



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Efeitos de dopagem e desordem em modelos de sistemas eletrônicos correlacionados

Rubens Diego Barbosa de Carvalho

Tese realizada sob a orientação do Prof. Miguel A. C. Gusmão e apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul em preenchimento parcial dos requisitos para para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Porto Alegre
Abril/2014

Agradecimentos

E chega ao fim a longa jornada acadêmica. Desde o início da graduação até a finalização do doutorado, foram dez longos anos, com muito aprendizado, muitos ganhos.

Certamente esse tipo de caminhada não se faz sozinho e, especialmente nesse momento, devo lembrar disso. Muitas pessoas deram sua contribuição nessa conquista, de forma que eu não poderia deixar de citar nomes como Kelly Camargo, Gilberto Nascimento, Flor Claros, Adriana Rodrigues, John Max, Felipe Dória, Chiara Nascimento, Caroline Daboit, entre muitos outros que fizeram minha vida mais feliz. Agradeço pela amizade dedicada durante essa temporada em Porto Alegre.

Naturalmente, um agradecimento especial vai para meu orientador. Foi uma grande satisfação poder trabalhar com o prof. Miguel Gusmão, um pesquisador admirável e que foi muito além de oferecer uma simples orientação.

Agradeço pelo apoio incondicional de minha família, sempre torcendo por mim, especialmente minha mãe Maria Bernadete e minha irmã Glayde Selma; eu dedico esse trabalho a vocês!

Agradeço ainda à Universidade Federal do Rio Grande do Sul, especialmente ao Instituto de Física. Além disso, sou grato ao apoio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Resumo

Elétrons em bandas estreitas de energia são fortemente afetados pela interação coulombiana como também por desordem na rede. Ambos os efeitos podem levar à localização, mas de naturezas diferentes: estado isolante de Mott, induzido por correlação, e localização de Anderson, induzida por desordem. A existência da fase de Mott é também significativamente dependente do preenchimento da banda. Abordagens teóricas para lidar com esse tipo de sistema são usualmente baseadas no hamiltoniano de Hubbard ou modelos relacionados, incluindo desordem como uma distribuição de energias locais. Neste trabalho, utilizando a Teoria de Campo Médio Dinâmico (DMFT), estudamos o modelo de Anderson-Falicov-Kimball e sua versão de três bandas, obtida como uma simplificação do modelo de Hubbard de três bandas associado aos planos de CuO_2 dos cupratos supercondutores de alta temperatura crítica, realizando nossa análise para os casos magnético e não magnético. A densidade de estados de uma partícula é obtida por médias aritmética e geométrica sobre a desordem, já que somente a última pode detectar a localização na ausência de um *gap* de energia. Variando as intensidades de interação coulombiana e desordem, construímos diagramas de fases para esse modelo, onde identificamos transições metal-isolante mediadas por correlação e desordem, bem como a inter-relação entre esses efeitos. Isso é feito para vários preenchimentos de banda, já que nosso principal interesse aqui é estudar como a variação da densidade de elétrons (dopagem) afeta os diagramas de fases previamente obtidos na ausência de dopagem. Para o modelo de uma banda no caso paramagnético, as informações reveladas pela densidade de estados são confirmadas pela análise das condutividades estática e dinâmica, incluindo efeitos de temperatura. Quando consideramos a solução magnética, observamos o comportamento da temperatura de Néel e podemos apresentar um diagrama de fases mais completo. Além de uma análise bastante extensa do modelo de uma banda, fazemos um estudo inicial do modelo de três bandas, focalizando comportamentos que possam vir a ser comparados ao que se observa nos óxidos supercondutores.

Abstract

Electrons in narrow-band solids are strongly affected by the Coulomb interaction as well as lattice disorder. Both effects can lead to localization, but of different nature: correlation-induced Mott insulating state, and disorder-induced Anderson localization. The existence of the Mott phase is also significantly dependent on the band filling. Theoretical approaches to deal with this kind of system are usually based on the Hubbard Hamiltonian or related models, including disorder as a distribution of the on-site energies. In this work, utilizing Dynamic Mean Field Theory (DMFT), we study the Anderson-Falicov-Kimball and its three-band version, obtained as a simplification of the three-band Hubbard model associated to the CuO_2 planes of high-critical-temperature cuprate superconductors, performing our analysis for the magnetic and non-magnetic cases. The one-particle density of states is obtained by both arithmetic and geometrical averages over disorder, since only the latter can detect localization in the absence of an energy gap. Varying the strengths of Coulomb interaction and disorder, we construct phase diagrams for these models, where we identify metal-insulator transitions driven by correlation and disorder, as well as the interplay between these effects. This is done for various band fillings, since our main interest here is to study how the variation of the electron density affects the phase diagrams previously obtained in the absence of doping. For the one-band model in the paramagnetic case, the picture revealed by the density of states is further checked by evaluating the static and dynamic conductivities, including temperature effects. When we consider the magnetic solution, we observe the Néel temperature behavior, and we are able to present a more complete phase diagram. Besides a quite extensive analysis of the one-band model, we develop an initial study of the three-band model, focusing on behaviors that might be linked with what is observed on the superconducting oxides.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Transições metal-isolante: Mott e Anderson	1
1.2	Sistemas fortemente correlacionados	3
1.3	Modelo de Hubbard e generalizações	4
1.4	Teoria de Campo Médio Dinâmico	5
1.4.1	Modelo de Falicov-Kimball	8
1.4.2	Modelo de três bandas	9
2	O método DMFT para o modelo de Anderson-Falicov-Kimball	12
2.1	Solução do modelo FK em dimensão infinita	12
2.2	DMFT no caso paramagnético	15
2.2.1	Condutividade	18
2.3	Ordem magnética no modelo AFK	19
3	Modelo de uma banda no caso paramagnético	23
3.1	Densidades de estados e diagramas espectrais	23
3.2	Diagramas de fases	29
3.3	Condutividade dinâmica	30
3.4	Condutividade estática	33
4	Modelo de uma banda com ordem magnética	37
4.1	Densidade de estados na fase magnética	37
4.2	Magnetização em função da temperatura	40
4.3	Diagramas de fases	41
5	Modelo de três bandas	47
5.1	Solução Paramagnética	48
5.2	Solução Antiferromagnética	54
5.3	Resultados Preliminares	57
6	Conclusões e Perspectivas	61
	Apêndice: trabalho publicado	63
	Referências Bibliográficas	71

Lista de Figuras

1.1	Densidade de estados esquemática para o modelo de Anderson	2
1.2	Rede bidimensional e os mecanismos no modelo de Hubbard	5
1.3	Energia versus densidade para dimensão $d=1,3,\infty$	6
1.4	Configurações de spins num campo médio.	6
1.5	Representação da DOS no modelo de Hubbard na fase paramagnética.	8
1.6	Diagrama de fases dos cupratos supercondutores de alta T_c	10
3.1	Diagrama de fases do modelo de AFK para um elétron por sítio.	25
3.2	DOS para $U = 0.3$, com $n = 1.0$ e $n = 0.6$	25
3.3	Diagrama espectral para $U = 0.3$, com $n = 1.0$ e $n = 0.2$	26
3.4	DOS com médias aritmética e geométrica para $U = 0.9$; $n = 1.0$ e $n = 0.6$; $\Delta = 0.0$ e $\Delta = 0.8$	27
3.5	Diagramas espectrais para $U = 0.9$, com $n = 0.60$ e $n = 0.20$	27
3.6	Densidade de estados para $U = 1.5$ com $n = 1.00$	28
3.7	Diagramas espectrais para $U = 1.5$, com $n = 1.00$ e $n = 0.20$	29
3.8	Diagramas de fases do modelo de AFK para várias concentrações.	30
3.9	$\sigma(\nu)$ para $U = 0.3$ e diversos valores de Δ	31
3.10	Condutividade óptica para $U = 0.9$, $n = 0.2$ e $T = 0.0$	32
3.11	Condutividade óptica para $U = 0.9$ com banda meio-cheia.	33
3.12	Efeito de temperatura na condutividade óptica para $U = 1.5$ e $n = 1$	34
3.13	Condutividade estática em função da temperatura para $U = 0.3$ e $n = 1.0$	35
3.14	Condutividade estática em função da temperatura para $U = 0.9$, $n = 1.0$ e desordens de $\Delta = 0.0$ a $\Delta = 1.7$	35
3.15	Resistividade em função de T^2	36
4.1	Densidade de estados para $n = 1.0$ e $\Delta = 0.0$, com $U = 0.4$ e $U = 0.6$	38
4.2	DOS para $n = 0.95$, $U = 1.8$ e três valores de Δ	39
4.3	Efeito da desordem na magnetização para $n = 1.0$ e $U = 1.0$	40
4.4	Redução progressiva de T_N por causas distintas.	41
4.5	T_N em função de U para o caso $n = 1$, variando Δ	42
4.6	T_N em função de U para $\Delta = 0$ e $n \leq 1.0$	43
4.7	$T_N(n)$ vs. n para $U = 0.5$ e desordens $\Delta = 0.0$, $\Delta = 0.1$ e $\Delta = 0.3$	43
4.8	$T_N(n)$ vs. n , com $\Delta = 0.0$ e $0.2 \leq U \leq 0.9$	44
4.9	Diagramas de fases magnéticos para $n = 1.00$, 0.95 , 0.90 e 0.80	45
4.10	Diagrama de fases qualitativo com “domo supercondutor”.	46
5.1	Diagrama de fases mostrando T_N em função da concentração.	48
5.2	DOS no caso AF para $U = 2.8t$, $E_{ct} = U/2$, $n = 1.0$ e $T \rightarrow 0$	49
5.3	DOS para o modelo de Hubbard de 3 bandas onde $U = 0$, $\varepsilon_d = 0$ e $\Delta = 0$	57

5.4	DOS para $\Delta = 0.0$ e $n = 1.0$, destacando as bandas d e p , onde temos um isolante paramagnético.	58
5.5	DOS no limite não interegante e sem desordem.	59
5.6	Efeito de desordem na DOS. Temos à esquerda a banda d , enquanto à esquerda a banda p	59
5.7	DOS geométrica próxima ao nível de Fermi para as bandas d e p	60
5.8	“Diagrama de fases” indicativo, onde há a fase AF como delimitada com $\Delta = 0$, e o “domo” obtido pelos valores da DOS de estados estendidos no nível de Fermi.	60

Capítulo 1

Introdução

Quando enfrentamos o desafio de descrever fenômenos da natureza, a enorme quantidade de variáveis envolvidas nos leva a focarmos em determinadas características, buscando a construção de modelos que levem em conta apenas os graus de liberdade relevantes para descrevê-las. Na Matéria Condensada, mais precisamente na Física do Estado Sólido, não poderia ser diferente, pois mesmo restringindo-nos a essa área específica, encontramos uma vasta riqueza de fenômenos.

Um parâmetro bastante importante de observação na Física do Estado Sólido, como em qualquer sistema de muitas partículas, é a energia de interação entre as partículas presentes no sólido. Dependendo da intensidade com que tal interação se manifesta, precisamos fazer abordagens diferenciadas. No estudo de sólidos metálicos, por exemplo, podemos considerar casos em que os elétrons se comportam essencialmente como partículas independentes, ou seja, quando a interação coulombiana pode ser incorporada a um potencial efetivo e não se observam efeitos de *correlação* entre os elétrons. A situação oposta é quando temos um efeito extremo dessa interação, que leva a um regime de *elétrons fortemente correlacionados*, podendo ser suficiente para manter as partículas localizadas, caracterizando um estado isolante. Aqui, trabalharemos com a intensidade da interação variando entre esses os dois casos extremos, o que permite observar fenômenos bastante interessantes.

