , em que  $P(T_K)$  torna-se singular na região de  $T_K$  pequeno [29]. De fato, para uma distribuição  $P(T_K) \sim T_K^{\alpha-1}$ , a susceptibilidade do sistema é

$$\chi(T) \sim \int_0^\Lambda \frac{T_K^{(\alpha-1)}}{T + aT_K} dT_K \sim \frac{1}{T^{(1-\alpha)}}, \quad (4.20)$$

ou seja, um comportamento NFL é visto para  $\alpha \leq 1$ , como mostrado no gráfico superior da figura 20.

O trabalho intitulado “Modelo efetivo da fase eletrônica de Griffiths” [27] demonstrou que a universalidade no aparecimento da fase eletrônica de Griffiths se deve ao fato da desordem produzir flutuações no banho dos elétrons de condução que adquirem uma distribuição aproxi-

madamente gaussiana independente da forma da desordem considerada. Essas flutuações são vistas pela TCMD estatística porque ela leva em conta no cálculo do banho todas as flutuações locais (o banho  $\Delta_{cj}(\omega)$ , ganha uma dependência com o sítio  $j$ , enquanto que a TCMD toma o banho como uma média.

O quadro (b) da figura 21, mostra a distribuição da parte real das flutuações do banho dos elétrons de condução, ou seja, a distribuição da parte real de  $\delta\Delta_{cj} = \Delta_{cj}(\omega = 0) - \bar{\Delta}_c(\omega = 0)$ , onde  $\bar{\Delta}_c(\omega)$  é o banho médio. Os resultados foram obtidos dentro da TCMD estatística para as distribuições binária e outra uniforme da figura 21(a), que têm o mesmo desvio padrão. Além das distribuições adquirirem uma forma gaussiana, como mencionado acima, a variância de  $P(\delta\Delta_c^R)$  é a mesma nos dois casos. As flutuações  $\delta\Delta_c^R$  podem ser interpretadas como uma renormalização da energia despida  $\epsilon$ . A distribuição de  $\epsilon + \delta\Delta_c^R$  é vista na figura 21(c): e também adquire uma forma gaussiana, com caudas longas, tanto no caso de desordem despida uniforme quanto binária, embora essas distribuições para  $P(\epsilon)$  sejam limitadas.

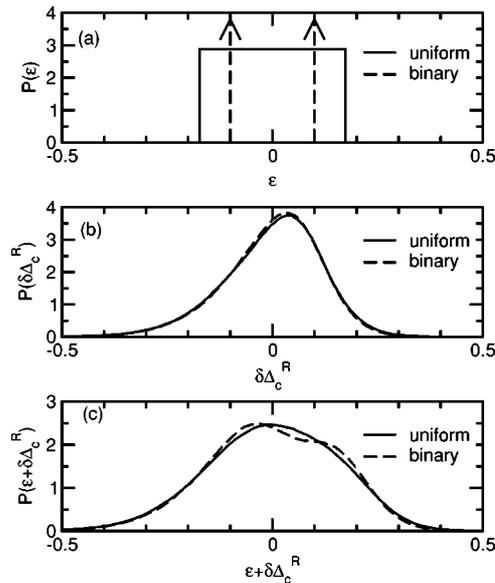


Figura 21: Os painéis (b) e (c) apresentam resultados da TCMD estatística para distribuições binária e uniforme de desordem apresentadas no painel (a). Foram usados  $V = 0.5$ ,  $E_f = -1.0$ ,  $\mu = -0.5$  e desvio padrão da desordem igual a 0.1 nos dois casos [30].

O comportamento visto nos quadros (b) e (c) é crucial para que  $P(T_K)$  tenha um comportamento singular, dando origem ao comportamento NFL [30]. A partir dos resultados da figura 21, em particular o do quadro (c), a solução encontrada para suprir a falha da TCMD na descrição da fase eletrônica de Griffiths foi a de tomar uma distribuição gaussiana da desordem logo de início; essa é a distribuição particular comentada anteriormente, que compõe o modelo efetivo. Embora esta solução tenha sido um sucesso na descrição da fase eletrônica de Griffiths,

ela não é capaz de suprir a falha da TCMD na descrição dos efeitos de localização de Anderson. Por causa disso é que, nesta dissertação, combinamos o modelo efetivo à TMT, ou seja, utilizamos a combinação da TCMD-TMT mais uma distribuição de forma gaussiana da desordem na resolução do modelo de transferência de carga, que será detalhado a seguir.

## 5 RESULTADOS

Como foi dito anteriormente, o objetivo desta dissertação é o de estudar a conjunção entre a interação elétron-elétron e a desordem, incluindo a identificação dos valores de desordem e da energia dos elétrons tipo  $f$ ,  $E_f$ , correspondentes ao aparecimento da fase eletrônica de Griffiths e da transição metal-isolante, para o modelo de transferência de carga.

### 5.1 Modelo de Transferência de Carga

O modelo de transferência de carga é constituído do modelo da rede de Anderson, dado pelo Hamiltoniano da equação 4.1,

$$\begin{aligned}
 H_{And} = & -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{j\sigma} (\epsilon_j - \mu) c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \\
 & + V \sum_{j\sigma} (c_{j\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + f_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}) + E_f \sum_{j\sigma} f_{j\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + U \sum_j f_{j\uparrow}^\dagger f_{j\uparrow} f_{j\downarrow}^\dagger f_{j\downarrow}, \quad (5.1)
 \end{aligned}$$

suplementado pelo vínculo

$$\bar{n}_{fj} + \bar{n}_{cj} = 1, \quad (5.2)$$

onde  $\bar{n}_{fj}$  e  $\bar{n}_{cj}$  são os valores médios das ocupações dos elétrons tipo  $f$  e de condução  $c$  no sítio  $j$ , respectivamente, em que a barra se refere à média sobre a desordem presente. O modelo de transferência de carga se adequa também para casos sem desordem, mas a versão que utilizaremos será a com desordem presente. A versão desordenada é apropriada para descrever a transição metal-isolante nos semicondutores dopados, tais como o Si:P comentado na introdução desta dissertação. Este modelo é constituído de duas bandas, uma estreita, em que as interações elétron-elétron são fortes (elétrons tipo  $f$ ), e outra larga o suficiente para que estas interações sejam desprezadas (elétrons de condução). Nesta dissertação, usamos o método de bósons escravos para resolver os problemas de uma impureza na descrição da teoria de campo médio dinâmico. Nesse caso, podemos reescrever o vínculo da seguinte maneira

$$\bar{Z}_j = \bar{n}_{cj}. \quad (5.3)$$

pois,  $\bar{n}_{fj} = 1 - \bar{Z}_j$  na aproximação de bósons escravos.

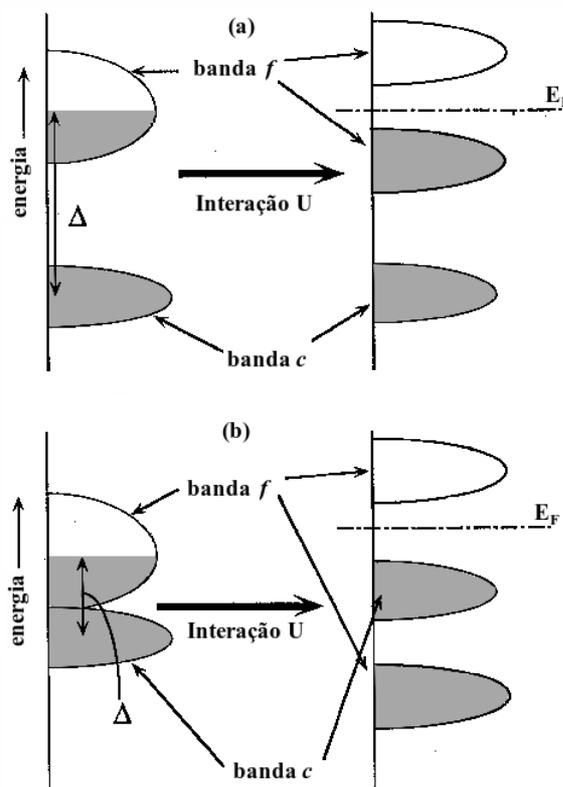


Figura 22: Ilustração esquemática das bandas de energia para (a) um isolante de Mott-Hubbard e (b) um isolante gerado por transferência de carga para efeitos de interação no orbital  $f$  [31].

Num modelo de duas bandas, com banda  $c$  e banda  $f$ , dois tipos de transição metal-isolante podem ocorrer. Uma ocorre quando as bandas estão distantes em energia, ou seja, a diferença de energia  $\Delta$  é maior que a repulsão coulombiana no orbital  $f$ . Neste caso, a transição é chamada de transição de Mott-Hubbard e um gap de carga se abre na banda  $f$ , que é determinado principalmente por  $U$ , ou seja, o isolante é um isolante de Mott. O outro caso ocorre quando  $U > \Delta$  as excitações de carga na fase isolante são determinadas principalmente pela transferência de carga de uma banda para outra, como ilustrado na figura 22(b). Na fase isolante os dois compostos apresentam características similares.

No caso desta dissertação, consideramos o limite em que  $U \rightarrow \infty$ . Além disso, na fase metálica, temos o nível de Fermi na banda identificada como  $c$  na figura 22b, à direita.

Como estamos interessados em descrever a transição metal-isolante e sabemos que essa transição é do tipo delocalização-localização, focamos nossa atenção no número de ocupação dos elétrons de condução, pois quando esse número se aproxima de zero, a transição metal-isolante também se aproxima. Quando o nível de energia dos elétrons tipo  $f$  diminui ( $|E_f|$  aumenta), a ocupação dos sítio  $f$  torna-se maior e a carga é “transferida” da banda de condução.

A transição para o isolante de Mott é obtida para  $|E_f|$  suficientemente grande. Dentro da TCMD, essa transição metal-isolante tem a mesma característica da transição de Mott no modelo de Hubbard [32].

## 5.2 Alterações do Código TCMD-TMT

O cálculo autoconsistente da TCMD utiliza a média aritmética da função de Green local para calcular a função de Green da rede. Devido a isso essa aproximação não é capaz de descrever o fenômeno da localização de Anderson, apesar de descrever bem a transição de Mott. Visando suprimir tal deficiência, se chegou a uma teoria autoconsistente, que descreve a localização de Anderson. Tal teoria é chamada de teoria do meio típico e ela apresenta uma proposta um pouco diferente da TCMD, olhando para o valor típico da densidade de estados em vez do valor médio. Uma das vantagens desse cálculo autoconsistente é a demanda de pouco tempo computacional para ser realizado.

Com o objetivo de obter uma teoria que descreva bem tanto a localização de Anderson quanto a transição de Mott, uma combinação da TCMD com a TMT foi sugerida. Essa combinação se dá através da modificação do algoritmo da TCMD, modificando sua estrutura central. Ao invés de calcular a média aritmética para obter a função de Green da rede, a TCMD-TMT utiliza a densidade de estados típica, obtida através da média geométrica da densidade de estados, que é uma estimativa para o valor típico ou valor mais provável dessa grandeza. A função de Green típica é então calculada a partir da densidade de estados típica pela transformada de Hilbert, que será discutida a frente. Esse cálculo autoconsistente é apresentado de forma esquemática no fluxograma da figura 23.

A figura 23 mostra os passos utilizados pelo código da TCMD combinado com a TMT. Tomando como ponto de partida o código da TCMD<sup>1</sup> as alterações necessárias para combiná-la à teoria do meio típico são o cálculo da densidade típica de estados a partir da média geométrica da densidade de estados local, como explicitado no passo 3 da figura 23, e o cálculo da função de Green típica através da transformada de Hilbert, passo 4 da figura 23. O cálculo dessa transformada, realizado tanto no eixo real quanto no imaginário, foi implementado junto ao código através de uma subrotina. A razão de usarmos ambos os eixos vem do fato da densidade de estados ser calculada a partir do eixo real e do da resolução do problema de uma impureza usando bósons escravos ser mais estável no eixo imaginário do que o do eixo real. Os detalhes dos cálculos realizados pela subrotina que faz a transformada de Hilbert serão descritos nas

---

<sup>1</sup>Este código foi fornecido por minha orientadora.