1.1 Transições metal-isolante: Mott e Anderson

Em um sólido metálico, os elétrons sofrem influência de vários efeitos, dentre os quais destacamos dois. O primeiro, já mencionado, refere-se à interação coulombiana entre os próprios elétrons de condução e o outro envolve o que podemos chamar genericamente de *desordem*, inicialmente estudada por Anderson [1–3]. Cada um desses efeitos é essencial

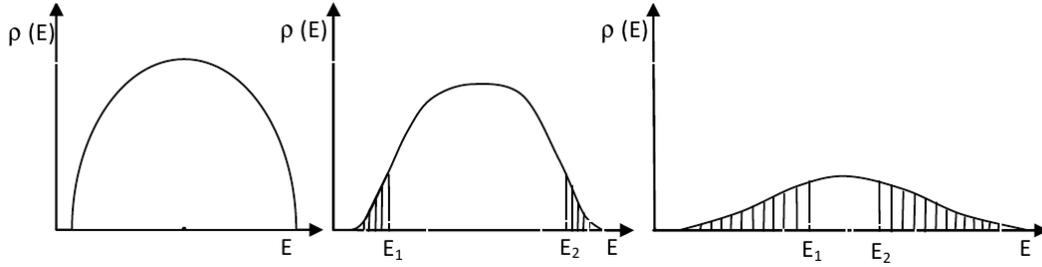


Figura 1.1: Densidade de estados esquemática para o modelo de Anderson. Os estados localizados são representados pela região hachurada, enquanto no restante temos estados estendidos. No primeiro gráfico não há desordem, no segundo há moderadamente e para o último deles a desordem é acentuada. E_1 e E_2 são as energias que separam os estados localizados e estendidos e são denominadas bordas de mobilidade.

para a ocorrência de um tipo ou outro de transição metal-isolante (MIT – *Metal Insulator Transition*).

A importância das interações entre elétrons em um sólido foi percebida já nos primórdios da Física do Estado Sólido moderna, depois que de Boer e Verway [4] chamaram a atenção para surpreendentes propriedades de materiais com bandas $3d$ parcialmente preenchidas, tal como o NiO. Isso levou Mott e Peierls [5] a conjecturarem que uma explicação teórica dessas propriedades precisaria incluir a interação eletrostática entre os elétrons [6].

A MIT de Mott-Hubbard é causada por correlações coulombianas no sistema puro, ou seja, sem desordem [7,8], e se caracteriza pela abertura de um *gap* na densidade de estados (DOS – *density of states*) para excitações de uma partícula na energia correspondente ao nível de Fermi.

Foi P. W. Anderson [1] que, em 1958, ao estudar os efeitos da presença de desordem em um sólido cristalino metálico, introduziu um modelo, sem interação, onde era considerado um potencial aleatório que provoca um espalhamento dos elétrons que se movem na rede, causando localização. Na Fig. 1.1, podemos observar a distribuição e evolução dos estados localizados resultantes do aumento da desordem em um sistema sem interação. Nela, notamos a existência das energias críticas, E_1 e E_2 , nas fronteiras entre estados estendidos e localizados. Essas linhas limítrofes são chamadas de bordas de mobilidade (*mobility edges*) [9]. A localização se inicia pelos estados da borda da banda e se estende para o interior à medida que a desordem aumenta. A MIT de Anderson, também referida como a *localização de Anderson*, ocorre quando os estados localizados atingem a região de energia onde se encontra o nível de Fermi.

Em um sólido real, a estrutura cristalina periódica é rompida em diversos locais, em geral por imperfeições da própria estrutura ou pela presença de impurezas. Assim, as propriedades dos materiais podem ser fortemente influenciadas pela desordem, além das interações. A inter-relação entre correlações coulombianas e desordem em sistemas

eletrônicos de banda estreita é de grande interesse, pois o controle experimental da concentração de elétrons é feito através de *dopagem*, o que introduz, naturalmente, alguma desordem. Se esta for suficientemente intensa, a transição metal-isolante, que seria do tipo Mott, passa a envolver efeitos de localização de Anderson. É, portanto, um desafio investigar modelos quânticos onde correlação e desordem estão simultaneamente presentes [?, Craco2001]

Pelos comentários anteriores, vemos que o caráter metálico ou isolante de um sistema de elétrons está diretamente associado à natureza dos estados disponíveis para excitações de uma partícula nas proximidades do nível de Fermi. Assim, é razoável conceber a utilização da DOS no nível de Fermi como um parâmetro de monitoramento da MIT. Isso é obviamente verdade para a transição de Mott, devido à abertura do *gap*. Já na localização de Anderson o efeito sobre a DOS é mais sutil pois, embora os estados no nível de Fermi se tornem localizados, eles mantêm uma distribuição densa, isto é, sem um *gap* de energia.

Do ponto de vista teórico, os estados eletrônicos devem ser determinados para cada realização da desordem, ou seja, para diferentes configurações de defeitos. Entretanto, considerando que o sólido é macroscopicamente homogêneo, as quantidades físicas devem ser obtidas como *médias configuracionais*. Isso se aplica à densidade de estados, a partir da qual são calculadas as propriedades físicas do sistema de elétrons. Aqui o problema apresenta peculiaridades interessantes. A *média aritmética* simples reflete a presença de estados, não diferenciando se localizados ou estendidos e, portanto, não dando informações sobre a transição metal-isolante por efeito de desordem. Por outro lado, o valor mais provável (ou valor *típico*) da DOS é corretamente refletido pela *média geométrica* [11] (com possíveis extensões para médias generalizadas [12]), anulando-se a uma intensidade crítica de desordem e, conseqüentemente, fornecendo um critério explícito para a localização de Anderson.

1.2 Sistemas fortemente correlacionados

A Física de Estado Sólido moderna explica satisfatoriamente as propriedades de muitos materiais, tais como metais simples e alguns semicondutores e isolantes. Entretanto, materiais com camadas *d* e *f* não totalmente preenchidas, como compostos contendo metais de transição e terras raras, apresentam propriedades que não podem ser descritas de forma simples. Devido ao confinamento espacial naqueles orbitais, os elétrons experimentam uma forte repulsão coulombiana. Esses elétrons fortemente interagentes (ou correlacionados) não podem ser descritos como embebidos em um campo médio estático produzido pelos demais. Essa correlação entre os elétrons é suficientemente intensa para que eles não possam ser tratados como independentes [6, 13, 14].

O efeito das correlações nas propriedades dos materiais é geralmente profundo. A inter-relação entre os graus de liberdade de *spin*, carga e momentum angular orbital dos elétrons d e f pode levar a uma multiplicidade de fases a baixas temperaturas. Ela está ligada a propriedades de férmions pesados, supercondutividade de alta temperatura, magnetorresistência colossal, transição metal-isolante de Mott, instabilidades do estado de líquido de Fermi que caracteriza os metais normais, etc. [6,14]. Com isso, surgem novos métodos, tanto experimentais quanto teóricos, permeando desde pesquisa fundamental a aplicações tecnológicas avançadas.

1.3 Modelo de Hubbard e generalizações

O modelo que hoje se conhece como *modelo de Hubbard* foi proposto de forma independente por Gutzwiller, Kanamori e Hubbard [7, 15, 16], mas a denominação atual se estabeleceu no decorrer do tempo. Esse modelo tem fornecido as bases para a maior parte das pesquisas teóricas em elétrons correlacionados durante as últimas décadas e, apesar de sua aparente simplicidade, descreve vários fenômenos relevantes e tem sido alvo das mais diversas abordagens. Mais recentemente, o domínio de técnicas de engenharia de nanoestruturas vem permitindo a construção de “sólidos artificiais”, em geral de baixa dimensionalidade e com características apropriadas para emprego do modelo de Hubbard e similares. O mesmo acontece com redes ópticas de átomos frios aprisionados, nas quais se podem ter tanto as propriedades de tunelamento entre poços de potencial como de interação, permitindo também a aplicação do modelo de Hubbard para sistemas bosônicos [17, 18].

Neste trabalho, teremos em mente o sistema mais “tradicional”, isto é, um sólido composto por íons e elétrons em uma estrutura cristalina tridimensional. Já que os íons são muito mais massivos que os elétrons, considerá-los como formadores de uma rede estática geralmente é fenomenologicamente um bom ponto de partida para explorar as propriedades eletrônicas do sólido. Considerando a situação mais interessante para sistemas fortemente correlacionados, em que os orbitais atômicos relevantes são de subcamadas d ou f , é apropriado o modelo de um sistema eletrônico do tipo *tight-binding*. De uma forma geral, o hamiltoniano é escrito na representação de Wannier e exibe dois termos, um deles representando o salto (*hopping*) de um elétron entre sítios vizinhos e o outro descrevendo a interação entre dois elétrons em um mesmo sítio.

Considerando uma forma generalizada, em que se contempla a existência de mais de um orbital por sítio [19], o hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$H = - \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\alpha,\alpha'} \sum_{i,j} t_{\sigma,ij}^{\alpha\alpha'} c_{\alpha\sigma,i}^\dagger c_{\alpha\sigma,j} + \sum_{\alpha,i} U_\alpha n_{\alpha\uparrow,i} n_{\alpha\downarrow,i} , \quad (1.1)$$

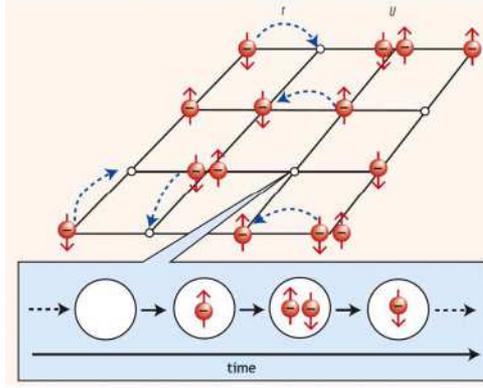


Figura 1.2: Rede bidimensional onde podemos observar representações esquemáticas dos mecanismos presentes no modelo de Hubbard. Figura da referência [6].

onde α é um índice *de banda*, identificando os diferentes orbitais locais, σ representa o índice de *spin*, $c_{\alpha\sigma,i}^\dagger$ e $c_{\alpha\sigma,j}$ são os conhecidos operadores de criação e aniquilação, respectivamente, sendo $n_{\alpha\sigma,i}$ o operador associado ao número de ocupação.

O modelo pode ser ainda mais generalizado, por exemplo, incluindo energias locais diferentes para cada orbital. No que concerne à interação coulombiana, a Eq. (1.1) só leva em conta a repulsão U_α quando dois elétrons de spins opostos ocupam o mesmo orbital, mas pode também ser generalizada. Por fim, temos a integral de *hopping* $t_{\sigma,i,j}^{\alpha,\alpha'}$, que pode envolver orbitais distintos e aqui contempla ainda a possibilidade de depender da orientação do *spin*.

Na Fig. 1.2 estão esquematizados os mecanismos presentes no modelo de Hubbard. A representação é de uma rede bidimensional onde os férmions itinerantes se movem com amplitude de *hopping* t entre os sítios vizinhos, obedecendo o princípio de exclusão de Pauli, sendo indicada a energia adicional U em um sítio com dupla ocupação. A sequência “temporal” em destaque mostra as possíveis configurações em um determinado sítio: ele pode estar vazio, ocupado por um elétron de *spin up* ou *down*, ou pode ser duplamente ocupado por elétrons de spins opostos.

1.4 Teoria de Campo Médio Dinâmico

Ao longo de muitos anos, um número significativo de pesquisadores vem dedicando considerável empenho na abordagem da física de sistemas fortemente correlacionados, sendo que a grande dificuldade dessa área está no fato de que a intensidade das interações impossibilita a aplicabilidade de aproximações perturbativas. Surgiram, assim, várias propostas de técnicas não perturbativas. Embora estejamos, talvez, ainda distantes de um consenso, a Teoria de Campo Médio Dinâmico, DMFT (*Dynamical Mean Field Theory*), tem-se mostrado uma ferramenta poderosa [13, 14].

É muito comum encontrarmos na física o uso da ideia de campo médio, sendo mais conhecidas a teoria de campo médio de Weiss [20] para sistemas de spins localizados e a teoria de Hartree-Fock [21,22] para modelos eletrônicos. Essas teorias obtiveram razoável sucesso, mesmo às custas do abandono de importantes efeitos de flutuações (correlações), porém com enorme ganho em simplificação da abordagem, pois transformam um problema de muitos corpos em um problema de uma única partícula sob a ação do campo médio, ao qual é reduzida a sua interação com as outras partículas. Esse nível de simplificação se mostra justificável apenas em certos limites em que algum parâmetro, como o número quântico de *spin* S ou o número de primeiros vizinhos z (equivalentemente, a dimensão espacial d), torna-se muito grande.

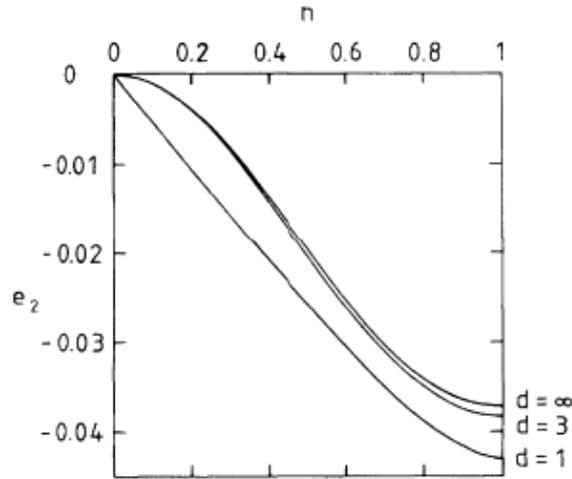


Figura 1.3: Energia de correlação em segunda ordem versus densidade para dimensão $d=1,3,\infty$. Figura reproduzida da referência [23].

A DMFT foi essencialmente introduzida por Metzner e Vollhardt [23] que, investigando o modelo de Hubbard, perceberam que os cálculos diagramáticos (em teoria de perturbação na energia cinética, não na interação coulombiana!) se tornavam bastante simplificados no limite $d \rightarrow \infty$. Embora pareça se tratar de um limite não físico, os resultados se aproximam satisfatoriamente de cálculos numéricos para $d = 3$ (ver Fig. 1.3), o que dá confiabilidade ao método. Müller-Hartmann [24] mostrou que para $d \rightarrow \infty$ em um

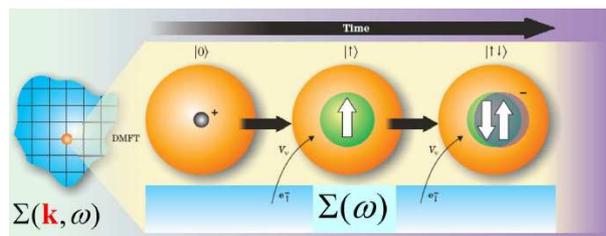


Figura 1.4: Possíveis configurações de spins num sítio visto numa configuração de campo médio. Figura reproduzida da referência [13].

modelo *tight – binding*, considerando que esse limite impõe o escalonamento da integral de *hopping* com $1/\sqrt{d}$, as funções de Green não locais se anulam (não localidade no espaço real), de forma que a autoenergia se torna local, $\Sigma(k, \omega) \rightarrow \Sigma(\omega)$. Com isso, o problema pode ser reduzido ao de um único sítio acoplado a um *reservatório* de elétrons através de um campo médio dinâmico, que dá conta das flutuações de carga locais devidas ao movimento dos elétrons na rede, como está ilustrado na Fig. 1.4. É importante salientar que, mesmo a autoenergia sendo independente de momentum, a dinâmica de muitos corpos é mantida, de forma que o campo médio dinâmico incorpora efeitos de correlação. A conexão com o problema original se dá impondo-se uma relação de autoconsistência, isto é, que a função de Green do problema efetivo de um único sítio seja equivalente à função de Green da rede calculada para um único sítio (somada sobre todos os momenta) e envolvendo a mesma autoenergia.

O problema efetivo de um único sítio é muitas vezes visto como um “problema de impureza” (*impurity problem*), devido à evidente semelhança com o problema de uma impureza magnética em um metal não magnético. Então, é usualmente feito um mapeamento a um problema de impureza de Anderson, com o reservatório de elétrons correspondendo à banda de condução da matriz e o campo médio dinâmico sendo identificado com a função de hibridização.

A Fig. 1.5 mostra esquematicamente a evolução da densidade de estados de excitações de uma partícula com o aumento da intensidade da interação U , refletindo o que se obtém via DMFT para o modelo de Hubbard (de uma só banda), no caso de banda semipreenchida (um elétron por sítio) e sem levar em conta a possibilidade de ordem magnética [25]. Aí aparece a largura de banda no limite não interagente, usualmente representada por W e que é geralmente utilizada como unidade de energia. À medida que U aumenta, observamos a transferência de peso espectral para uma região mais distante do nível de Fermi E_F , o que vem a formar as sub-bandas (inferior e superior) de Hubbard, e a permanência de um pico central característico de um líquido de Fermi, até que este último desaparece, indicando a transição metal-isolante.

No que se refere a efeitos de desordem, dentro do contexto que já comentamos anteriormente, Dobrasavljevic e Kotliar [11] formularam uma variante da DMFT onde foi incorporada a DOS com média geométrica no ciclo autoconsistente. Dessa forma, derivaram uma teoria de campo médio da localização de Anderson, que reproduz as características da MIT mediada por desordem para elétrons não interagentes [26] e permite a inclusão dos efeitos de correlações fortes.

A DMFT é uma ferramenta poderosa para a investigação de sistemas eletrônicos correlacionados. Ela fornece uma solução não perturbativa e termodinamicamente consistente para sistemas de dimensão infinita, podendo ser aplicada como uma boa aproximação para sistemas realistas. Entretanto, cabe salientar que a solução exata é formal, no sentido de que ela depende da solução do problema efetivo de um único sítio. Esta última,

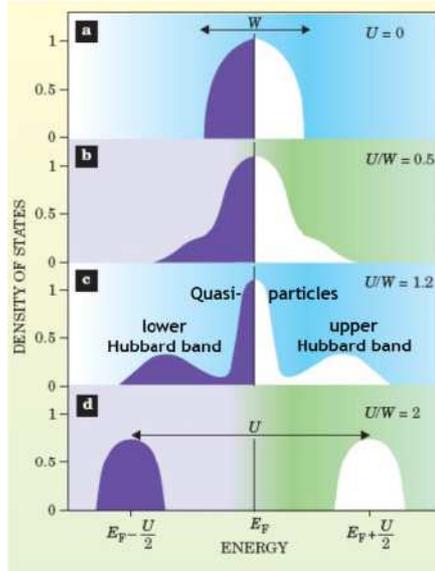


Figura 1.5: Representação esquemática da evolução da densidade de estados (DOS) no modelo de Hubbard na fase paramagnética para o caso de um elétron por sítio e temperatura nula. Figura da referência [25]

ao contrário do que acontece em uma teoria de campo médio convencional, não tem, a priori, uma solução analítica. Assim, em geral, são usadas diversas técnicas de solução numérica e/ou métodos de aproximação. Dentre os métodos já empregados em conjunto com a formulação da DMFT, isto é, como *impurity solvers*, podemos citar Monte Carlo Quântico, Teoria da Perturbação Iterada, Aproximação *Non-Crossing*, Diagonalização Exata, Grupo de Renormalização Numérico, Grupo de Renormalização de Matriz Densidade, etc. [13,14]. Uma alternativa atraente é a utilização de uma forma simplificada do modelo que viabilize a solução exata do problema efetivo de um sítio, como detalhado a seguir.

1.4.1 Modelo de Falicov-Kimball

Um *modelo de Hubbard simplificado* foi proposto por van Dongen e Vollhardt [27] em 1990. Ele é equivalente ao modelo de Falicov-Kimball (FK) [28] se os dois tipos de férmions sem *spin* deste último são interpretados como as duas orientações de *spin* dos elétrons. A simplificação se dá pela eliminação da energia cinética de um dos tipos de férmions, embora a ocupação de estados se dê em equilíbrio termodinâmico. O hamiltoniano é usualmente escrito na forma

$$H = \sum_i (\varepsilon^c - \mu) n_i^c - \sum_i (\varepsilon^f - \mu) n_i^f + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} c_i^\dagger c_j + U \sum_i n_i^f n_i^c, \quad (1.2)$$

onde $t_{i,j}$ é a amplitude de hopping para férmions móveis entre os sítios i e j ; $c_i^\dagger(f_i^\dagger)$ e $c_i(f_i)$ são operadores de criação (aniquilação) para férmions móveis (localizados) em um sítio i da rede na representação de Wannier; U é a interação coulombiana local entre os dois tipos de férmions, e μ é o potencial químico, que é incluído explicitamente no hamiltoniano. Para esse modelo, o problema de um único sítio resultante em $d = \infty$ apresenta solução analítica exata, obtida por Brandt e Mielsch [29], que será revista no Capítulo 2.

O modelo de Falicov-Kimball foi originalmente aplicado ao estudo de sistemas caracterizados pela presença de momentos magnéticos localizados e elétrons de condução, como SmB_6 , Ti_2O_3 , Fe_3O_4 , VO , VO_2 e V_2O_3 [28]. É, provavelmente, o modelo mais simples para estudar MITs em compostos de terras raras de valência mista e em óxidos de metais de transição. Já foi utilizado para estudar estados ordenados em sistemas de valência mista, magnetismo itinerante, cristalização e ferroeletricidade [30], além de diagramas de fase de soluções de amônia [12].

Impondo-se um estado sem ordem magnética (mesmo número médio de partículas móveis e fixas por sítio), para uma densidade global de uma partícula por sítio, o modelo FK exhibe uma MIT do tipo Mott-Hubbard, embora não descreva um líquido de Fermi [31]. Utilizando a rede de Bethe [32] com largura de banda W , a interação crítica obtida com DMFT é $U_c = W/2$.

A desordem local pode ser implementada da mesma forma que no modelo de Hubbard, isto é, substituindo a energia local ε^c por energias dependentes de sítio, ε_i^c , com uma distribuição aleatória (desordem do tipo Anderson). Considerando maior facilidade computacional, vamos concentrar nossa atenção no modelo de Falicov-Kimball, ou, mais especificamente, na sua versão com desordem local, que pode ser chamada *modelo de Anderson-Falicov-Kimball* (AFK).

1.4.2 Modelo de três bandas

Os modelos de uma banda (Hubbard e FK) com inclusão de desordem já foram bastante estudados [26, 33, 34], principalmente na situação de banda semipreenchida, quando a física da transição de Mott é dominante para interações fortes e pode ser estudada a sua inter-relação com os efeitos de desordem. Nosso interesse principal é estender esse estudo para o modelo de Hubbard de três bandas [35], utilizado para descrever os planos de cobre e oxigênio nos óxidos supercondutores de alta temperatura crítica (HTSC). Esses óxidos apresentam um diagrama de fases bastante rico, apresentado de forma esquemática na Fig. 1.6. Embora este trabalho não inclua um estudo de supercondutividade, podemos abordar aspectos do diagrama de fases associados à presença de ordem magnética e características do estado metálico na fase normal.