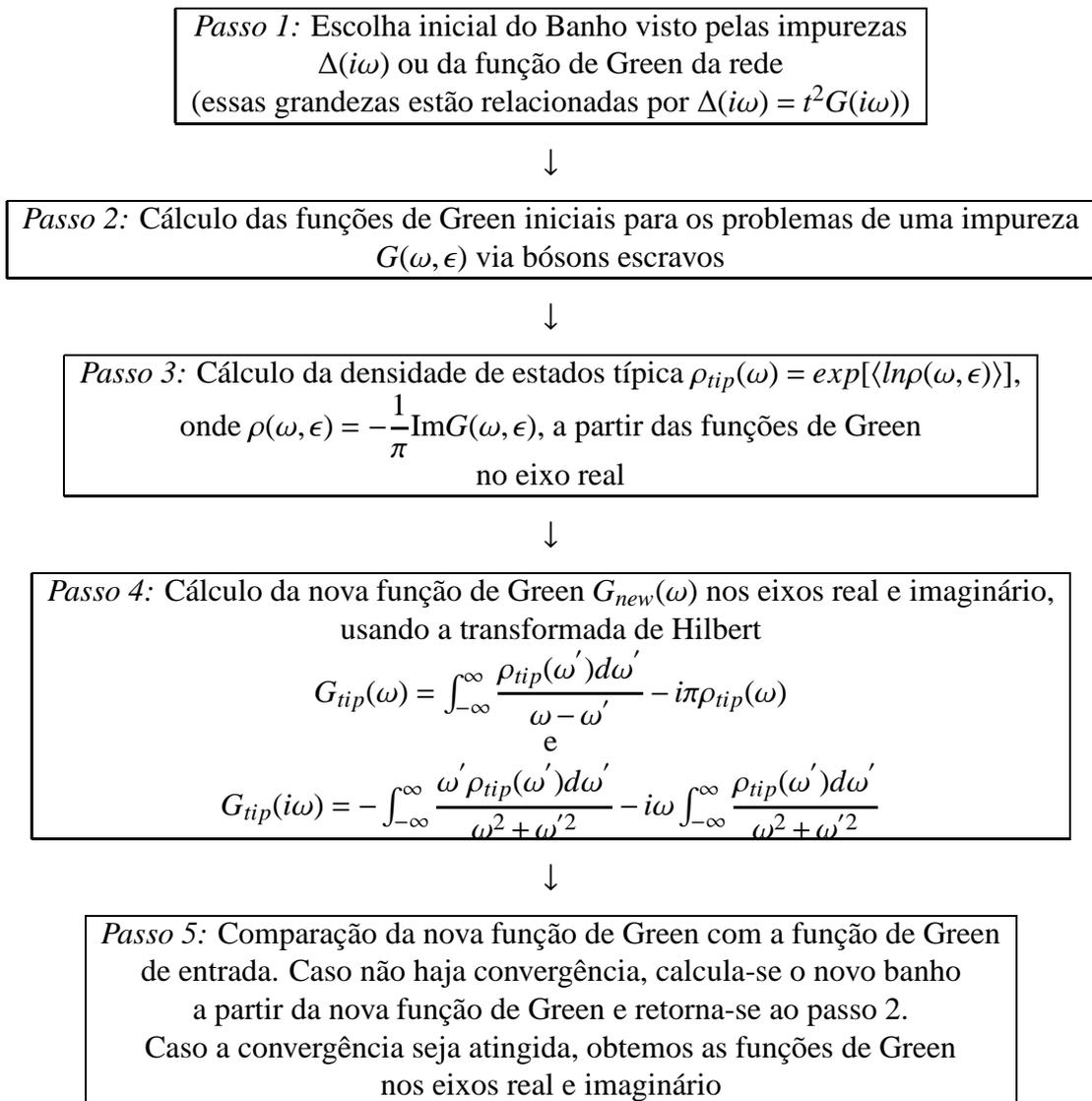


Figura 23: Fluxograma utilizado no cálculo numérico da TCMD-TMT.

próximas seções.

### 5.2.1 Eixo Real

Para realizar o cálculo da função de Green típica no eixo real, a frequência é deslocada do eixo por um  $\eta$  muito pequeno,  $\eta \rightarrow 0$ , que tem o objetivo de fugir de possíveis singularidades sobre o eixo. De acordo com a equação 3.31, a função de Green típica no eixo real é

$$G_{tip}(\omega + i\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{tip}(\omega') d\omega'}{\omega + i\eta - \omega'}. \quad (5.4)$$

Separando-a em parte real e imaginária vem

$$\begin{aligned} G_{tip}(\omega + i\eta) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{tip}(\omega') \times (\omega - i\eta - \omega') d\omega'}{(\omega + i\eta - \omega') \times (\omega - i\eta - \omega')} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\omega - i\eta - \omega') \rho_{tip}(\omega') d\omega'}{\omega^2 - 2\omega\omega' + \omega'^2 + \eta^2}, \\ G_{tip}(\omega + i\eta) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\omega - i\eta - \omega') \rho_{tip}(\omega') d\omega'}{(\omega - \omega')^2 + \eta^2}, \\ G_{tip}(\omega + i\eta) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\omega - \omega') \rho_{tip}(\omega') d\omega'}{(\omega - \omega')^2 + \eta^2} - i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta \rho_{tip}(\omega') d\omega'}{(\omega - \omega')^2 + \eta^2}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Reescrevendo a parte imaginária da equação 5.5, temos

$$G_{tip}(\omega + i\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\omega - \omega') \rho_{tip}(\omega') d\omega'}{(\omega - \omega')^2 + \eta^2} - i\pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta \rho_{tip}(\omega') d\omega'}{\pi[(\omega - \omega')^2 + \eta^2]}, \quad (5.6)$$

Tomando o limite de  $\eta \rightarrow 0$ , temos

$$\begin{aligned} G_{tip}(\omega + i\eta) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{tip}(\omega') d\omega'}{\omega - \omega'} - i\pi \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega - \omega') \rho_{tip}(\omega') d\omega', \\ G_{tip}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{tip}(\omega') d\omega'}{\omega - \omega'} - i\pi \rho_{tip}(\omega). \end{aligned} \quad (5.7)$$

A equação 5.7 é a equação mais geral no eixo real, pois vale tanto para o caso da densidade de estados ser simétrica ou não.

### 5.2.2 Eixo Imaginário

Tomando a função de Green no eixo imaginário, temos

$$G_{tip}(i\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{tip}(\omega') d\omega'}{i\omega - \omega'}. \quad (5.8)$$

Separando na parte real e parte imaginária, temos

$$\begin{aligned}
 G_{tip}(i\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{tip}(\omega') \times (-i\omega - \omega') d\omega'}{(i\omega - \omega') \times (-i\omega - \omega')} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\omega' + i\omega) \times \rho_{tip}(\omega') d\omega'}{\omega^2 + \omega'^2} \\
 G_{tip}(i\omega) &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega' \rho_{tip}(\omega') d\omega'}{\omega^2 + \omega'^2} - i\omega \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{tip}(\omega') d\omega'}{\omega^2 + \omega'^2}.
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

A equação acima é a forma mais geral da função de Green típica no eixo imaginário, válida tanto para densidade de estados simétrica quanto não simétrica. Se a densidade de estados típica for simétrica, a parte real se anula e a função de Green pode ser reescrita como

$$G_{tip}(i\omega) = -2i\omega \int_0^{\infty} \frac{\rho_{tip}(\omega') d\omega'}{\omega^2 + \omega'^2}. \tag{5.10}$$

As equações 5.7 e 5.9 são as funções calculadas pela subrotina da transformada de Hilbert, que, como descrito antes, é uma das alterações feitas no código da TCMD para combiná-la à teoria do meio típico. Outra alteração corresponde ao cálculo da média sobre os problemas de uma impureza, que deixa de ser aritmética e passa a ser geométrica, como na teoria do meio típico. Neste caso, a média é realizada sobre a densidade de estados local, para obtenção do  $\rho_{tip}(\omega)$  do sistema.

### 5.3 Testes Realizados

Realizamos alguns testes a partir do código obtido para a subrotina que confirmam seu funcionamento. Os testes que serão descritos aqui seguiram o seguinte raciocínio: utilizamos funções de Green conhecidas, a partir das quais calculamos a densidade de estados, e então chamamos a subrotina e colhemos as funções de Green de saída, calculadas usando as equações 5.7 e 5.9. O bom funcionamento da subrotina implica em funções de saída iguais às funções de entrada. Para isso testamos duas configurações possíveis, primeiro testamos uma função de Green cuja densidade de estados é simétrica e depois testamos outra função de Green cuja densidade de estados é assimétrica. Vale ressaltar que os testes foram feitos tanto para a função de Green calculada no eixo real quanto para a função de Green calculada no eixo imaginário.

Para a primeira configuração, caso simétrico, utilizamos a densidade de estados ilustrada na figura 24. Nas figuras 25(a) e 25(b) são mostradas as funções de Green de entrada  $G(\omega)$  e de saída  $G_{new}(\omega)$ . Observamos claramente a coincidência entre as funções de entrada e de saída, ou seja, a subrotina da transformada de Hilbert foi capaz de reproduzir a função conhecida sem problemas. O mesmo procedimento foi realizado para o eixo imaginário e a mesma coincidência foi observada entre as funções de entrada e saída, como mostrado nas figuras 26(a) e 26(b). Com

isso concluímos que a subrotina da transformada de Hilbert funciona bem para densidades de estados simétricas, como a usada e ilustrada na figura 24.

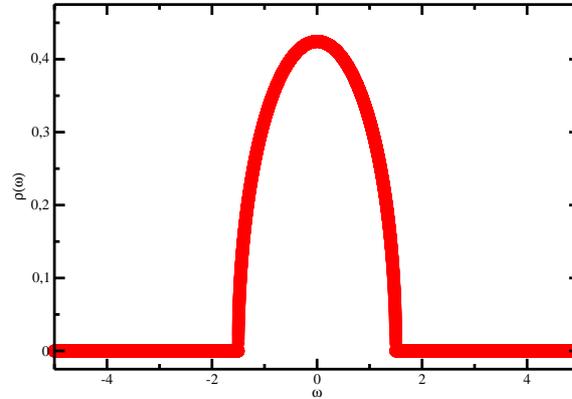


Figura 24: Densidade de estados simétrica e semicircular utilizada no primeiro teste da subrotina.

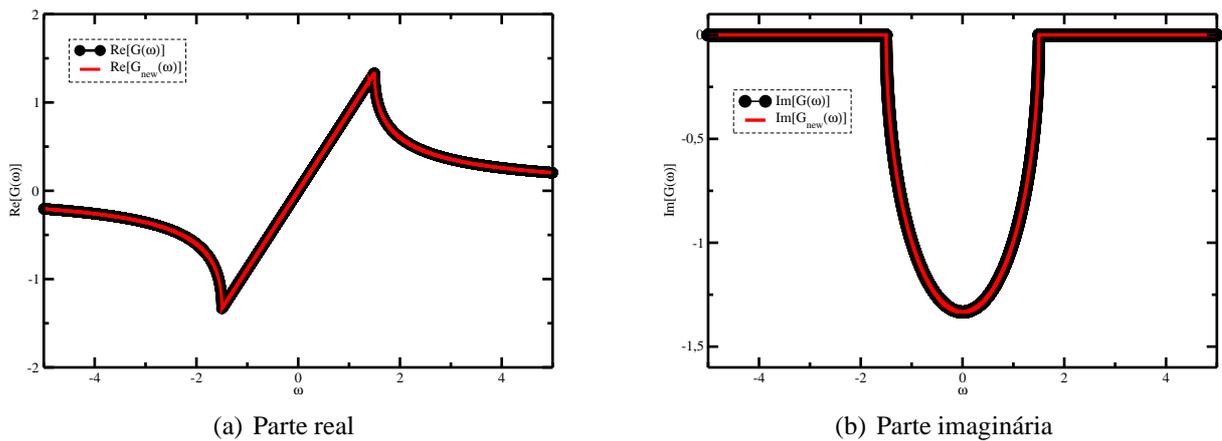


Figura 25: Partes real e imaginária das funções de entrada,  $G(i\omega)$ , e saída,  $G_{new}(\omega)$ , onde  $G_{new}(\omega)$  é obtida pela subrotina da transformada de Hilbert.

Como a subrotina se comportou bem para a densidade de estados simétrica, decidimos testá-la com uma outra função de Green conhecida, cuja densidade de estados é assimétrica. A densidade de estados utilizada é ilustrada na figura 27. Ela apresenta dois picos diferentes em amplitude e forma, um centralizado próximo de -1, de amplitude menor, como ilustrado no “inset” superior da figura 27, e o outro de maior amplitude, centralizado em torno de 1.66, aproximadamente, como mostrado no “inset” inferior da mesma figura. A partir dessa densidade de estados, realizamos o mesmo procedimento do caso simétrico descrito anteriormente, e os gráficos obtidos são ilustrados na figura 25. Novamente, temos concordâncias entre as funções de entrada e saída.

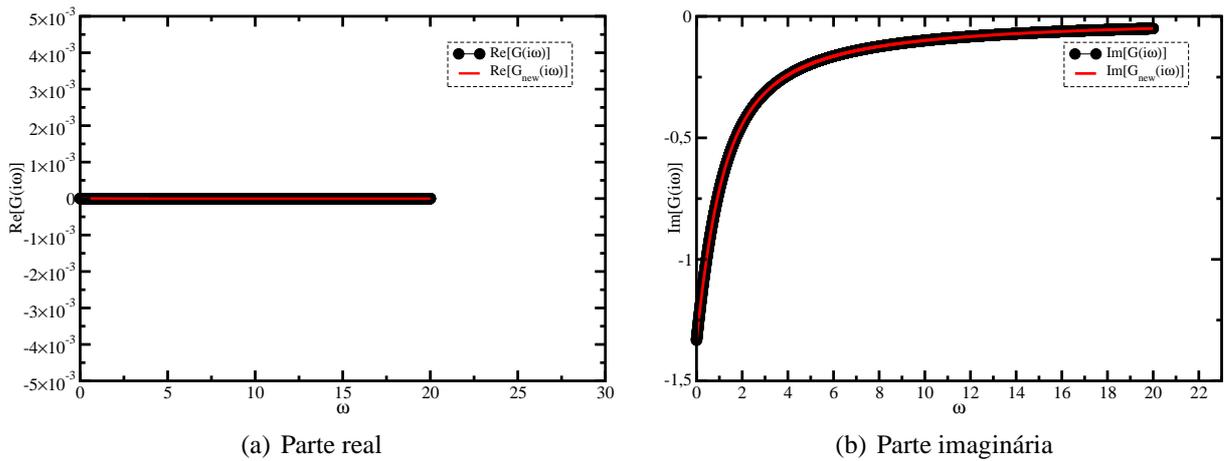


Figura 26: Gráficos das partes real e imaginária das funções de Green de entrada,  $G(i\omega)$ , e de saída  $G_{new}(i\omega)$ , da subrotina da transformada de Hilbert.

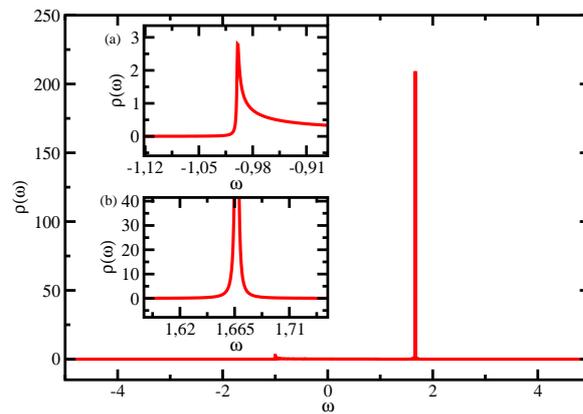


Figura 27: Densidade de estados assimétrica utilizada no segundo teste da subrotina da transformada de Hilbert.

A coincidência entre as funções de Green de entrada e saída, tanto no caso da densidade de estados simétrica quanto no caso da assimétrica, em ambos os eixos, real e imaginário, confirmam o bom funcionamento da subrotina da transformada de Hilbert. Com base nesses testes, partimos para o cálculo autoconsistente da função de Green do nosso problema.

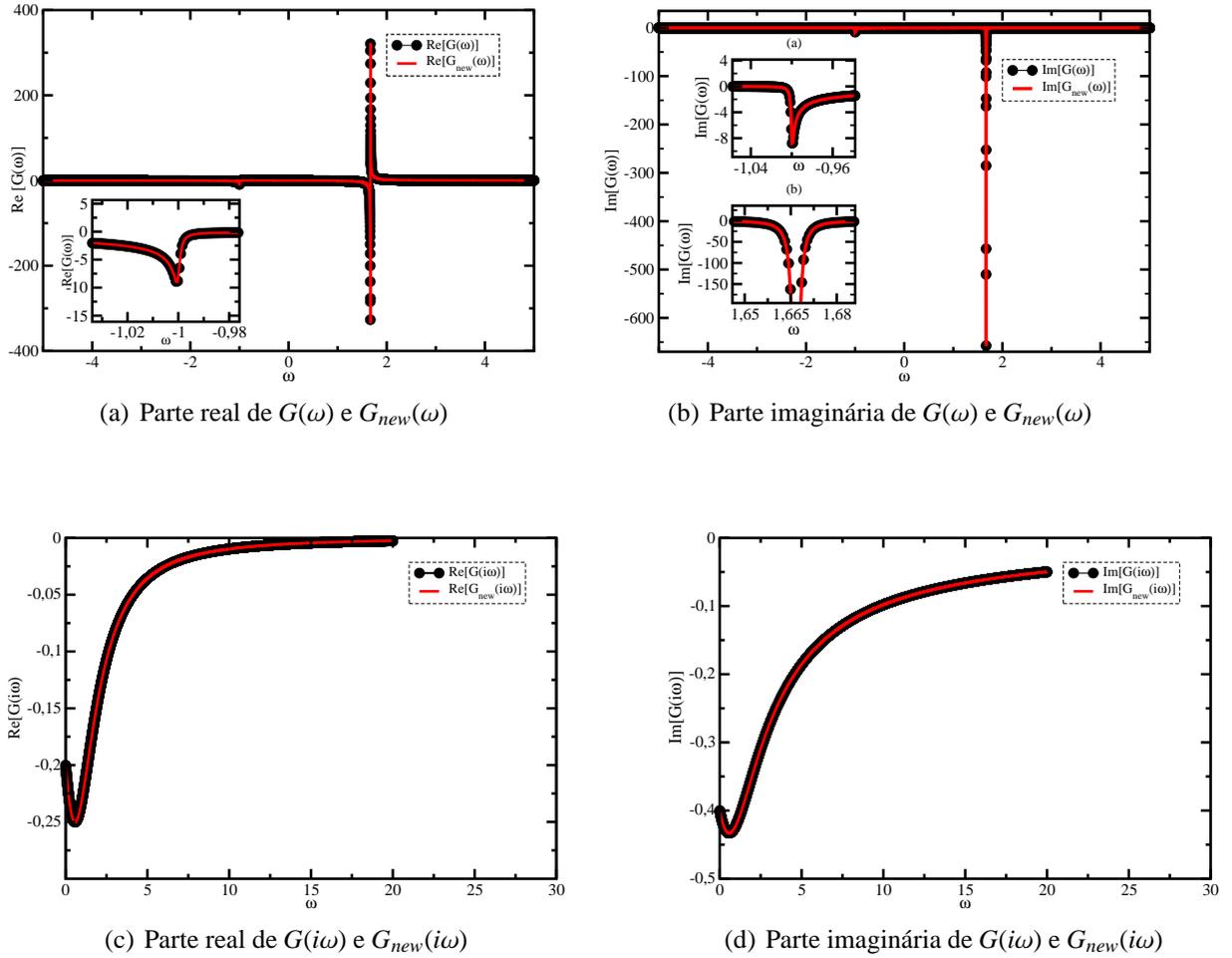


Figura 28: Comparação entre as funções de Green de entrada e de saída da subrotina da transformada de Hilbert para o caso da densidade de estados assimétrica dada na figura 27.

## 5.4 Resultados Obtidos

Como foi dito antes, o objetivo deste trabalho é o de resolver o problema da rede de Anderson, correlacionada e desordenada, suplementado pela condição apresentada na seção 5.1, ou seja, resolver o modelo de transferência de carga, com o intuito de descrever a fase eletrônica de Griffiths e a transição metal-isolante. Com base nisso, iniciamos os cálculos numéricos para diferentes valores de desordem, mantendo a energia dos elétrons tipo  $f$  fixa,  $E_f = -1.3$ , e depois variamos  $E_f$  desde valores bem pequenos até a transição metal-isolante, mantendo a desordem fixa,  $W = 1.5$ . Em ambos os casos utilizamos o potencial de hibridização constante,  $V = 0.5$ . Os cálculos foram realizados em temperatura nula, para uma rede de Bethe com número de coordenação  $\rightarrow \infty$ , cuja densidade de estados quando  $U = 0$  é semicircular, variando de  $-D$  a  $D$ . A unidade de energia que utilizamos é  $D = 1$ . Logo, todas as grandezas apresentadas a seguir são apresentadas nessa unidade, onde se lê  $Z$ , por exemplo, temos, na verdade,  $Z/D$ .

Antes de iniciarmos a apresentação dos resultados obtidos, é importante acrescentar que foram realizados testes para diferentes números de sítios na rede e que observamos que não houve mudança significativa nos resultados. Foram testados sistemas com 61, 201, e 1101 sítios e os resultados obtidos foram praticamente os mesmos, como mostrado no gráfico da figura 29. Em decorrência dessa concordância, resolvemos utilizar 61 sítios, dado que o número menor de sítios gasta menos tempo computacional.

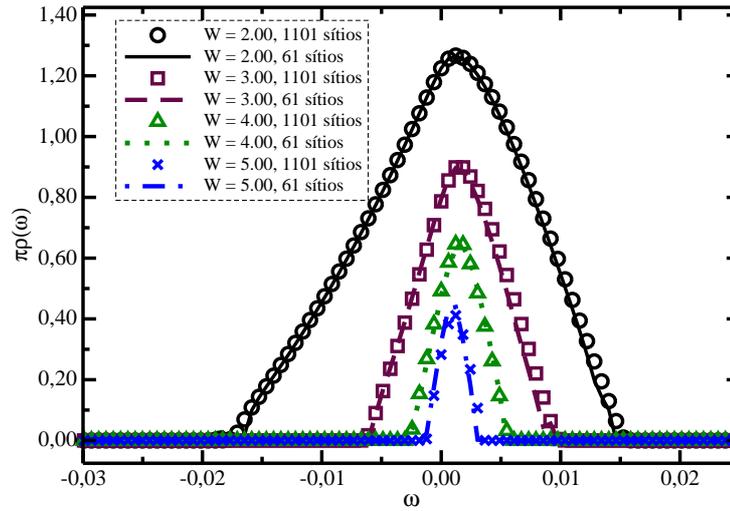


Figura 29: Gráfico comparativo da densidade de estados para diferentes valores de desordem e dois números de sítios bem distintos.

### 5.4.1 Desordem Variável

A partir da variação da desordem, mantendo a energia dos elétrons tipo  $f$  fixa,  $E_f = -1.3$ , olhamos para a densidade de estados típica dos elétrons de condução como parâmetro de ordem na distinção entre as fases metálica e isolante. Essa escolha se deve ao fato da densidade de estados ser facilmente obtida da parte imaginária da função de Green do sistema, além dela estar diretamente relacionada a outras grandezas, como a condutividade elétrica ou a taxa de espalhamento,  $\tau^{-1} \sim t^2 \rho$ , onde  $t$  é a amplitude de “hopping”.

Como foi discutido anteriormente, a TCMD não é capaz de descrever a localização de Anderson, pois ela faz uma média aritmética e por isso não enxerga as flutuações locais. Ao utilizar a combinação TCMD-TMT, a localização de Anderson é observada: o aumento da desordem facilita a localização de Anderson e para uma desordem crítica ocorre uma transição metal-isolante, como mostrado no gráfico da figura 30.