Em um estudo anterior de Beatrice e Gusmão [41], foi feita uma análise teórica do dia-

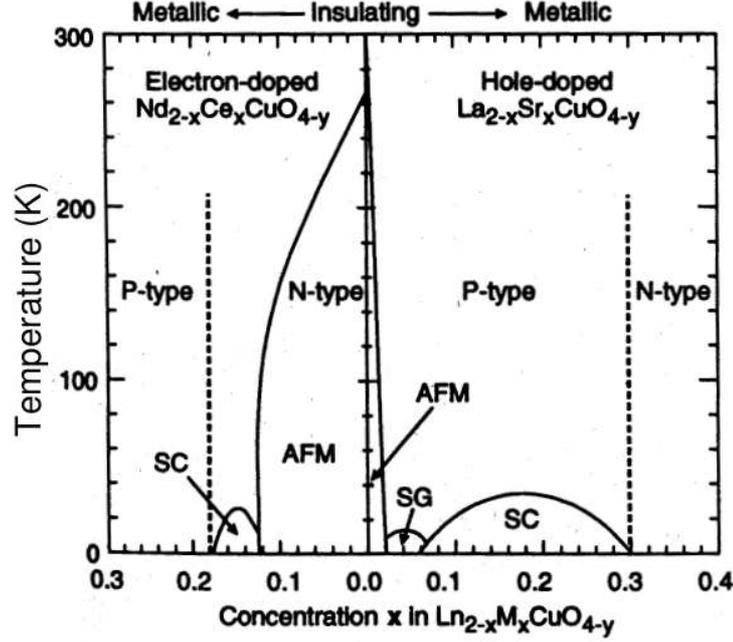


Figura 1.6: Diagrama de fases experimental dos cupratos supercondutores de alta temperatura crítica, mostrando a presença de ordem magnética na região de baixa dopagem e as regiões “mais metálicas”, nas quais se estabelece a supercondutividade, além de regiões intermediárias identificadas como “spin glass” (SG), refletindo efeitos de desordem. Figura da referência [42].

grama de fases magnético de uma versão simplificada desse modelo em função da ocupação de banda (dopagem), utilizando a Teoria do Campo Médio Dinâmico. Foi estudada a existência de soluções magnéticas e sua estabilidade com respeito à variação da dopagem, parâmetros de interação e temperatura. Isso foi feito através da simplificação do modelo de três bandas, no espírito do modelo de Falicov-Kimball. Resultados anteriores [43] para o modelo de uma banda mostraram que processos de *spin-flip* são menos importantes para repulsão coulombiana mais intensa, sendo esse o caso dos HTSCs, o que torna a simplificação FK bastante justificável.

O Hamiltoniano é construído baseado na rede bidimensional dos cupratos CuO_2 , de forma que o restante do sistema funciona como uma fonte de elétrons e buracos. Geralmente, considera-se que a física do sistema é dominada pela correlação coulombiana nos sítios de cobre e pela hibridização cobre-oxigênio. Ocorrem hibridizações entre orbitais d do cobre e os orbitais p do oxigênio. Uma das combinações ortogonais dos orbitais p não participa dessa hibridização, levando a uma largura de banda nula. Assim, restam duas bandas, e o modelo, em sua versão simplificada (isto é, tratando somente sítios correlacionados d na “aproximação” FK), é descrito pelo hamiltoniano

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} (d_i^\dagger p_j + p_j^\dagger d_i) - E_{ct} \sum_i (n_i^d + n_i^f) + U \sum_i n_i^d n_i^f, \quad (1.3)$$

onde E_{ct} é o *gap* de transferência de carga entre os níveis d e p , sendo que o zero de energia

foi escolhido na posição do nível local p . Esse hamiltoniano está escrito na *representação de buracos*, o que significa que o sistema não dopado tem ocupação de uma partícula por célula unitária (um buraco no nível d na ausência de *hopping*). Como a dinâmica dos buracos com spins opostos é desacoplada, não é necessário considerar o índice de *spin* nos orbitais p . Os operadores de férmions associados aos buracos imóveis nos sítios de cobre são representados por f_i e f_i^\dagger .

Capítulo 2

O método DMFT para o modelo de Anderson-Falicov-Kimball

Conforme comentamos no Capítulo 1, a partir do problema de elétrons interagentes em uma rede de dimensão espacial d , o método DMFT, tomando o limite $d \rightarrow \infty$ leva à solução de um problema de um único sítio na presença de um campo médio dinâmico, com uma condição de autoconsistência que traz informação sobre a topologia da rede original. Isto se justifica pelo fato de que a auto-energia torna-se exclusivamente local naquele limite. Na presença de desordem local, é necessário tomar a média configuracional das quantidades relevantes, o que pode ser feito considerando uma distribuição de probabilidade para os valores da energia de referência do sítio efetivo [14, 23].

No modelo de Falicov-Kimball, a solução do problema de um sítio com um campo médio dinâmico é exata. Inicialmente, faremos uma revisão dessa solução [29], para posteriormente discutirmos a inclusão de desordem, cálculo de condutividade elétrica e solução com ordem magnética.

2.1 Solução do modelo FK em dimensão infinita

Pela natureza do problema a ser resolvido, podemos escrever a função de partição na forma

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta H_{at}} \mathcal{S}] \quad (2.1)$$

onde $\beta = 1/T$, T é a temperatura (consideramos um sistema de unidades com a constante de Boltzman $k_B = 1$),

$$H_{at} = (\varepsilon^c - \mu) c^\dagger c + (\varepsilon^f - \mu) n^f + U f^\dagger f c^\dagger c \quad (2.2)$$

é o hamiltoniano no limite atômico e $\mathcal{S} = e^{-S}$ dá conta do efeito do campo dinâmico “externo” $\eta(\tau)$ através da integral de ação

$$S = \widehat{T}_\tau \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \eta(\tau - \tau') c^\dagger(\tau) c(\tau'), \quad (2.3)$$

onde \widehat{T}_τ é o operador de ordenamento temporal (no caso, o “tempo imaginário” τ).

Considerando que os férmions f no modelo FK não têm dinâmica, o número de ocupação f no sítio pode ser zero ou um, com probabilidades determinadas em equilíbrio termodinâmico. Então, podemos separar a função de partição como $Z = Z_0 + Z_1$. Passando para uma formulação funcional, escrevemos

$$Z_\alpha = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_\alpha(\bar{\psi}, \psi)} \quad (2.4)$$

com

$$S_\alpha = \int_0^\beta d\tau [\bar{\psi}(\tau) \partial_\tau \psi(\tau) + H_{at}^{(\alpha)}(\bar{\psi}(\tau), \psi(\tau)) + \int_0^\beta d\tau' \eta(\tau - \tau') \bar{\psi}(\tau) \psi(\tau')], \quad (2.5)$$

onde $\alpha = 0, 1$ indica o subespaço da respectiva ocupação de férmions f .

Introduzindo a notação $\epsilon^c \equiv (\epsilon^c - \mu)$ e $\epsilon^f \equiv (\epsilon^f - \mu)$, e lembrando que $f^\dagger f = n^f = \alpha$, temos as projeções do hamiltoniano atômico $H_{at}^{(0)} = \epsilon^c c^\dagger c$ e $H_{at}^{(1)} = \epsilon^f + (\epsilon^c + U) c^\dagger c$. Então,

$$Z_\alpha = e^{-\alpha\beta\epsilon^f} \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \bar{\psi}[(\tau)(\partial_\tau + \epsilon_\alpha)\delta(\tau - \tau') + \eta(\tau - \tau')]\psi(\tau')}, \quad (2.6)$$

onde $\epsilon_\alpha = \epsilon^c + \alpha U$.

Usando representações de Fourier, em termos de frequências de Matsubara, para os campos fermiônicos,

$$\psi(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \bar{\psi}(\omega_n), \quad \bar{\psi}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_n e^{i\omega_n \tau} \bar{\psi}(\omega_n), \quad (2.7)$$

e, da mesma forma,

$$\eta(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_l e^{-i\omega_l(\tau - \tau')} \eta_l, \quad (2.8)$$

obtemos, após um desenvolvimento simples,

$$S_\alpha = - \sum_n (i\omega_n - \epsilon_\alpha - \eta_n) \bar{\psi}(\omega_n) \psi(\omega_n). \quad (2.9)$$

Consequentemente, a função de partição pode ser escrita na forma

$$Z_\alpha = e^{-\alpha\beta\epsilon^f} \int \prod_n d\bar{\psi}_n d\psi_n e^{-\sum_n \bar{\psi}_n (i\omega_n - \epsilon_\alpha - \eta_n) \psi_n}. \quad (2.10)$$

De forma geral, dada uma matriz A , temos que

$$\int \prod_i d\bar{\psi}_i d\psi_i e^{-\sum_{ij} \bar{\psi}_i A_{ij} \psi_j} = \det A . \quad (2.11)$$

Assim, comparando (2.10) e (2.11), obtemos

$$Z_\alpha = e^{-\alpha\beta\epsilon^f} \prod_n (i\omega_n - \epsilon_\alpha - \eta_n) . \quad (2.12)$$

Como $Z = Z_0 + Z_1$, temos que

$$Z = \prod_n (i\omega_n - \epsilon^c - \eta_n) + e^{-\beta\epsilon^f} \prod_n (i\omega_n - \epsilon^c - U - \eta_n) , \quad (2.13)$$

ou ainda

$$Z = e^{\sum_n \ln(i\omega_n - \epsilon^c - \eta_n)} + e^{-\beta\epsilon^f \sum_n \ln(i\omega_n - \epsilon^c - U - \eta_n)} . \quad (2.14)$$

As funções de Green de uma partícula, na formulação de Matsubara, podem ser obtidas pela diferenciação funcional

$$G(\tau - \tau') = -\frac{1}{Z} \frac{\delta Z}{\delta \eta(\tau - \tau')} \Rightarrow G(i\omega_n) = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \eta_n} . \quad (2.15)$$

Utilizando a Eq. (2.14), obtemos

$$\begin{aligned} G(i\omega_n) &= (i\omega_n - \epsilon^c - \eta_n)^{-1} \frac{1}{Z} \prod_m (i\omega_m - \epsilon^c - \eta_m) \\ &+ (i\omega_n - \epsilon^c - U - \eta_n)^{-1} e^{-\beta\epsilon^f} \frac{1}{Z} \prod_m (i\omega_m - \epsilon^c - U - \eta_m) . \end{aligned} \quad (2.16)$$

Definindo

$$p \equiv e^{-\beta\epsilon^f} \frac{1}{Z} \prod_m (i\omega_m - \epsilon^c - U - \eta_m) = \frac{Z_1}{Z} , \quad (2.17)$$

a Eq. (2.13) implica em que

$$\frac{1}{Z} \prod_m (i\omega_m - \epsilon^c - \eta_m) = \frac{Z_0}{Z} = 1 - p , \quad (2.18)$$

e podemos escrever a função de Green na forma

$$G = \frac{1 - p}{i\omega_n - \epsilon^c + \mu - \eta_n} + \frac{p}{i\omega_n - \epsilon^c + \mu - U - \eta_n} , \quad (2.19)$$

onde voltamos à notação que explicita o potencial químico.

As Eqs. (2.17) e (2.18) indicam claramente que p é a probabilidade de encontrar o sítio ocupado por uma partícula localizada f , sendo, portanto, igual ao número médio dessas

partículas no sítio, $\langle n^f \rangle$. Usando as formas explícitas de Z_1 e Z , a partir da Eq. (2.12), temos que

$$p = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon^f - \mu)} \prod_n \frac{(i\omega_n - \varepsilon^c + \mu - \eta_n)}{(i\omega_n - \varepsilon^c + \mu - U - \eta_n)} + 1}, \quad (2.20)$$

que pode ser escrita como

$$p = \langle n^f \rangle = \frac{1}{e^{\beta E^f} + 1}, \quad (2.21)$$

definindo uma *energia efetiva* das partículas f ,

$$E^f \equiv (\varepsilon^f - \mu) + T \sum_n [\ln(i\omega_n - \varepsilon^c + \mu - \eta_n) - \ln(i\omega_n - \varepsilon^c + \mu - U - \eta_n)]. \quad (2.22)$$

2.2 DMFT no caso paramagnético

Os resultados da seção anterior podem ser diretamente utilizados para a solução do problema efetivo de um sítio no tratamento do modelo AFK via DMFT. Para isso, basta substituir ε^c por ε_i^c , relativa a um sítio genérico da rede, e implementar a condição de autoconsistência para determinar o campo médio dinâmico, em conjunto com a média configuracional.

Nesta etapa, como estamos considerando a solução não magnética, devemos ter o mesmo número médio de elétrons com *spin up* e *down*, o que corresponde a iguais números médios de férmions c e f . Então, para uma densidade eletrônica n , teremos $p = n/2$, dispensando o cálculo de p . Por outro lado, o valor da densidade eletrônica fixa o potencial químico através da relação $[\langle n_i^c \rangle]_{\text{av}} = n/2$, sendo $\langle n_i^c \rangle$ obtido a partir de $G_{ii}(\omega)$. Devemos notar, aqui, a média configuracional $[\dots]_{\text{av}}$, necessária por se tratar de uma quantidade global. Este ponto será melhor detalhado adiante.