No gráfico da figura 30, são apresentadas as densidades de estados média e típica dos elé-

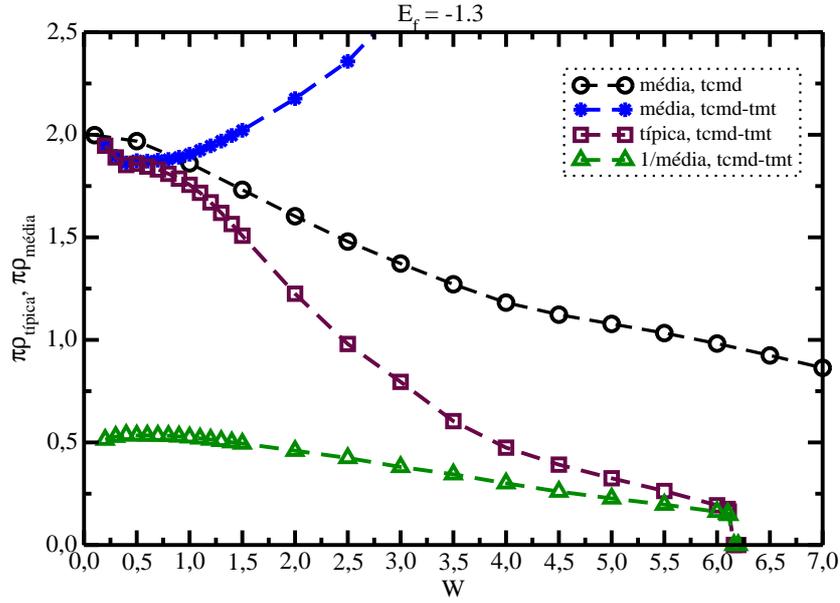


Figura 30: Densidade de estados típica e média no nível de Fermi em função da desordem obtidos com a TCMD e com a TCMD-TMT.

trons de condução em  $\omega = 0$ , obtidas pela TCMD-TMT, e a densidade de estados média obtida pela TCMD, para diferentes valores de desordem. Na região de baixa desordem, os valores médios e típicos da densidade de estados são coincidentes para a TCMD-TMT. Já para desordem intermediária os valores são bem distintos. A densidade de estados média cresce muito rapidamente com o aumento da desordem; por conta disso é mostrada a curva do seu inverso, que corresponde à curva inferior da figura. Próximo à transição, vemos que tanto a densidade de estados típica quanto o inverso da média para a TCMD-TMT vão a zero juntas, caracterizando a transição metal-isolante. Esperava-se que essa transição ocorresse de forma contínua, de acordo com o comportamento observado em resultados não publicados obtidos com TCMD estatística. Porém isso não foi observado, pois, como mostrado no gráfico da figura 30, a transição ocorre de forma descontínua, com um salto, quando a desordem é um pouco maior que  $W = 6.0$ . Outro detalhe observado é que a densidade de estados típica é sempre menor ou igual à densidade de estados média, o que é coerente, visto que a densidade de estados média é calculada por uma média aritmética, enquanto que a típica é obtida através da média geométrica. Como comentado antes, a TCMD não descreve a transição, pelo fato de não enxergar efeitos de localização de Anderson, fato que é observado no gráfico, pois, mesmo para valores maiores de desordem como  $W = 6.5$ , a densidade de estados continua com valores altos e praticamente estável.

Cada ponto do gráfico da figura 30 é obtido a partir do valor típico da densidade de estados em frequência nula,  $\omega = 0$ , correspondente ao nível de Fermi. Para observarmos como a densidade de estados típica se comporta com o aumento da desordem, a figura 31 mostra a densidade

de estados  $\rho(\omega)$  em função da frequência  $\omega$ .

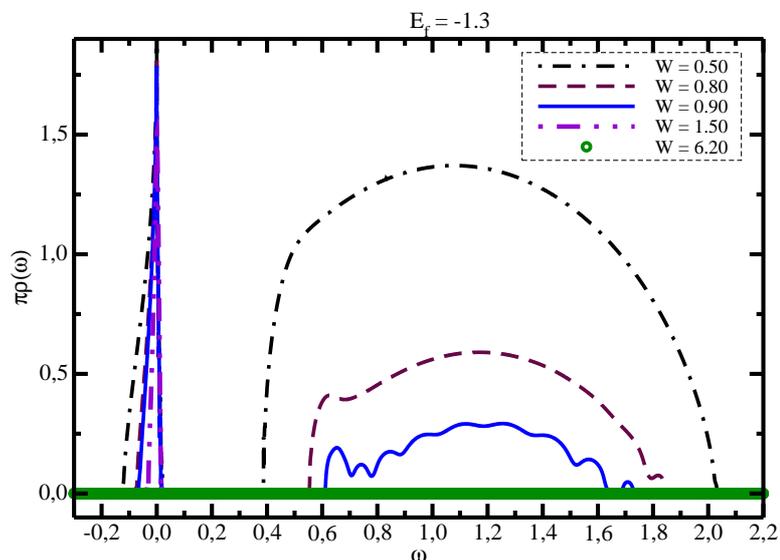


Figura 31: Densidade de estados típica em função da frequência para diferentes valores de desordem obtida com a TCMD-TMT.

Na figura 31 a densidade de estados apresenta duas bandas, uma mais estreita, com pico situado próximo de  $\omega = 0$ , e outra larga, situada em  $\omega > 0$  e presente apenas para valores pequenos de desordem, ambas separadas por um gap. A banda mais larga é vista apenas para valores de desordem inferiores a 1.5, como mostrado na figura 32(b), indo a zero a partir de  $W \approx 1.5$ . Já a banda estreita, mostrada na figura 32(a), apresenta forma assimétrica e diminui em largura e altura à medida que a desordem aumenta, indo a zero na transição.

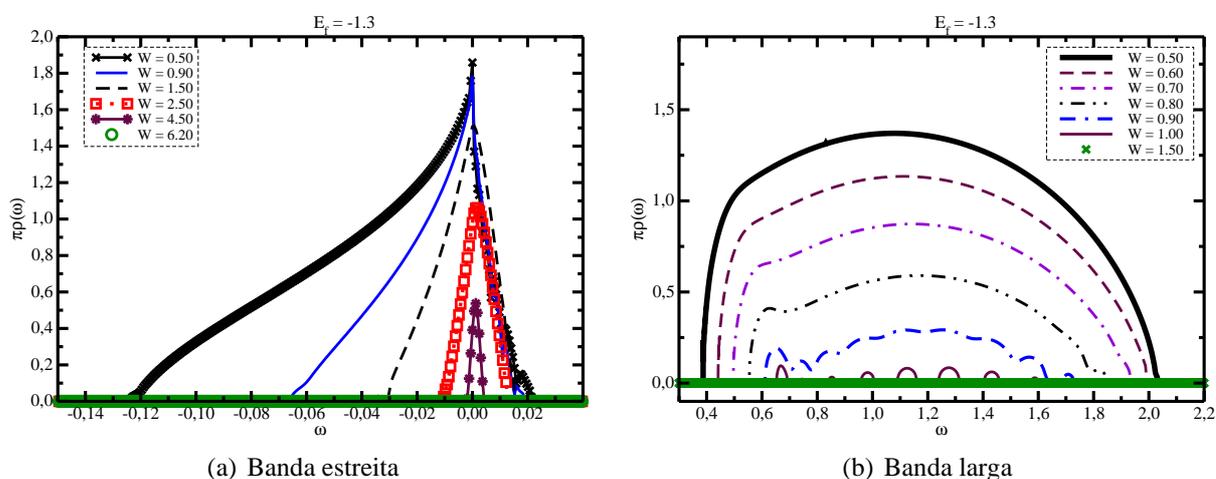


Figura 32: Ampliação das bandas (a) estreita e (b) mais larga da densidade de estados típica mostrada na figura 31.

Os gráficos da figura 31 mostram valores típicos da densidade de estados dos elétrons de condução para diferentes valores de desordem. A densidade de estados típica descreve apenas os estados estendidos [24], sendo, por causa disso, usada como parâmetro indicador da transição. À medida que a desordem aumenta, o sistema como um todo está evoluindo da fase metálica para a isolante, pois os estados estendidos estão se localizando. Já a densidade de estados média descreve tanto os estados estendidos quanto os estados localizados. Essa diferença entre as densidade de estados típica e média é ilustrada através da figura 33.

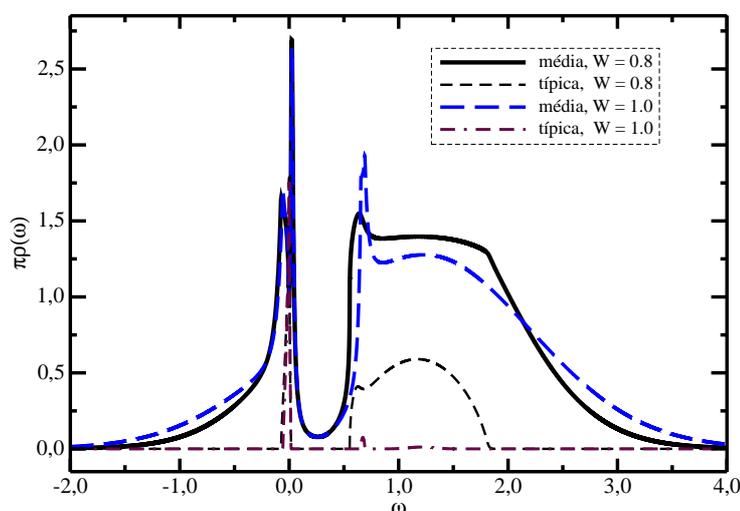


Figura 33: Gráfico comparativo entre as densidades de estados média e típica em função da frequência, obtidos a partir de 3101 sítios pela TCMD-TMT para dois valores de desordem.

Na figura 33 temos o gráfico das densidade de estados típica e média para dois valores de desordem,  $W = 0.8$  e  $W = 1.0$ . O que observamos de diferente entre as densidade de estados típica e média nos dois valores de desordem é que a densidade de estados média apresenta valores sempre maiores que os da densidade de estados típica. Isso se deve ao fato da densidade de estados média descrever tanto os estados estendidos quanto os estados localizados. Como  $E_f$  é mantido constante, o aumento da desordem é que leva o sistema à transição, que é do tipo delocalização-localização, visto que o aumento da desordem “bagunça” os estados do sistema, facilitando a localização, como foi discutido em capítulos anteriores. Percebemos também que a densidade de estados média não é um bom parâmetro para indicar o valor de desordem em que a transição metal-isolante ocorre, pois, mesmo depois de todos os estados estendidos se tornarem localizados, a densidade de estados média ainda continua tendo valores maiores que zero. Se olharmos só para ela, teremos a falsa impressão de que o sistema ainda é metálico, quando na verdade já é um isolante. Essa é a causa da TCMD não descrever a transição de

Anderson, e confirma a necessidade de olharmos para a densidade de estados típica em vez da densidade de estados média.

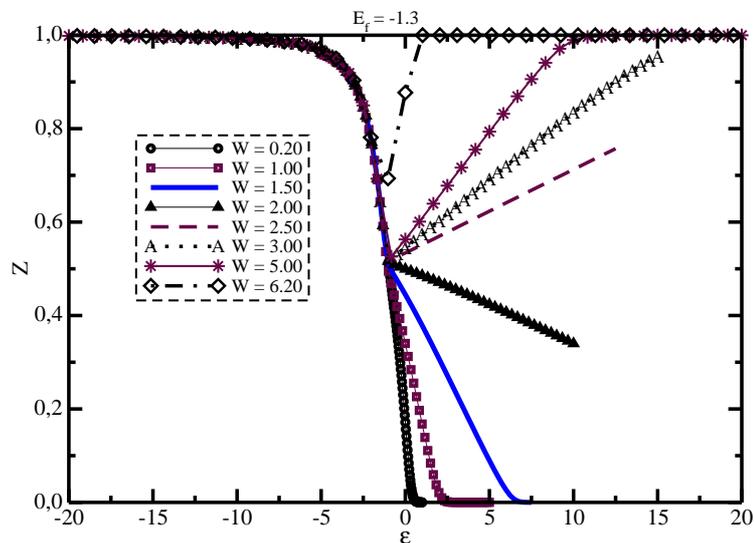


Figura 34: Gráfico de  $Z$  vs  $\epsilon$  obtido pela TCMD-TMT para diferentes valores de desordem.