Como o objetivo principal é calcular densidades de estado, é conveniente trabalharmos com a função de Green retardada, que é obtida a partir da frequência de Matsubara pela continuação analítica $i\omega_n \rightarrow w + i\delta$, com $\delta \rightarrow 0^+$. Daqui em diante, não indicaremos explicitamente o deslocamento das energias em relação ao eixo real, ficando implícito que estaremos sempre tratando com a função de Green retardada. Para um sítio i da rede, temos

$$G_{ii}(\omega) = \frac{1-p}{\omega - \varepsilon_i^c + \mu - \eta(\omega)} + \frac{p}{\omega - \varepsilon_i^c - U + \mu - \eta(\omega)}. \quad (2.23)$$

Podemos, então, obter a DOS local (dependente de ε_i^c) pela relação

$$\rho(\omega, \varepsilon_i^c) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{ii}(\omega). \quad (2.24)$$

A solução do problema através da equação (2.23) ainda depende da determinação de p e $\eta(\omega)$. Para isso, devemos determinar a condição de autoconsistência apropriada.

Podemos ainda escrever a equação (2.23) na forma

$$G_{ii}(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_i + \mu - \eta(\omega) - \Sigma(\omega, \varepsilon_i)}, \quad (2.25)$$

em função da autoenergia $\Sigma(\omega, \varepsilon_i)$, que dá conta da interação entre as partículas, sendo dada por

$$\Sigma(\omega, \varepsilon_i) = pU + \frac{p(1-p)U^2}{\omega - \varepsilon_i + \mu - (1-p)U - \eta(\omega)}. \quad (2.26)$$

A determinação do campo médio dinâmico é feita através da condição de autoconsistência, seguindo a prescrição da DMFT, isto é, que a função de Green local seja a mesma, tanto obtida a partir da solução do problema original na rede quanto do problema efetivo de um único sítio com a mesma autoenergia (que é local). Considerando a forma genérica da função de Green na rede para um sistema sem desordem,

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\omega) + \mu}, \quad (2.27)$$

onde $\varepsilon(\mathbf{k})$ é a transformada de Fourier das integrais de *hopping* t_{ij} , a relação de autoconsistência é

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\omega) + \mu} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{[G_{ii}(\omega)]^{-1} - \varepsilon(\mathbf{k}) + \eta(\omega)} = G_{ii}(\omega), \quad (2.28)$$

onde usamos a Equação (2.25) no caso sem desordem ($\varepsilon_i = 0$). A segunda igualdade desta última equação determina uma relação entre $G_{ii}(\omega)$ e $\eta(\omega)$ que, juntamente com a equação (2.23), permite obter essas duas quantidades.

No caso desordenado, a autoconsistência somente faz sentido quando é feita a média configuracional das funções de Green, pois o campo médio dinâmico, o potencial químico e os números médios de partículas são quantidades globais. Considerando a média configuracional na equação (2.28) e convertendo a soma sobre vetores de onda em uma integral sobre as energias da banda, a relação de autoconsistência pode ser escrita na forma

$$G_{ii}^{\text{av}}(\omega) = \int \frac{\rho_0(\varepsilon) d\varepsilon}{[G_{ii}^{\text{av}}(\omega)]^{-1} + \eta(\omega) - \varepsilon}, \quad (2.29)$$

onde $\rho_0(\varepsilon)$ é a densidade de estados da banda *tight-binding* (não correlacionada) com energias $\varepsilon(\mathbf{k})$. Devemos notar que é através de $\rho_0(\varepsilon)$ que é feita a conexão com a rede original.

A média configuracional é feita a partir da escolha de uma função de distribuição de probabilidades $P(\varepsilon_i)$ para as energias locais. Por simplicidade, utilizaremos a escolha mais usual, isto é, uma distribuição uniforme $P(\varepsilon_i) = \Theta(\Delta/2 - |\varepsilon_i|) / \Delta$, onde $\Theta(x)$ é a função de Heaviside.

O procedimento de cálculo numérico utiliza a sequência de passos descrita a seguir.

1. Escolhe-se um valor inicial do potencial químico.
2. Escolhe-se aleatoriamente uma função $\eta(\omega)$ inicial, no intervalo de frequências apropriado (discretizado com uma separação tão pequena quanto possível entre frequências sucessivas).
3. Calcula-se a função de Green (2.23).
4. Obtém-se a DOS local $\rho(\omega, \varepsilon_i)$ pela Eq. (2.24).
5. Calcula-se a média configuracional $\rho_{\text{av}}(\omega)$, com média aritmética ou geométrica:

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

6. Determina-se a função de Green média, através da representação espectral

$$G_{ii}^{\text{av}}(\omega) = \int \frac{\rho_{\text{av}}(\epsilon) d\epsilon}{\omega - \epsilon}.$$

7. Esta função, juntamente com $\eta(\omega)$, define uma função

$$\xi(\omega) = [G_{ii}^{\text{av}}(\omega)]^{-1} + \eta(\omega)$$

que, levada à Eq. (2.29), gera uma nova função de Green através da integral

$$G_{ii}^{\text{av}}(\omega) = \int \frac{\rho_0(\epsilon) d\epsilon}{\xi(\omega) - \epsilon}.$$

8. O resultado da integral atualiza a função $\eta(\omega)$ através da relação

$$\eta(\omega) = \xi(\omega) - [G_{ii}^{\text{av}}(\omega)]^{-1},$$

quando se pode testar a autoconsistência e recomeçar o ciclo ou finalizar.

9. Fechado o ciclo de autoconsistência do campo médio dinâmico, calcula-se o número médio de elétrons c ,

$$\langle n^c \rangle = \int d\omega \rho_{\text{arit}}(\omega) f(\omega),$$

onde $f(\omega) = [e^{\beta\omega} + 1]^{-1}$. Esse número é comparado a $n/2$, ajustando-se o potencial químico e recomeçando o ciclo se necessário.

Devemos notar que o cálculo de $\langle n^c \rangle$ é feito com a média aritmética da DOS, que reflete o número total de estados, enquanto a média geométrica dá a distribuição somente dos

estados estendidos. O ciclo de ajuste do potencial químico não é necessário na situação de simetria partícula-buraco, quando μ está posicionado exatamente no centro da banda, que tem metade de seus estados ocupados.

Vamos considerar uma densidade de estados não correlacionada com a forma semi-elíptica que corresponde à rede de Bethe no limite de número de coordenação infinito, $\rho_0(\varepsilon) = \frac{4}{\pi W} \sqrt{1 - 4(\varepsilon/W)^2}$. Para essa rede, a equação (2.29) pode ser integrada analiticamente para obtermos uma funcional do tipo $\eta(\omega)[G_{ii}^{\text{av}}(\omega)]$. Além disso, a atualização do campo médio dinâmico pode ser feita alternativamente pela relação $\eta(\omega) = zt^2 G_{ii}^{\text{av}}(\omega) = \frac{W^2}{16} G_{ii}^{\text{av}}(\omega)$. Ela reflete o fato de que o caminho de um elétron pela rede de Bethe não envolve *loops* (laços), de forma que o retorno ao sítio de origem só pode ser feito pelo mesmo sítio vizinho de saída.

2.2.1 Condutividade

A condutividade óptica $\sigma(\nu)$ é uma medida eficiente das excitações eletrônicas. Ela mede a taxa de criação de pares elétron-buraco por absorção de fótons de frequência ν [47]. No limite de frequência nula, ela define a condutividade estática, que mede a resposta do sistema a um campo elétrico estático, relacionando a intensidade da corrente elétrica induzida com a intensidade do campo aplicado. Em um metal não magnético, a condutividade estática cresce até um determinado limite quando a temperatura é levada a zero, enquanto em isolantes ela cai como uma exponencial do tipo $\exp(-E_0/T)$. O limite não nulo da condutividade em um metal quando $\nu \rightarrow 0$ reflete o fato de que as funções de onda dos elétrons são estendidas no sistema, enquanto os isolantes têm portadores de carga que devem vencer uma certa barreira de energia E_0 para se moverem no sistema. Isso significa que a distinção mais marcante entre metais e isolantes ocorre no limite de temperatura nula, e, por essa razão, a transição metal-isolante é referida como uma transição de fase quântica [48].

O tensor condutividade, na Teoria da Resposta Linear, é dado pela fórmula de Kubo em termos da função de correlação corrente-corrente. Devido à ausência de *hopping* dos elétrons f no modelo FK, o operador de corrente refere-se somente aos elétrons c . Na DMFT, o cálculo dessa função é simplificado, visto que em dimensão infinita as dificuldades relacionadas à conservação de momentum desaparecem (correções de vértice indo a zero) e a condutividade óptica assume a forma simples [47, 49]

$$\sigma(\nu) = \sigma_0 \int d\epsilon \rho_0(\epsilon) \int d\omega \rho(\epsilon, \omega) \rho(\epsilon, \omega + \nu) \frac{f(\omega) - f(\omega + \nu)}{\nu}, \quad (2.30)$$

onde $f(\epsilon)$ é a função de Fermi, $\rho(\epsilon, \omega)$ é a densidade espectral de uma partícula (que neste caso coincide com a DOS local) e σ_0 contém constantes características do sistema (em

particular, *hopping* t).

O limite $\nu \rightarrow 0$ da equação (2.30), que dá a condutividade estática, pode ser escrito como

$$\sigma(0) = \beta \int d\epsilon \rho_0(\epsilon) \int d\omega [\rho(\epsilon, \omega)]^2 f(\omega)[1 - f(\omega)] , \quad (2.31)$$

onde $\beta = 1/T$ é o inverso da temperatura. Podemos obter, a partir daí, a resistividade $\varrho = 1/\sigma(0)$.

2.3 Ordem magnética no modelo AFK

A “ordem magnética” no modelo FK corresponde a uma distribuição ordenada dos férmions imóveis em um padrão de *tabuleiro de xadrez*, o que favorece a ocupação das “casas de cor oposta” pelos férmions móveis. A solução DMFT, que lida com um único sítio efetivo, é implementada pela divisão do sistema em duas subredes, A e B , com a condição $n_A^\lambda + n_B^\lambda = n/2$ ($\lambda = c, f$), pois trata-se de um ordenamento antiferromagnético e, portanto, com *spin* total nulo, o que corresponde ao mesmo número total de férmions c e f .

A solução do problema de único sítio, obviamente, não muda. Mas temos dois tipos de sítios, de forma que a expressão correspondente à equação (2.23) é

$$G_{ii\gamma}(\omega) = \frac{1 - \langle n_i^f \rangle_\gamma}{\omega - \varepsilon_i^c + \mu - \eta_\gamma(\omega)} + \frac{\langle n_i^f \rangle_\gamma}{\omega - \varepsilon_i^c - U + \mu - \eta_\gamma(\omega)} . \quad (2.32)$$

onde o índice $\gamma = A, B$ indica a subrede. Também podemos definir

$$\xi_\gamma = [G_{ii}^{\text{av}}(\omega)]^{-1} + \eta_\gamma(\omega) , \quad (2.33)$$

A relação de autoconsistência, porém, é mais complexa. Reescrevendo a Eq. (2.29) na forma

$$G_{ii\gamma}^{\text{av}}(\omega) = \int \frac{\rho_0(\epsilon) d\epsilon}{\xi_\gamma(\omega) - \epsilon} , \quad (2.34)$$

vemos que $\xi(\omega)$ pode ser visto como o inverso de uma função de Green *irredutível* local, $\mathcal{G}(\omega) = \xi^{-1}(\omega)$, que gera a função de Green da rede como uma série de potências do *hopping* ou, passando para o espaço de vetores de onda, uma série de potências de $\varepsilon(\mathbf{k})$. Isso significa que na Eq. (2.34) temos

$$\frac{1}{\xi(\omega) - \epsilon} = \mathcal{G} + \mathcal{G} \epsilon \mathcal{G} + \mathcal{G} \epsilon \mathcal{G} \epsilon \mathcal{G} + \dots \quad (2.35)$$

No caso de ordenamento AF, cada passo leva de uma subrede à outra, de modo que a

sequência é, por exemplo,

$$\mathcal{G}_A + \mathcal{G}_A \epsilon \mathcal{G}_B \epsilon \mathcal{G}_A + \dots = \frac{1}{\xi_A(\omega) - \epsilon^2 \mathcal{G}_B} . \quad (2.36)$$

Definindo $\xi \equiv \sqrt{\xi_A \xi_B}$, o lado direito da última equação pode ser transformado como segue

$$\frac{1}{\xi_A - \epsilon^2 \mathcal{G}_B} = \frac{\xi_B}{\xi^2 - \epsilon^2} = \frac{\xi_B}{2\xi} \left[\frac{1}{\xi - \epsilon} + \frac{1}{\xi + \epsilon} \right] . \quad (2.37)$$

As duas parcelas do último termo dão a mesma contribuição dentro da integral em ϵ , tendo em vista que $\rho_0(\epsilon)$ é uma função par. Então, podemos escrever a relação de auto-consistência para o caso AF como

$$G_{ii\gamma}^{\text{av}}(\omega) = \frac{\xi}{\xi_\gamma} \int \frac{\rho_0(\epsilon) d\epsilon}{\xi - \epsilon} . \quad (2.38)$$

De forma correspondente ao procedimento já realizado para o caso paramagnético, obtemos a DOS local (dependente de ε_i^c) por uma relação semelhante à equação (2.24), ou seja,

$$\rho_\gamma(\omega, \varepsilon_i^c) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{ii\gamma}(\omega) . \quad (2.39)$$

Uma dificuldade adicional surge nesse novo estudo, pois, embora a relação $n^c = n^f$ continue globalmente válida, ela não é localmente válida, pois é a quebra dessa igualdade local que gera uma magnetização de subrede não nula. Portanto, a Eq. (2.21) precisa ser usada, e duplicada, isto é, uma para cada subrede.

Um outro aspecto importante, diretamente associado ao procedimento numérico para a obtenção de uma solução autoconsistente, diz respeito aos números de ocupação. Por um lado, temos a condição

$$\frac{1}{2} \left[\langle n_A^c \rangle + \langle n_B^c \rangle + \langle n_A^f \rangle + \langle n_B^f \rangle \right] = n , \quad (2.40)$$

que precisa ser usada para ajustar o potencial químico. Por outro lado, temos a condição de spin total nulo

$$\langle n_A^c \rangle + \langle n_B^c \rangle = \langle n_A^f \rangle + \langle n_B^f \rangle , \quad (2.41)$$

pois estamos descrevendo um ordenamento AF.

Do ponto de vista numérico, devemos proceder com mais cuidado quando lidamos com logaritmos. Diante disso, podemos tomar um caminho que nos leve a uma convergência mais confiável e rápida. Inicialmente escrevemos as Eqs. (2.21) e (2.22) como

$$\langle n_i^f \rangle^{-1} = 1 + e^{\{\beta(\varepsilon_i - \mu) + \sum_n [\ln(i\omega_n - \varepsilon_i + \mu - \eta_m) - \ln(i\omega_n - \varepsilon_i + \mu - U - \eta_m) e^{i\omega_n 0^+}]\}} . \quad (2.42)$$

A condição dada pela Eq. (2.41) não é automaticamente satisfeita quando existe solução magnética, exceto no caso de banda semipreenchida. No caso geral, ela precisa ser imposta através do ajuste da energia de base das partículas f . Em princípio, esperaríamos ter a mesma energia local, pois os dois tipos de partículas estão representando diferentes orientações de spin dos mesmos elétrons. Porém, a perda da energia cinética nas partículas f precisa ser compensada por uma espécie de diferença de potencial químico $\mu_f = \mu + \delta_f$.

Podemos substituir a soma em frequências de Matsubara da função logarítmica por uma integral sobre frequências reais. A função de Green tem um corte de ramificação no eixo real com uma mudança de sinal na parte imaginária, acima e abaixo do corte. Então, as funções logarítmicas em $\langle n_i^f \rangle$ são analíticas acima e abaixo do eixo real (o único corte de ramificação está no eixo real) e há um comportamento do tipo $1/Z$ quando $|Z| \rightarrow \infty$ [30]. De uma forma geral, temos

$$\sum_{\omega_n} F(i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+} = -\frac{\beta}{2\pi i} \oint_c dz f(z) F(z), \quad (2.43)$$

onde $f(z)$ é a distribuição de Fermi-Dirac. Com isso definimos ($\alpha = 0, 1$)

$$I_\alpha \equiv \sum_n \ln(i\omega_n - \varepsilon_\alpha - \eta_n) e^{i\omega_n 0^+} = -\frac{\beta}{2\pi i} \oint_c dz f(z) \ln(z - \varepsilon_\alpha - \eta(z)). \quad (2.44)$$

O contorno C é deformado para C' , percorrendo paralelamente ao eixo x . Já que existe um corte de ramificação no eixo x , a integral em C' se torna a parte imaginária da integral de $-\infty$ a ∞ . E assim temos

$$I_\alpha = -\frac{\beta}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \ln(\omega - \varepsilon_\alpha - \eta(\omega)). \quad (2.45)$$

Com essas informações, agora podemos reescrever (2.42) como

$$\langle n_i^f \rangle^{-1} = 1 + e^{\beta(\varepsilon^f - \mu)} e^{(I_0 - I_1)}. \quad (2.46)$$

O próximo passo é simplificarmos a forma como (2.45) é apresentada, onde iremos considerar o limite atômico. Para isso, inicialmente lembremos que a forma usual da função de Fermi-Dirac $f(\omega) = (1 + e^{-\beta\omega})^{-1}$ pode ser reescrita como

$$f(\omega) = -\frac{1}{\beta} \frac{d}{d\omega} [\ln(1 + e^{-\beta\omega})]. \quad (2.47)$$

Consequentemente, (2.45) fica

$$I_\alpha = \frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(\omega - \varepsilon_\alpha - \eta(\omega)) d[\ln(1 + e^{-\beta\omega})]. \quad (2.48)$$

Integrando por partes, temos

$$I_\alpha = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{-\beta\omega}) \frac{[-d\eta/d\omega]}{(\omega - \varepsilon_\alpha - \eta(\omega))} d\omega. \quad (2.49)$$

Mas, no limite atômico, sabemos que $\eta_n = 0$, o que nos leva a escrevermos

$$I_\alpha^{at} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{-\beta\omega}) \text{Im} \left[\frac{1}{(\omega - \varepsilon_\alpha + i0^+)} \right]. \quad (2.50)$$

E finalmente temos

$$I_\alpha^{at} = \ln(1 + e^{-\beta\varepsilon_\alpha}). \quad (2.51)$$

De modo conveniente para abordagens numéricas, podemos reescrever (2.46) como

$$\langle n_i^f \rangle = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_0} e^{(I_0^{at} - I_1^{at})} e^{(I_0 - I_0^{at}) - (I_1 - I_1^{at})} + 1}. \quad (2.52)$$

Mas

$$e^{\beta\varepsilon_0} e^{(I_0^{at} - I_1^{at})} = e^{\beta\varepsilon_0} \exp \left[\frac{\ln(1 + e^{-\beta\varepsilon_0})}{\ln(1 + e^{-\beta\varepsilon_1})} \right]. \quad (2.53)$$

E assim podemos definir a energia efetiva para o limite atômico

$$E_i^{f(at)} = \frac{1 + e^{-\beta\varepsilon_0}}{1 + e^{-\beta\varepsilon_1}}. \quad (2.54)$$

E reescrevermos (2.22) como

$$E_i^f = E_i^{f(at)} + T[\Delta I_0 - \Delta I_1], \quad (2.55)$$

onde $\Delta I_0 = (I_0 - I_0^{at})$ e $\Delta I_1 = (I_1 - I_1^{at})$.

Capítulo 3

Modelo de uma banda no caso paramagnético

A partir do hamiltoniano do modelo FK introduzido no Capítulo 1, Eq. (1.2), podemos descrever o modelo de Anderson-Falicov-Kimball através do hamiltoniano

$$H = \sum_i (\varepsilon_i - \mu) (n_i^c + n_i^f) + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} c_i^\dagger c_j + U \sum_i n_i^f n_i^c. \quad (3.1)$$

As energias locais ε_i são consideradas idênticas para os dois tipos de férmions devido à sua correspondência com elétrons de spin *up down* ocupando os mesmos níveis locais. Elas se comportam como variáveis aleatórias independentes, com a mesma distribuição de probabilidade em todos os sítios. Neste trabalho vamos considerar uma distribuição uniforme com largura Δ (e altura $1/\Delta$), de forma que este novo parâmetro serve como uma medida de intensidade da desordem.

Neste trabalho, todos os resultados para o modelo de uma banda utilizarão a densidade de estados não correlacionada correspondente à rede de Bethe no limite de correlação infinita, mencionada no Capítulo 1, sendo que a largura de banda W será usada como unidade de energia. Dessa forma, todas as quantidades físicas com dimensão de energia serão indicadas por valores puramente numéricos, ficando implícito que esses valores devem ser interpretados como dados em unidades da largura de banda.

Nesta etapa inicial, concentramos nossa análise somente na fase paramagnética, mas posteriormente iremos estudar a existência e estabilidade de uma fase com ordem magnética, mais especificamente, um ordenamento do tipo *tabuleiro de xadrez*.

3.1 Densidades de estados e diagramas espectrais

Para realizar uma análise detalhada do problema, resolvemos numericamente as equações da DMFT, obtendo densidades de estados para diversos conjuntos de valores dos

parâmetros do modelo. Vamos escolher a largura de banda como unidade de energia, fixando $W = 1$ no que segue. Conforme comentamos anteriormente, vamos nos restringir, nesta etapa, ao caso sem ordem magnética, isto é, com invariância translacional (macroscópica, isto é, após a média configuracional).

O valor mais provável da densidade local de estados é usado para monitorar a transição metal-isolante mediada por correlação e/ou desordem. Ambos $\rho_{\text{geom}}(\omega)$ e $\rho_{\text{arit}}(\omega)$ são usados para distinguir entre as partes com *gap*, estados localizados sem *gap* e estados estendidos sem *gap* nos espectros. Então, classificamos os estados em uma dada energia ω como localizados por desordem, se $\rho_{\text{arit}}(\omega) > 0$ e $\rho_{\text{geom}}(\omega) = 0$; quando ambos $\rho_{\text{arit}}(\omega) = 0$ e $\rho_{\text{geom}}(\omega) = 0$, essa energia está em um *gap* devido a correlações.

Inicialmente, apresentamos resultados já conhecidos para a banda semipreenchida, $n = 1$. Temos cinco situações diferentes na solução homogênea (Fig. 3.1), caracterizadas pelos diferentes valores das densidades de estado ρ_{arit} e ρ_{geom} no nível de Fermi, que corresponde a $\omega = 0$, pois as energias de excitação são medidas em relação ao potencial químico. Podemos identificar as fases metálica, isolante de Mott, localização de Anderson sem um *gap* de Mott, estados localizados no *gap* de Mott e localização de Anderson com um *gap* de Mott. Essas diferentes situações são caracterizadas a seguir [34]:

1. $\rho_{\text{arit}}(0) \neq 0$, $\rho_{\text{geom}}(0) \neq 0$: metal;
2. $\rho_{\text{arit}}(0) = 0$, $\rho_{\text{geom}}(0) = 0$, $\int \rho_{\text{geom}}(\omega) d\omega \neq 0$: isolante de Mott;
3. $\rho_{\text{arit}}(0) \neq 0$, $\int \rho_{\text{geom}}(\omega) d\omega = 0$: localização de Anderson sem um *gap* de Mott;
4. $\rho_{\text{arit}}(0) \neq 0$, $\rho_{\text{geom}}(0) = 0$, $\int \rho_{\text{geom}}(\omega) d\omega \neq 0$: estados localizados no *gap* de Mott;
5. $\rho_{\text{arit}}(0) = 0$, $\int \rho_{\text{geom}}(\omega) d\omega = 0$: localização de Anderson com um *gap* de Mott.