Para melhor caracterizar a transição, podemos olhar para o comportamento de  $Z$  vs  $\epsilon$ , onde, dentro de bósons escravos,  $Z$  dá o número de ocupação dos elétrons de condução, de acordo com a equação 5.3, e  $\epsilon$  são as energias locais dos sítios. Através desse comportamento é possível identificar a que transição, dentre os casos discutidos no capítulo 1, a que estamos analisando mais se assemelha. Essa distinção entre as transições metal-isolante de Mott, Anderson e Mott-Anderson é feita através da análise do  $Z$ : quando todos os sítios possuem  $Z \rightarrow 0$ , a transição é a de Mott; quando todos possuem  $Z \rightarrow 1$ , a transição é a de Anderson, e, quando o sistema possui tanto sítios com  $Z \rightarrow 0$  quanto com  $Z \rightarrow 1$ , a transição é chamada de transição de Mott-Anderson [5]. No gráfico da figura 34, vemos que, à medida que a desordem aumenta, o número de sítios com  $Z$  pequeno diminui. Além disso, a proximidade da transição é sinalizada pelo aparecimento de sítios com  $Z = 1$  para valores positivos de  $\epsilon$ , como visto para desordem  $W = 5,0$  e depois para  $W = 6,2$ , onde a transição ocorre. Para valores de desordem próximos à transição, os sítios com  $Z$  pequeno desaparecem, e o que se observa são sítios com  $Z$  intermediário, ou seja, sítios com  $Z$  entre  $0,5 < Z \leq 1,0$ . Assim, no caso em que estamos analisando, há sítios que caracterizam a transição de Anderson ( $Z \rightarrow 1$ ), além de sítios com  $Z$  intermediário. Concluímos que o tipo de transição observada aqui é mais próxima da transição de Anderson e por isso a chamamos de transição tipo Anderson.

No gráfico da figura 36, temos os valores médio e típico de  $Z$  em função da desordem, e o

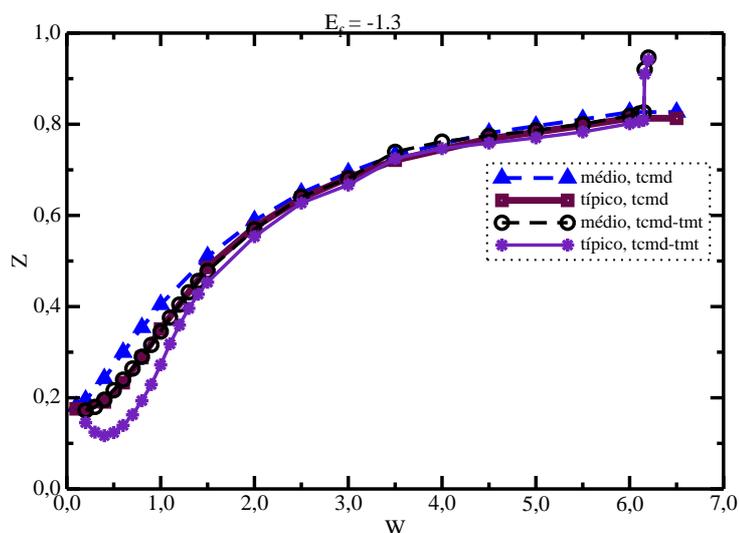


Figura 35: Gráfico dos valores típico e médio de  $Z$  para diferentes valores de desordem obtidos com a TCMD e TCMD-TMT.

comportamento observado é uma confirmação do que foi comentado para a figura 34. À medida que a desordem aumenta, a média do  $Z$  também aumenta, ou seja, a localização de Anderson começa a ganhar força. O valor típico de  $Z$  obtido dentro da TCMD-TMT apresenta um salto para valores maiores de  $Z$ , quando a transição ocorre, semelhante ao comportamento observado no gráfico da figura 30, comentado anteriormente. As curvas correspondentes obtidas pela TCMD não apresentam alteração alguma na região onde ocorre a transição, efeito já esperado, devido a TCMD não descrever a localização de Anderson.

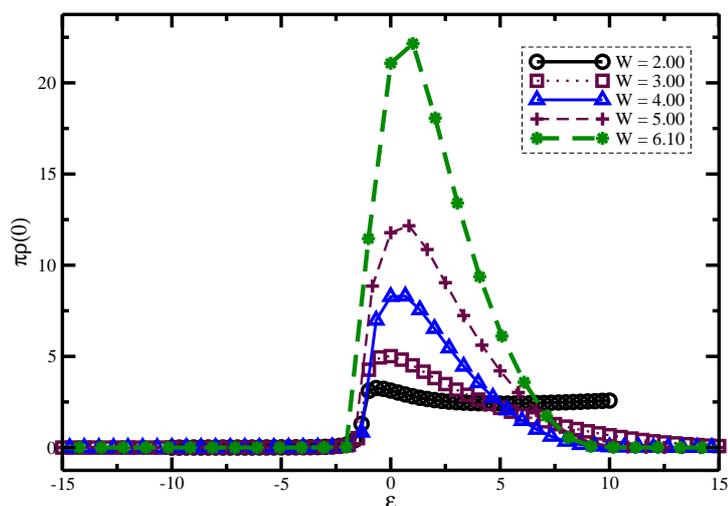


Figura 36: Gráfico da densidade de estados dos elétrons de condução no nível de Fermi em função das energias locais.

Além de terem  $Z \neq 1$ , os sítios com  $\epsilon$  em torno de zero são também aqueles que têm densidade de estados local no nível de Fermi diferente de zero. Isso pode ser visto na figura 35, que mostra  $\rho(0)$  em função das energias locais, próximo da transição. Nesse gráfico vemos que o número de sítios com densidade maior que zero diminui com o aumento da desordem. Mais próximo da transição ocorre o aumento da altura do pico mesmo sem variar muito a largura, ou seja, os sítios com densidade maior que zero possuem densidades cada vez maiores à medida que a desordem aumenta, elevando a altura do pico, até a transição ocorrer. Esse comportamento é compatível com o resultado observado na figura 30 para a densidade de estados média, que assume valores cada vez maiores à medida que  $W$  aumenta.

### 5.4.2 Fase de Griffiths

Depois de confirmar que a TCMD-TMT descreve bem a localização de Anderson, nos voltamos para observar se essa combinação é capaz de descrever também a fase eletrônica de Griffiths. Para isso decidimos ver o que acontece com a distribuição de  $Z$  para desordem baixa,

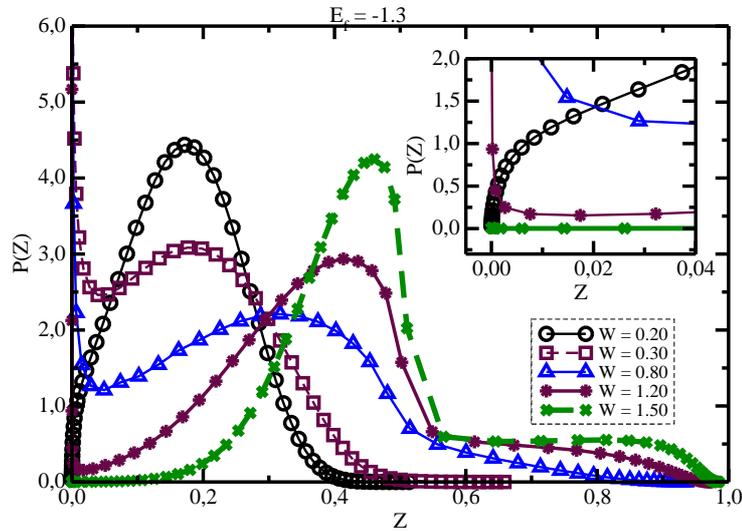


Figura 37: Distribuição de  $Z$  para diferentes valores de desordem obtida pela TCMD-TMT.

à medida que ela aumenta, como mostrado no gráfico da figura 37.

A distribuição  $P(Z)$  apresenta comportamento similar ao da distribuição de temperaturas Kondo, ilustrado na figura 19 do capítulo 4. À medida que  $W$  aumenta, o pico da distribuição se desloca para a região de  $Z = 0$  e uma cauda aparece para  $Z$  pequeno. Conforme foi discutido no capítulo anterior, essa cauda se caracteriza por uma lei de potência,  $P(Z) \sim Z^{\alpha-1}$ , sendo responsável pelo aparecimento da fase eletrônica de Griffiths com comportamento não-líquido

de Fermi. À medida que  $W$  aumenta ainda mais, o número de sítios com  $Z$  pequeno diminui e o pico da distribuição se desloca para valores maiores de  $Z$ .

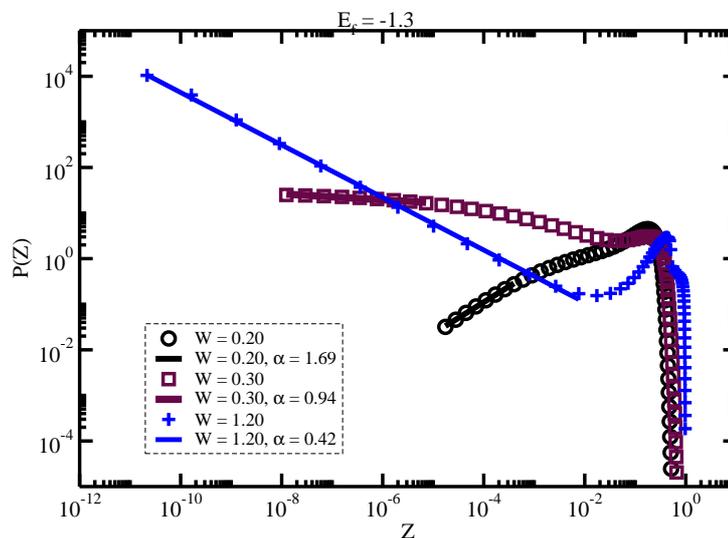


Figura 38: Linearização das caudas da distribuição de  $Z$  para os valores de  $W = 0.20, 0.30$  e  $1.20$ , ilustrando como o expoente  $\alpha$  é calculado pela TCMD-TMT.

Para determinarmos a região de desordem em que a fase eletrônica de Griffiths ocorre, realizamos uma linearização da cauda da distribuição, como no gráfico da figura 38, para identificação dos valores de  $\alpha$  correspondentes aos diferentes valores de  $W$ . No gráfico da figura 38 é apresentado a linearização para três valores bem distintos da desordem, mas que caracterizam bem o comportamento em lei de potência comentado antes, que, no gráfico log-log, corresponde à região linear de cada curva, ou seja, à cauda da distribuição de  $P(Z)$ . Com diferentes valores de  $\alpha$  em mãos elaboramos o gráfico de  $\alpha$  em função da desordem para identificar onde a fase de Griffiths se inicia, o que é apresentado na figura 39. Os resultados para  $\alpha$  são apresentados tanto para TCMD-TMT, quanto para TMT.

O gráfico da figura 39 vemos que o parâmetro  $\alpha$  diminui com o aumento da desordem e que a fase de Griffiths surge um pouco antes de  $W = 0.3$  para a TCMD-TMT e para um valor de desordem um pouco maior que  $W = 0.3$  para a TCMD. Embora a TCMD não descreva a localização de Anderson, ela descreve a fase eletrônica de Griffiths, como pode ser visto pela semelhança entre os resultados obtidos pela TCMD com os obtidos com a TCMD-TMT na figura 39. A partir desses resultados, concluímos que a TCMD-TMT descreve não só a localização de Anderson, principal responsável pela transição metal-isolante apresentada na figura 30, como também a fase de Griffiths, como esperado.

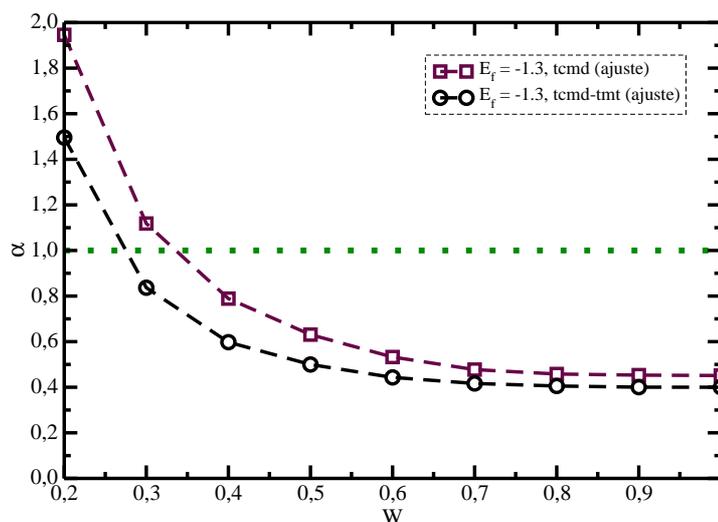


Figura 39: Gráfico de  $\alpha$  vs  $W$  obtido tanto para os resultados da TCMD-TMT como da TCMD para identificação do início da fase de Griffiths.

### 5.4.3 Desordem Fixa

Nas seções anteriores vimos que a combinação da TCMD-TMT foi capaz de descrever os efeitos de localização de Anderson e a fase de Griffiths, quando a energia dos elétrons tipo  $f$ ,  $E_f$ , foi mantida fixa e a desordem foi variada até a transição ocorrer. Nesta seção mantemos a desordem fixa,  $W = 1.5$ , e variamos a energia dos elétrons tipo  $f$ . Analizamos agora como a TCMD-TMT se comporta na descrição da transição de Mott e na descrição da fase de Griffiths.

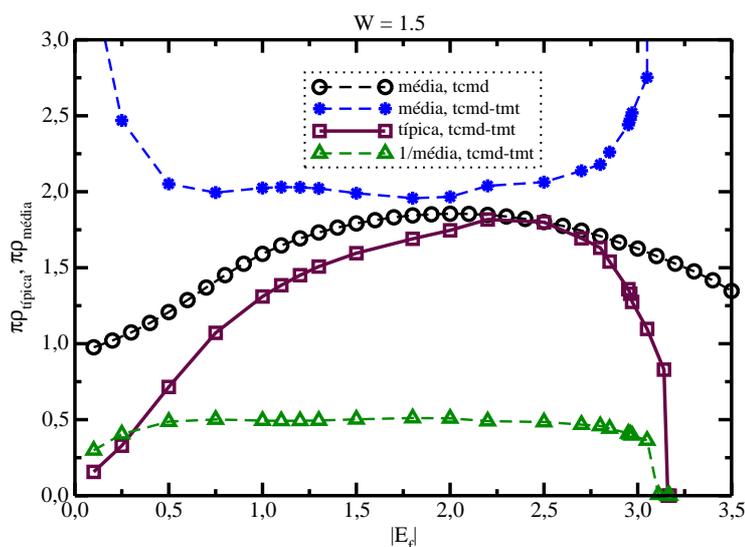


Figura 40: Densidade de estados típica e média no nível de Fermi em função da energia dos elétrons  $f$ ,  $E_f$ , obtidas com a TCMD e com a TCMD-TMT.

Assim como gráfico da figura 30, elaboramos o gráfico com os resultados obtidos para a densidade de estados em função do módulo da energia dos elétrons tipo  $f$ . Esses resultados são apresentados na figura 40, tanto para as densidades de estados típica e média da TCMD-TMT, como para a densidade de estados média da TCMD, em ambos os casos em  $\omega = 0$ . Para pequenos valores de  $|E_f|$  os resultados apresentam valores bem distintos entre si, porque devido ao valor de desordem fixa utilizado ser muito alto, os efeitos de localização de Anderson são dominantes à princípio, em decorrência disto os valores médio e típico da densidade apresentam valores bem distintos nessa situação, como foi visto nas seções anteriores. À medida que  $|E_f|$  aumenta, os resultados para a densidade de estados média e típica da TCMD-TMT e para a densidade de estados da TCMD se aproximam, em decorrência da blindagem da desordem [33]. Para valores de  $|E_f|$  próximos da transição metal-isolante, os resultados da densidade de estados típica e média da TCMD-TMT divergem entre si. Por causa disso é traçada a curva para o inverso da densidade de estados média e, assim como foi visto na figura 30, ela e o valor típico vão à zero juntas, indicando a transição, que, no caso, ocorre por volta de 3.2 para a TCMD-TMT. A densidade de estados média da TCMD, no entanto, permanece alta mesmo para valores de  $|E_f|$  maiores como  $|E_f| = 3.2$ , o que é facilmente observado na figura 40.

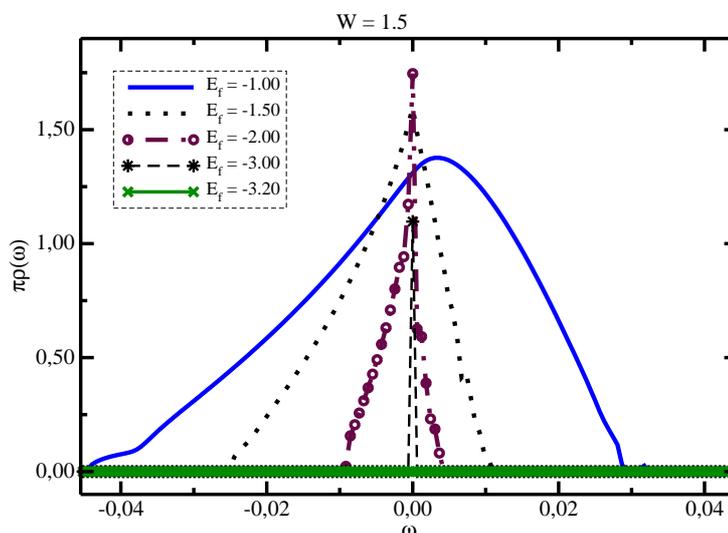


Figura 41: Densidade de estados típica em função da frequência para diferentes valores de  $E_f$ , resultados obtidos com a TCMD-TMT.

Devido ao valor da desordem ser fixo em  $W = 1.5$ , a densidade de estados dos elétrons de condução, mostrada no gráfico da figura 41, apresenta um formato semelhante ao ilustrado na figura 32 para o mesmo valor de desordem, ou seja, como visto na figura 32, a densidade de estados apresenta apenas uma banda estreita próximo a  $\omega = 0$ . No caso presente, à medida que  $|E_f|$  aumenta a banda fica mais estreita, elevando a altura do seu pico até um valor máximo,

como o visto para  $|E_f| = 2.5$ , e depois a altura do pico começa a diminuir juntamente com a largura, indo a zero para  $|E_f| \approx 3.2$ . Outra característica observada é que, para  $|E_f|$  pequeno, a densidade de estados apresenta-se bem assimétrica, com o seu pico deslocado para  $\omega > 0$ , como o mostrado para  $|E_f| = 0.5$ . À medida que  $|E_f|$  aumenta, o pico fica em torno de  $\omega = 0$ .

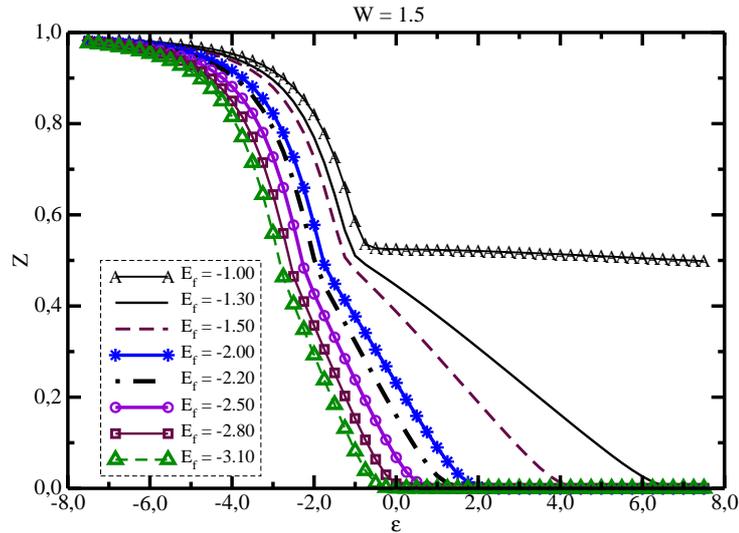


Figura 42: Gráfico de  $Z$  vs  $\epsilon$  obtido para a TCMD-TMT para diferentes valores de  $E_f$ .

Assim como no caso da desordem variável, o gráfico de  $Z$  vs  $\epsilon$ , apresentado na figura 42, onde, dentro de bósons escravos,  $Z$  dá o número de ocupação dos elétrons de condução no sítio e  $\epsilon$  são as energias locais dos sítios, nos ajuda a caracterizar a transição. Nesse caso, vemos que, à medida que aumentamos  $|E_f|$ , o número de sítios com  $Z = 0$  aumenta consideravelmente, chegando a apresentar  $Z = 0$  para todos os sítios com  $\epsilon > 0$  para  $E_f = -3.1$ , que é um valor bem próximo da transição. Isso significa que à medida que  $|E_f|$  aumenta, há transferência de carga dos elétrons de condução para os elétrons tipo  $f$  ou localizados. Por conta da maioria dos sítios do sistema apresentarem  $Z = 0$ , próximo ao  $|E_f|$  crítico consideramos que a transição vista aqui é mais próxima de uma transição de Mott, em que todos os sítios têm  $Z \rightarrow 0$  quando se aproxima da fase isolante, e por isso, a chamamos de transição tipo Mott.

Se olharmos para os valores médio e típico de  $Z$  em função de  $|E_f|$ , na figura 43, vemos que a transição ocorre quando  $Z$  típico se anula,  $Z \rightarrow 0$ . Assim, o valor típico de  $Z$  também é um indicador da transição delocalização-localização vista aqui. No gráfico da figura 43, vemos que os valores médios e típicos de  $Z$  diminuem gradualmente com o aumento de  $|E_f|$  e, quando ocorre a transição, tanto o valor médio quanto o valor típico de  $Z \sim 0$  para a TCMD-TMT, o que ocorre por volta de  $|E_f| = 3.2$ , a transição não é vista na figura 43 para a TCMD. O aumento do número de sítios com  $Z \rightarrow 0$  próximo à transição foi visto no gráfico da figura 42, o que é

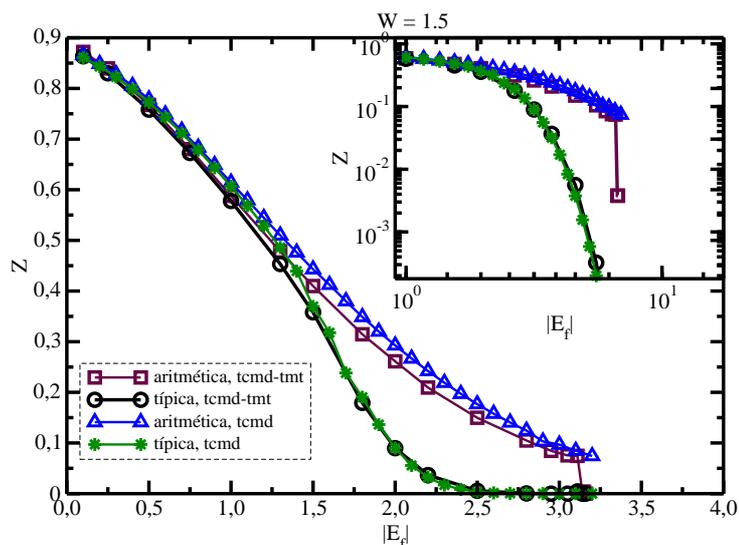


Figura 43: Gráfico dos valores típico e médio de  $Z$  para diferentes valores de  $E_f$ , obtidos com a TCMD e TCMD-TMT.

compatível com  $Z_{tip} \rightarrow 0$ , próximo ao  $|E_f|$  crítico.