Esses regimes aparecem para valores apropriados de U e Δ e definem as várias regiões do diagrama de fases. De forma simplificada, um estado metálico existe para U e Δ pequenos, o isolante de Mott é um estado estável para U grande e Δ pequeno, enquanto Δ suficientemente grande origina localização de Anderson. Observando ainda a Fig. 3.1, percebemos que existem três valores críticos para U . Baseados nestes valores, distinguimos três regimes diferentes, separados pelas linhas verticais tracejadas: (i) regime de interação fraca para $0 < U < 1/2$; (ii) regime de interação intermediária para $1/2 < U \lesssim 1.36$; e (iii) regime de interação forte para $U \gtrsim 1.36$.

Na análise para diferentes preenchimentos de banda, descrevemos a natureza dos estados de excitação de uma partícula através de diagramas de estados no planos energia-desordem ($\omega-\Delta$). Esses diagramas espectrais são obtidos nos três regimes identificados acima, escolhendo três intensidades específicas de interação, $U = 0.3$, $U = 0.9$ e $U = 1.5$. Para cada um desses valores de U , construímos os diagramas espectrais a partir da análise do comportamento das densidades de estados para diversas intensidades de desordem e

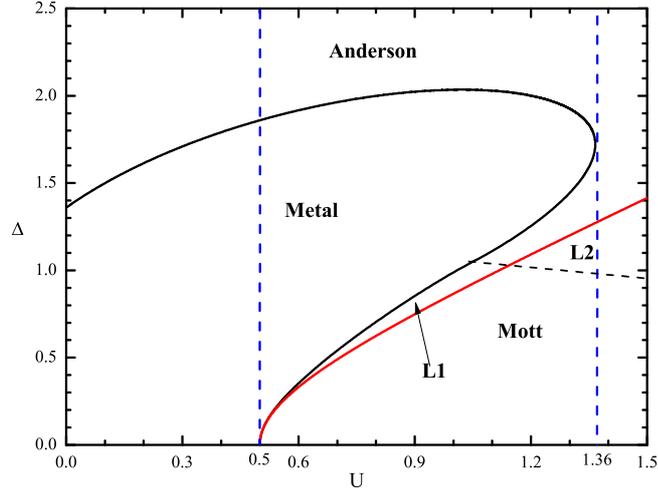


Figura 3.1: Diagrama de fases do modelo de Anderson-Falicov-Kimball para um elétron por sítio. L1 e L2 representam as duas últimas situações (4 e 5) caracterizadas no texto. As linhas tracejadas indicam limites entre três regimes claramente distintos.

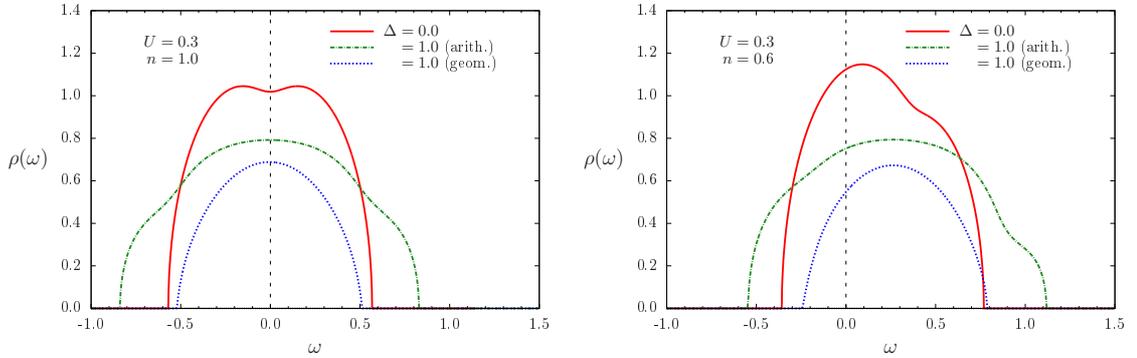


Figura 3.2: Densidade de estados (DOS) para o regime de interação fraca $U = 0.3$ com $n = 1.0$ à esquerda (banda semipreenchida) e $n = 0.6$ à direita. A linha em vermelho, contínua, representa a DOS sem desordem. A linha verde é obtida com média aritmética, enquanto a linha azul com média geométrica; ambas com desordem $\Delta = 1.0$. A linha vertical tracejada indica o nível de Fermi

concentrações eletrônicas diferentes, que vão de $p = 0.1$ a $p = 0.5$ (correspondendo a valores da concentração n entre 0.2 e 1.0).

Para o primeiro regime, onde a interação é pouco intensa ($U = 0.3$), apresentamos as densidades de estado no caso sem desordem e com $\Delta = 1.0$ (Fig. 3.2), ambos com médias aritmética e geométrica; naturalmente, quando o sistema não está sujeito a desordem, não há diferença entre os resultados apresentados por ambas as médias. Nessa figura podemos observar que a interação ainda não é o suficiente para provocar a abertura de um *gap* de correlação (Mott); notamos apenas uma pequena depressão no nível de Fermi (indicado pela linha vertical tracejada em $\omega = 0$) para o sistema sem desordem com a banda semipreenchida (gráfico à esquerda). Para a densidade de estados com média aritmética podemos notar o aumento da largura de banda, o que não acontece para a média geométrica; esta mostrando que há um estreitamento do espectro de estados estendidos,

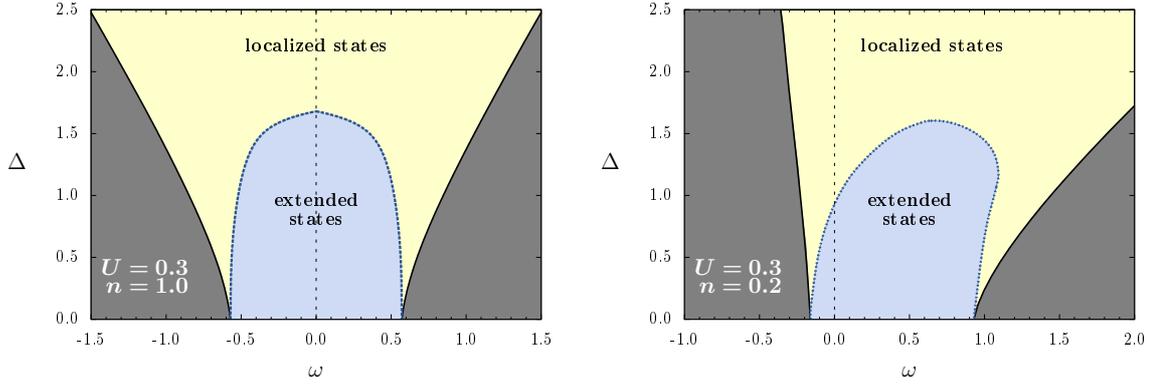


Figura 3.3: Diagrama espectral para $U = 0.3$, com $n = 1.0$ (esquerda) e $n = 0.2$ (direita). As linhas cheias delimitam a banda, enquanto as linhas tracejadas separam as regiões onde os estados estendidos ou localizados (posições das bordas de mobilidade em função da desordem).

com os estados das bordas de mobilidade tornando-se localizados. Uma análise da área de cada densidade de estados mostra que a área se conserva para a média aritmética, consistente com a conservação do número total de estados, mas se reduz para a média geométrica, refletindo a redução do número de estados estendidos. Observamos que as áreas para a média geométrica são diferentes para a mesma intensidade de desordem em diferentes concentrações, indicando que a localização de Anderson ocorrerá a valores distintos de Δ para diferentes valores de n . Observamos, ainda, a quebra de simetria partícula-buraco e consequente deslocamento do potencial químico (nível de Fermi em $\omega = 0$) em direção à borda da banda com a redução da concentração eletrônica.

A partir dos valores de ω para $\rho(\omega) = 0$, podemos construir o diagrama espectral, como visto na figura (3.3); esse tipo de diagrama mostra as regiões espectrais onde existem estados localizados ou estendidos na banda. Nos dois gráficos dessa figura, observamos os deslocamentos das bordas de banda, determinadas na DMFT com média aritmética (curva contínua em preto), e os deslocamentos das bordas de mobilidade, determinadas na DMFT com média geométrica (curva pontilhada em azul). Seguindo a linha tracejada que marca o nível de Fermi vemos que, com a intensificação da desordem, alcançamos a localização de Anderson quando cruzamos o limite entre estados estendidos e localizados. Além disso, esse aumento da desordem mostra uma característica imediatamente observada nesses diagramas que é o aumento da largura da banda.

Como mencionado anteriormente, não há nenhum *gap* de Mott nesse regime. É clara a deformação do diagrama espectral causada pela diferença de concentração, como podemos constatar ao compararmos os dois exemplos, pois apenas o caso $n = 1.0$ apresenta simetria partícula-buraco. O diagrama espectral para banda semipreenchida é qualitativamente similar ao modelo sem interação [46], o que indica que a correlação neste regime tem um papel pouco significativo.

No regime de interação intermediária, exemplificado por $U = 0.9$, onde , a exemplo

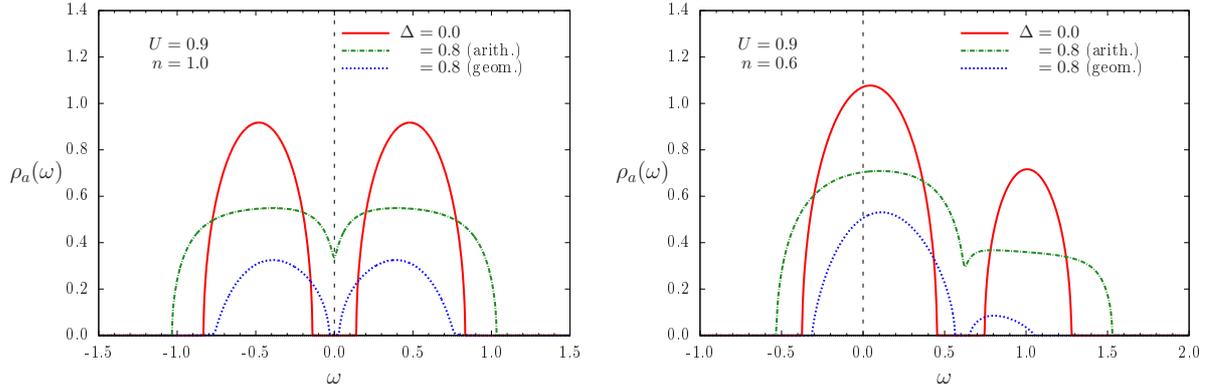


Figura 3.4: DOS com média aritmética e geométrica para interação $U = 0.9$, concentrações $n = 1.0$ e $n = 0.6$ e desordens $\Delta = 0.0$ e $\Delta = 0.8$.

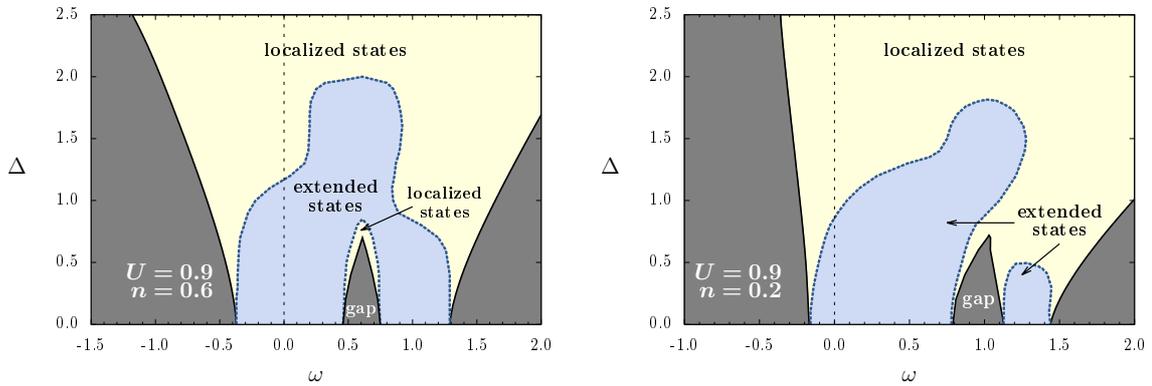


Figura 3.5: Diagramas espectrais para $U = 0.9$, com $n = 0.60$ e $n = 0.20$.

da Fig. 3.2, analisamos a evolução da densidade de estados com média aritmética e geométrica para as concentrações $n = 1.0$ e $n = 0.6$, e agora comparamos a DOS sem desordem com a DOS do sistema sujeito a uma desordem $\Delta = 0.8$. Já podemos observar a abertura de um *gap* na densidade de estados, como mostrado na Fig. 3.4. Esse *gap* vai se reduzindo com o aumento de desordem e é fechado rapidamente a um valor de $\Delta \simeq 0.8$. Neste exemplo, também observamos a perda da simetria partícula-buraco para $n \neq 1.0$. Além disso, é importante ressaltar que, embora exista um *gap* de correlação, o nível de Fermi está fora dele. Comparando as curvas para as duas médias, notamos que o *gap* se fecha primeiro com média aritmética, implicando que o *gap* observado com média geométrica é preenchido com estados localizados.