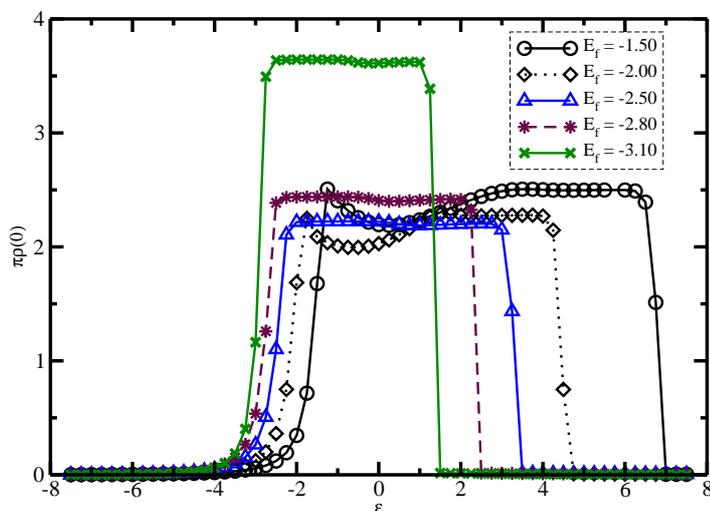


Figura 44: Gráfico da densidade de estados local no nível de Fermi em função das energias locais para a TMT-TCMD.

Ainda com o objetivo de caracterizar melhor a transição, assim como foi feito na seção de desordem variável, decidimos olhar para o gráfico da densidade de estados local no nível de Fermi ( $\omega = 0$ ) em função das energias locais, o que é apresentado na figura 44. Nesse gráfico observamos uma diminuição do número de sítios com densidade de estados local maior que zero à medida que  $|E_f|$  aumenta. Isso é visto pela diminuição da largura das curvas, sem variação considerável em suas alturas, até a proximidade da transição, onde a altura se eleva consideravelmente, como é visto para  $E_f = -3.1$ .

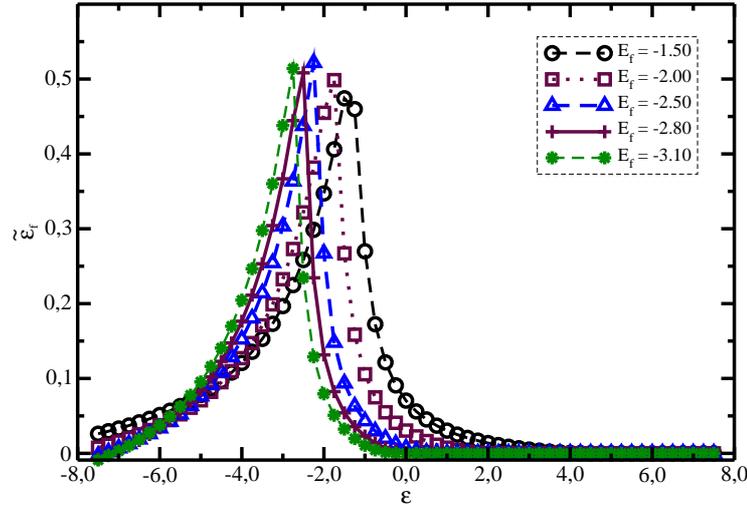


Figura 45: Gráfico da energia renormalizada em função das energias locais.

Se olharmos para a energia renormalizada (definida na equação 4.19 do capítulo 4) em função das energias locais, o que é apresentado na figura 45, vemos que o número de sítios com energia renormalizada nula aumenta à medida que aumentamos  $|E_f|$ , deslocando a posição do pico para à esquerda, sem alteração considerável em suas alturas,  $\tilde{\epsilon}_f = 0$  significa blindagem da desordem para esses sítios, o que explica o aumento de  $\rho_{tip}(0)$  para  $|E_f|$  intermediário na figura 40. Assim como foi visto no gráfico de  $Z$  vs  $\epsilon$  apresentado na figura 42, próximo da transição, todos os sítios com  $\epsilon > 0$  adquirem energia renormalizada nula, ou seja, são os mesmos sítios que apresentam  $Z = 0$  e que sofrem efeitos de localização de Mott, produzidos pela transferência de carga da banda de condução para os elétrons tipo  $f$ . Na transição de Mott descrita pelo modelo de Hubbard [27], todos os sítios apresentam  $Z \rightarrow 0$  e  $\tilde{\epsilon}_f \rightarrow 0$  próximo à transição. Embora no presente caso isso não aconteça para todos os sítios, esse é o caso para a maioria deles, o que nos leva a chamar a transição de tipo Mott, como dito anteriormente.

#### 5.4.4 Fase de Griffiths

Mediante a descrição da transição metal-isolante pela TCMD-TMT, nos voltamos a analisar a fase de Griffiths e, assim como no caso de  $E_f$  fixo e desordem variável, descrito anteriormente, elaboramos o gráfico da distribuição de  $Z$  apresentado à seguir.

Na figura 46, observamos que o aparecimento da cauda da distribuição para  $Z$  pequeno se dá com o aumento de  $|E_f|$ . No caso discutido antes, em que a desordem é variável e  $E_f$  fixo, o aumento da desordem provoca um deslocamento da distribuição de início para  $Z$  menor e depois para  $Z$  maior, sendo que a transição se dá com o aumento do número de sítios com

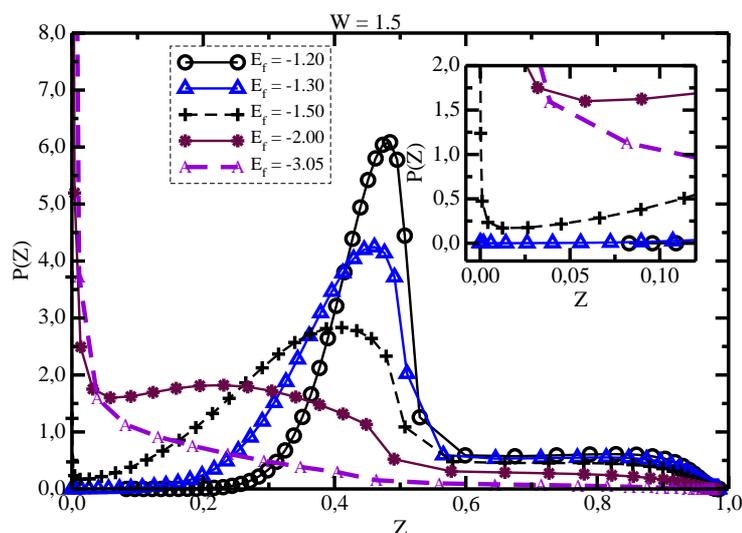


Figura 46: Distribuição de  $Z$  para diferentes valores de  $E_f$  obtida pela TCMD-TMT.

$Z \rightarrow 1$ . No caso presente, a transição se dá com o aumento do número de sítios com  $Z \rightarrow 0$  a distribuição  $P(Z)$  se desloca sempre na direção de  $Z$  menor, sempre até a transição ocorrer, como pode ser melhor visualizado no “inset” da figura 46. Nessa região, temos dois tipos distintos de sítios, sítios com  $Z \rightarrow 0$  e sítios com  $Z \neq 0$ , por causa da desordem presente no sistema, o que caracteriza a fase de Griffiths. Assim como no caso da desordem variável, tomamos a linearização da cauda da distribuição  $P(Z)$  para o cálculo do expoente  $\alpha$ , como apresentado no gráfico da figura 47.

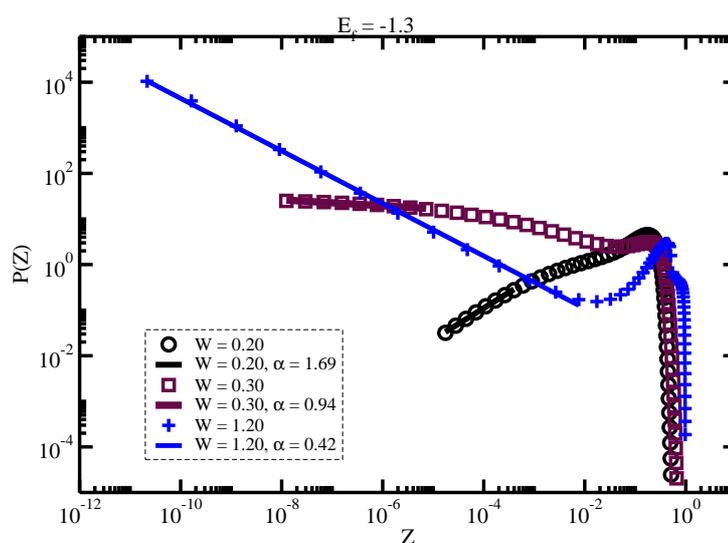


Figura 47: Linearização das caudas da distribuição de  $Z$  para os valores de  $E_f = -1.26, -1.28$  e  $-2.00$ , ilustrando como o expoente  $\alpha$  é calculado.

Com base nos vários valores de  $\alpha$  obtidos, elaboramos um gráfico similar ao apresentado

no caso de desordem variável em que identificamos onde a fase eletrônica de Griffiths se inicia. No gráfico da figura 48, vemos que o parâmetro  $\alpha$  diminui com o aumento de  $|E_f|$  e a fase de Griffiths surge por volta de  $|E_f| = 1.3$  para a TCMD-TMT e por volta de  $|E_f| = 1.25$  para a TCMD. Como no caso de desordem variável e  $E_f$  fixo, a TCMD é capaz de descrever a fase de Griffiths. Diferentemente do caso anterior, em que o parâmetro  $\alpha$  praticamente se estabiliza por volta de  $\alpha = 0.4$ , ele aqui vai a zero continuamente, até a transição, como pode ser visto no gráfico. Isso se deve ao fato de que, no caso presente, a transição se dá pelo aumento do número de sítio com  $Z \rightarrow 0$ , enquanto que no primeiro caso a transição se dá com a ausência dos sítios com  $Z \rightarrow 0$  e aumento dos sítios com  $Z \rightarrow 1$ .

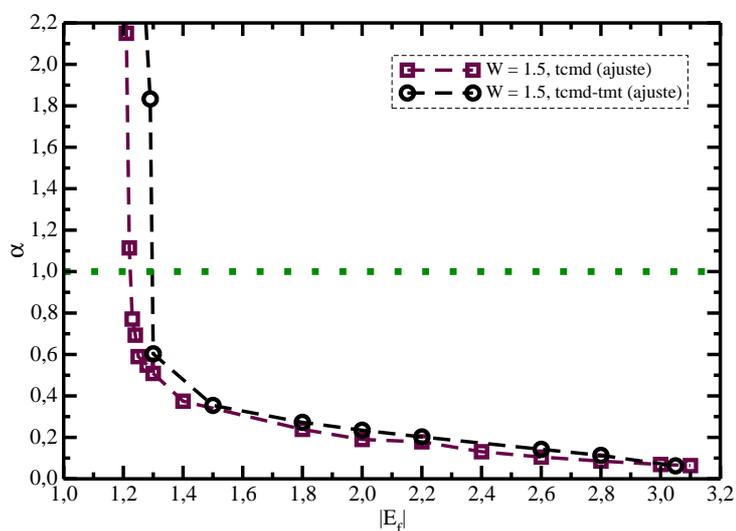


Figura 48: Gráfico de  $\alpha$  vs  $E_f$  obtido com a TCMD-TMT para identificação do início da fase de Griffiths.

No caso analisado nesta seção, a fase de Griffiths persiste até a transição metal-isolante, comportamento que é diferente do caso em que mantemos a energia dos elétrons tipo  $f$ ,  $E_f$ , fixa e variamos a desordem, onde a fase de Griffiths aparece bem antes da transição mas não persiste até a transição. O mapeamento de toda a região onde a fase de Griffiths aparece é obtido a partir de um estudo mais detalhado de todo o espaço de fase. No caso, teríamos que obter os mesmos resultados apresentados nesta dissertação para vários outros valores de desordem e  $E_f$ , ou seja, na seção de desordem variável, por exemplo, teríamos que estudar a variação da desordem para outros valores diferentes da energia dos elétrons tipo  $f$ , com  $E_f$  fixo, o mesmo valendo para a seção de desordem fixa. Com isso poderíamos mapear todo o espaço de fase, determinando assim toda a região de fase metálica, incluindo a região onde a fase Griffiths aparece, e os valores de  $E_f$  e  $W$  críticos, onde a transição metal-isolante ocorre.

# CONCLUSÃO

Nesta dissertação, com o objetivo de descrever a transição metal-isolante e a fase eletrônica de Griffiths, resolvemos o modelo de transferência de carga desordenado através da combinação da teoria de campo médio dinâmico com a teoria do meio típico. O modelo em questão corresponde ao modelo da rede de Anderson desordenado acrescido do vínculo que a soma, por sítio, do número de ocupação dos elétrons de condução e do número de ocupação dos elétrons tipo  $f$  seja igual a um. Através da combinação da teoria de campo médio dinâmico com a teoria do meio típico, o problema da rede desordenada é mapeado em vários problemas de uma impureza, os quais, no nosso trabalho, foram resolvidos através do método de bósons escravos com a aproximação de que a energia de interação elétron-elétron  $U \rightarrow \infty$ . Consideramos a presença de desordem na energia local dos elétrons de condução, distribuída segundo uma gaussiana de desvio padrão  $W$ . Os resultados foram obtidos a partir da variação da energia dos elétrons tipo  $f$ ,  $E_f$ , ou da desordem envolvida. Nos dois casos, os resultados obtidos mostraram que o método utilizado foi capaz de reproduzir a transição metal-isolante e a fase de Griffiths.

No caso de desordem variável e energia dos elétrons tipo  $f$ ,  $E_f$ , mantida constante, o código foi capaz de descrever a transição metal-isolante esperada, o que confirma a boa descrição dos efeitos da localização de Anderson, decorrentes do aumento da desordem. Analisando os resultados para a densidade de estados típica no nível de Fermi, observamos que essa transição se deu para a desordem  $W$  da ordem de  $6.0D$ , onde  $D$  é largura da banda dos elétrons de condução no caso limpo. Para cada problema de uma impureza, analisamos também os resultados para o peso de quase-partícula,  $Z$ , em função das energias locais dos sítios. Vimos que, para valores de desordem próximos à transição, os sítios com  $Z$  pequeno desaparecem, e o que resta são apenas sítios com  $Z$  intermediário, ou seja,  $Z$  entre  $0.5 < Z \leq 1.0$ . Em decorrência da maioria dos sítios do sistema possuírem  $Z = 1$  (característica da transição de Anderson) e alguns sítios com  $Z$  intermediário, chegamos à conclusão que a transição observada aqui é mais próxima da transição de Anderson.

Na descrição da fase de Griffiths, vimos seu aparecimento bem antes da transição, não persistindo até ela. Nessa fase com comportamento não líquido de Fermi, a cauda da distribuição de  $Z$  apresentou decaimento em lei de potência, do tipo  $P(Z) \sim Z^{\alpha-1}$ , sendo esse comportamento responsável pelo aparecimento desta fase. A partir da linearização da cauda da distribuição num

gráfico log-log, identificamos o valor de desordem em que a fase eletrônica de Griffiths se inicia, que no caso foi da ordem de  $W = 0.3D$ . A fase eletrônica de Griffiths ocorre para valores de  $\alpha$  tais que o expoente de  $P(Z)$  torna-se negativo, ou seja, para valores de  $\alpha < 1$ , pois nessa região  $P(Z)$  e as grandezas termodinâmicas do sistema apresentam comportamento divergente.

No outro caso, em que a desordem é mantida fixa e a energia dos elétrons tipo  $f$ ,  $E_f$ , varia, vimos que, à medida que  $|E_f|$  aumenta, os resultados para a densidade de estados média e típica da combinação teoria de campo médio dinâmico mais teoria do meio típico e o valor da densidade de estados média da teoria de campo médio dinâmico se aproximam, o que indica que os efeitos de localização de Anderson não são tão relevantes. Nesse caso os efeitos de localização de Mott são os maiores responsáveis por levar o sistema à transição, que ocorre para  $|E_f| \approx 3.2D$ . Além disso, vimos que, à medida que aumentamos  $|E_f|$ , o número de sítios com  $Z = 0$  aumenta consideravelmente; como, para bósons escravos, o número de ocupação dos elétrons tipo  $f$  é igual a  $1 - Z$ , isso significa que há transferência de carga dos elétrons de condução para os elétrons tipo  $f$  ou localizados. Por conta do sistema apresentar a maioria dos sítios com  $Z = 0$  e uma minoria de sítios com  $Z$  intermediário, concluimos que essa transição é mais próxima de uma transição de Mott, que se caracteriza por apresentar todos os sítios com  $Z = 0$ .

Nesse caso de desordem constante e  $|E_f|$  variável, também fomos capazes de descrever a fase eletrônica de Griffiths, que apareceu bem antes da transição e persistiu até a transição. A cauda da distribuição de  $Z$  também apresentou decaimento em lei de potência, do tipo  $P(Z) \sim Z^{\alpha-1}$ . Através da linearização da cauda da distribuição foi identificado que a fase de Griffiths se inicia por volta de  $|E_f| \approx 1.25D$ . A persistência da fase de Griffiths até a transição se deve ao fato de que a distribuição de  $Z$  se desloca sempre na direção de  $Z$  menor, até a transição ocorrer, já que ela ocorre devido à transferência de carga da banda de condução para os elétrons tipo  $f$  ou localizados. Além disso, o parâmetro  $\alpha$  vai a zero continuamente, até a transição ocorrer, comportamento diferente do observado no primeiro caso, em que o valor de  $\alpha$  praticamente se estabiliza em  $\alpha \approx 0.4$ .

Para complementação do trabalho apresentado aqui, fica como perspectiva de trabalho futuro o mapeamento de toda a região onde a fase de Griffiths aparece, mapeamento que é obtido a partir de um estudo mais detalhado de todo o espaço de fase. No caso, teríamos que obter os mesmos resultados apresentados nesta dissertação para vários outros valores de desordem e de  $E_f$ . Ou seja, na seção de desordem variável, por exemplo, teríamos que estudar a variação da desordem para outros valores diferentes da energia dos elétrons tipo  $f$ , com  $E_f$  fixo, o mesmo valendo para a seção de desordem fixa. Com isso poderíamos mapear todo o espaço de

fase, determinando assim toda a região de fase metálica, incluindo a região onde a fase Griffiths aparece, e os valores de  $E_f$  e  $W$  críticos, onde a transição metal-isolante ocorre.

## **REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

- [1] MOTT, N. F., The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals, *Proc. Phys. Soc. London, Ser. A* v.62, p.416–422, 1949.
- [2] DAI, P.; ZHANG, Y.; SARACHIK, M. P., Electrical Conductivity of Metallic Si:B Near the Metal-Insulator Transition, *Physical Review B*, v.45, p.3984, 1992.
- [3] HIRSCH, M. J.; HOLCOMB, D. F.; BHATT, R. N.; PAALANEN, M. A., ESR Studies of Compensated Si:P,B Near the Metal-Insulator Transition, *Physical Review Letters*, v.68, p.1418, 1992.
- [4] MILOVANOVIC, M.; SACHADEV, S.; BHATT, R. N., Effective-Field Theory of Local-Moment Formation in Disordered Metals, *Physical Review Letters*, v.63, p.82 – 85, 1989.
- [5] AGUIAR, M.C.O.; et al., Critical Behavior at the Mott-Anderson Transition: A Typical-Medium Theory Perspective, *Physical Review Letters*, v.102, p.156402, 2009.
- [6] ZALLEN, R., The Physics of Amorphous Solids, A Wiley-Interscience publication, New York, 1983.
- [7] EISBERG, R.; RESNICK, R., Física Quântica: Átomos, Sólidos, Núcleos e Partículas, Rio de Janeiro: Campus, 1979.
- [8] ADLER, D., Insulating and Metallic States in Transition Metal Oxides, *Solid State Physics*, v.23, 1968.
- [9] GEORGES, A., Strongly Correlated Electron Materials: Dynamical Mean-Field Theory and Electronic Structure, *AIP Conference Proceedings*, v.715, Issue 1, p. 3–74, 2004.
- [10] MO, S.-K.; DENLINGER, J. D.; KIM, H.-D.; PARK, J.-H.; ALLEN, J. W.; SEKIYAMA, A.; YAMASAKI, A.; KADONO, K.; SUGA, S.; SAITOH, Y.; MURO, T.; METCALF, P.; KELLER, G.; HELD, K.; EYERT, V.; ANISIMOV, V. I.; VOLLHARDT, D. , Prominent Quasiparticle Peak in the Photoemission Spectrum of the Metallic Phase of  $V_2O_3$ , *Physical Review Letters*, v.90, p.186403, 2003.
- [11] ANDERSON, P. W., Absence of Diffusion in Certain Random Lattices, *Physical Review*, v.109, p.1492–1505, 1958.
- [12] KRAMER, B.; MACKINNON, A., Localization: Theory and Experiment, *Rep. Prog. Phys.*, v.56, p.1469–1564, 1993.
- [13] AGUIAR, M.C.O.; et al., Scaling Behavior of an Anderson Impurity Close to the Mott-Anderson Transition, *Physical Review B*, v.73, p.115117, 2006.
- [14] METZNER, W.; VOLLHARDT, D., Correlated Lattice Fermions in  $d = \infty$  Dimensions, *Physical Review Letters*, v.62, p.324, 1989.

- [15] CHANDLER, D., Introduction to Modern Statistical Mechanics, New York: Oxford University, 1987.
- [16] GEORGES, A.; et al., Dynamical Mean-Field Theory of Strongly Correlated Fermion Systems and the Limit of Infinite Dimensions, *Reviews of Modern Physics*, v.68, p. 13–125, 1996.
- [17] AGUIAR, M. C. O., Efeitos de Temperatura e de Interação Finita em Sistemas Desordenados Correlacionados, Campinas - SP, Unicamp, Tese de Doutorado, 2003.
- [18] MIRANDA, E.; DOBROSAVLJEVIC, V.; KOTLIAR, G., Kondo Disorder: A Possible Route Towards Non-Fermi-Liquid Behaviour, *Journal Physics Condensed Matter*, v.8, p.9871–9900, 1996.
- [19] VERNEK, E., Propriedades de Transporte de Sistemas Nanoscópicos: Átomos e Moléculas, Rio de Janeiro - RJ, PUC-Rio, Tese de Doutorado, 2007.
- [20] PHILLIPS, P. W., Advanced Solid State Physics,, Boulder, CO: Westview Press, 2003.
- [21] ECONOMOU, E. N., Green's Functions in Quantum Physics, 2ª Edition, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1979.
- [22] ANDERSON, P. W., Local Moments and Localized States, *Reviews of Modern Physics*, v.50, p.191, 1978.
- [23] ABOU-CHACRA, R.;ANDERSON, P. W.; THOULESS, D. J., A Selfconsistent Theory of Localization, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, v.6, p.1734, 1973.
- [24] DOBROSAVLJEVIC, V.; PASTOR A. A.; B. K. NIKOLIC B.K., Typical Medium Theory of Anderson Localization: A Local Order Parameter Approach to Strong-disorder Effects, *Europhysics Letters*, v.62, p.76–82, 2003.
- [25] CHAIKIN, P. M.; LUBENSKY, T. C., Principles of Condensed Matter Physics, Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [26] MAHAN, G. D., Many-Particle Physics, London, New York, Plenum Press, 1985.
- [27] TANASKOVIC, D.; MIRANDA, E.; DOBROSAVLJEVIC, V., Effective Model of the Electronic Griffiths Phase, *Physical Review B*, v.70, p.205108, 2004.
- [28] AGUIAR, M.C.O.; MIRANDA, E.; DOBROSAVLJEVIC, V., Localization Effects and Inelastic Scattering in Disordered Heavy Electrons, *Physical Review B*, v.68, p.125104, 2003.
- [29] MIRANDA, E.; DOBROSAVLJEVIC, V., Localization-Induced Griffiths Phase of Disordered Anderson Lattices, *Physical Review Letters*, v.86, p.264, 2001.
- [30] MIRANDA, E.; DOBROSAVLJEVIC, V., Disorder-driven Non-Fermi Liquid Behaviour of Correlated Electrons, *Reports on Progress in Physics*, v.68, p.2337–2408, 2005.
- [31] IMADA, M.; FUJIMORI, A.; TOKURA, Y., Metal-Insulator Transitions, *Reviews of Modern Physics*, v.70, p.1039 – 1263, 1998.

- [32] TANASKOVIC, D., Anomalous Metallic Behavior in Strongly Correlated Electron Systems with Disorder, Florida, U.S.A, Florida State University, PhdThesis, 2005.
- [33] TANASKOVIC, D.; DOBROSAVLJEVIC, V.; ABRAHAMS, E.; KOTLIAR G., Disorder Screening in Strongly Correlated Systems, *Physical Review Letters*, v.91, p.066603, 2003.