Na Fig. 3.5 podemos observar dois diagramas espectrais para o regime intermediário de interação, referentes a $n = 0.6$ e $n = 0.2$. O diagrama de maior densidade eletrônica tem topologia semelhante ao caso da banda meio-cheia, tendo como diferença essencialmente a inexistência da simetria partícula-buraco unicamente presente quando $n = 1.0$. Além das características já apontadas nos diagramas anteriores, a baixas intensidades de desordem podemos observar no diagrama para $n = 0.6$ a existência de um *gap* de Mott, separado

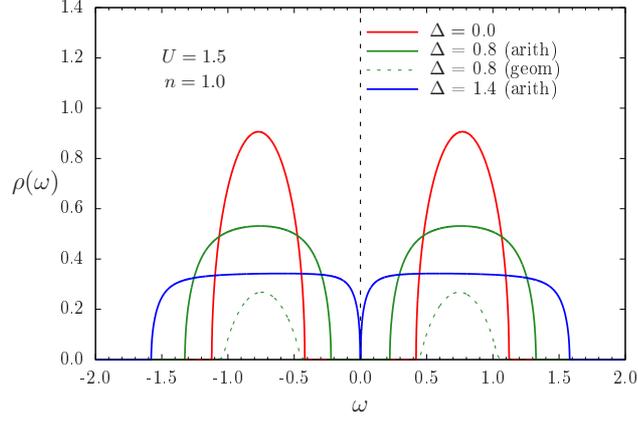


Figura 3.6: Densidade de estados para $U = 1.5$ com $n = 1.00$. A média geométrica mostra as duas sub-bandas de Hubbard, cujo peso espectral se reduz com o aumento da desordem, enquanto a média aritmética mostra o preenchimento do *gap* de Mott com estados localizados com o acréscimo de desordem .

dos estados estendidos por uma pequena região de estados localizados.

Para o caso de simetria partícula-buraco, o aumento progressivo da desordem provoca eventualmente o fechamento do *gap* de Mott, com o nível de Fermi passando por uma pequena região de estados localizados (isolante de Anderson) e na sequencia ficando em uma região de estados estendidos (fase metálica), até que, para desordem ainda mais intensa, ocorra a localização de Anderson. Com $n \neq 1.0$, aqui fica evidente a ausência da transição metal-isolante tipo Mott, embora exista um *gap* de correlação no espectro. Além disso, verificamos alterações interessantes das bordas de mobilidade à medida que a concentração se reduz. Porém, observando o que acontece no nível de Fermi, verificamos que a única transição que ocorre é a localização de Anderson, a um valor suficientemente grande de Δ . Para $n = 0.2$, vemos ainda que o nível de Fermi se encontra bastante próximo da borda inferior da banda, refletindo o baixo número de portadores de carga.

Para o regime de interação forte, $U = 1.5$, com $n = 1.0$, a Fig. 3.6 mostra a existência de duas sub-bandas de Hubbard. A média aritmética indica o preenchimento do *gap* de Mott com estados localizados para desordem mais intensa, já com respeito à DOS geométrica, é interessante observarmos que o efeito de desordem nessas sub-bandas é o de uma redução progressiva do seu peso espectral, até que, para valores suficientemente altos de Δ , deixem de existir estados estendidos.

No diagrama de fases para $n = 1.0$ (Fig. 3.1), vimos que no regime de interação forte temos somente um tipo de transição, correspondente à passagem de um isolante de Mott a um isolante de Anderson, ou seja, nesse regime não temos uma fase metálica. Observando o diagrama espectral para $U = 1.5$ e $n = 1.0$, mostrado na Fig. 3.7, temos a confirmação desse comportamento. Nele observamos que o nível de Fermi se localiza no centro de um *gap* bastante pronunciado, se estendendo até desordens mais intensas (por volta de $\Delta = 1.4$) e desaparecendo em uma região espectral que só contém estados localizados. Já

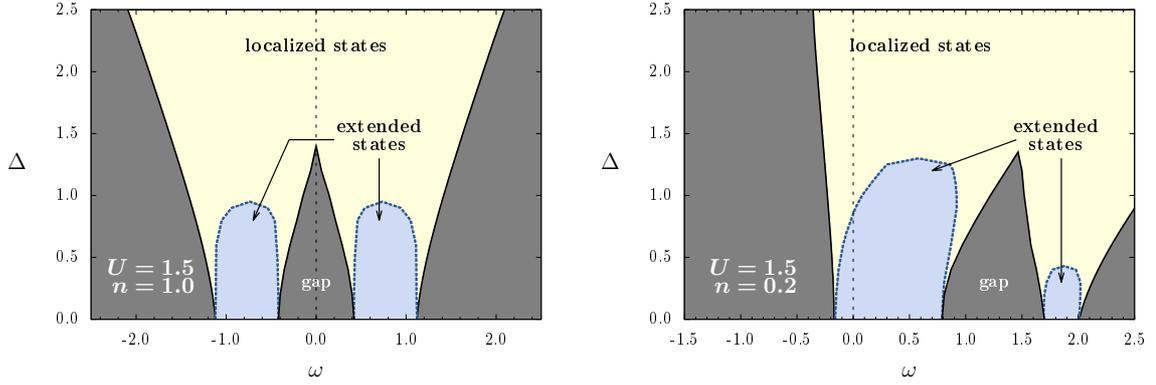


Figura 3.7: Diagramas espectrais no regime de interação forte, $U = 1.5$, para $n = 1.00$ (esquerda) e $n = 0.20$ (direita).

para o caso $n = 0.2$ (também apresentado na Fig. 3.7), embora a topologia do *gap* seja semelhante, o nível de Fermi está bem abaixo dele, ocorrendo a passagem direta de um estado metálico para um isolante de Anderson quando a desordem cresce.

3.2 Diagramas de fases

Coletando os diversos resultados obtidos pela análise das densidades de estados, podemos construir diagramas de fases semelhantes ao da Fig. 3.1, onde variamos U e Δ para diferentes preenchimentos de banda, como são mostrados na Fig. 3.8.

Como já mencionamos no momento de discussão da Fig. 3.1, as linhas para cada n correspondem a um valor de Δ em que, no nível de Fermi, se cruza a borda de mobilidade (limite entre estados estendidos e localizados) no diagrama espectral para cada U . A única exceção é o ponto em $U = 0.5$ e $\Delta = 0$ com $n = 1$, no qual a transição é uma MIT de Mott. Para todos os outros preenchimentos de banda, como pode ser visto na Fig. 3.8 a fase isolante de Mott não existe. Contudo, a MIT de Anderson é claramente afetada pela correlação. Obviamente, esse efeito é mais intenso perto do semipreenchimento e tende a desaparecer quando a densidade de elétrons se torna muito baixa.

Em densidades eletrônicas não muito distantes de $n = 1$, podemos ver que o estado metálico onde a desordem é baixa sofre uma rápida supressão com o aumento de Δ . Nesse *regime correlacionado de localização de Anderson*, o nível de Fermi se encontra em uma região de estados localizados próximos a um *gap* de correlação. Com uma maior desordem, vemos uma reentrância em um estado metálico, agora muito menos correlacionado (como veremos no estudo de condutividade), o qual é finalmente suprimido em uma região de intensa desordem, onde o estado *normal* de Anderson está presente. Num regime de baixa densidade eletrônica, a curva que delimita a MIT vai se modificando a ponto de aproximar-se de uma reta paralela ao eixo de interação, ou seja, um valor crítico de desordem onde teríamos a localização de Anderson em um sistema não interagente.

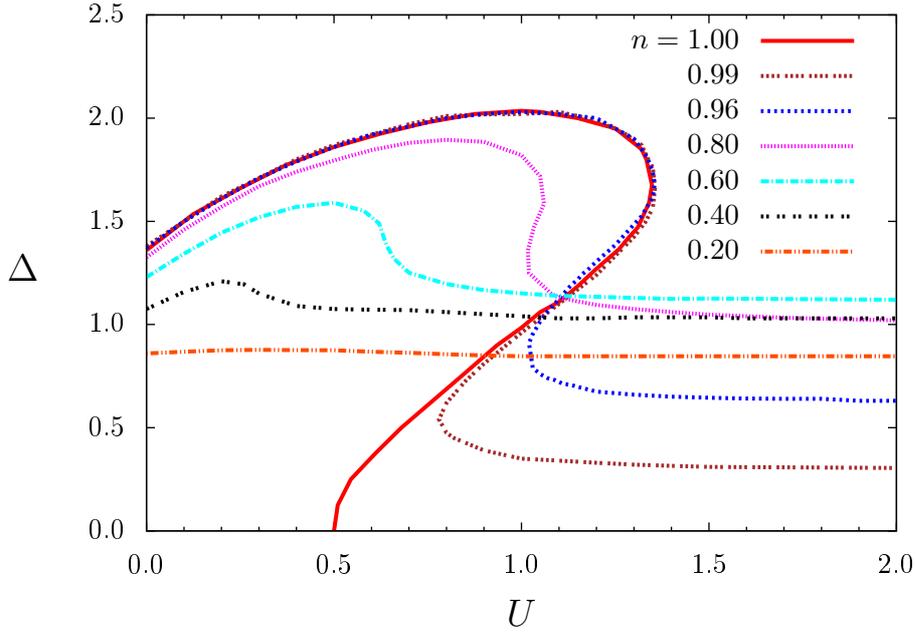


Figura 3.8: Diagramas de fases do modelo de Anderson-Falicov-Kimball para várias concentrações. A fase isolante de Mott existe somente para o caso de banda semipreenchida.

A presença de desordem em um sistema metálico, como vimos, pode levar à localização espacial dos estados eletrônicos próximos ao nível de Fermi (transição de Anderson) e, então, obtemos um estado isolante. Após essa transição, a condutividade DC (em temperatura nula) vai a zero, apesar de ainda existir uma DOS finita no nível de Fermi.

3.3 Condutividade dinâmica

As características que observamos nos diagramas espectrais devem reaparecer em análises de condutividade óptica, assim é interessante estudarmos essa quantidade em detalhes.

Na Fig. 3.9, temos alguns resultados de condutividade óptica para o regime de interação fraca. Apresentamos dois gráficos, onde temos curvas para diversas intensidades de desordem. O comportamento é essencialmente o esperado para um condutor, mas o pico de baixa frequência é progressivamente reduzido com o aumento da desordem e eventualmente desaparece quando ocorre a localização de Anderson, onde todos os estados se tornam localizados e a condutividade vai a zero. Embora o caso sem desordem seja o mais próximo de um metal normal, rigorosamente não temos um líquido de Fermi, como podemos ver pelo *inset* do primeiro gráfico, onde existe uma aproximação a um limite finito para $T \rightarrow 0$. Isto é consistente com o fato de termos uma interação não nula e estarmos tratando com o modelo FK, ou seja, sem a presença de processos de *spin-flip*.

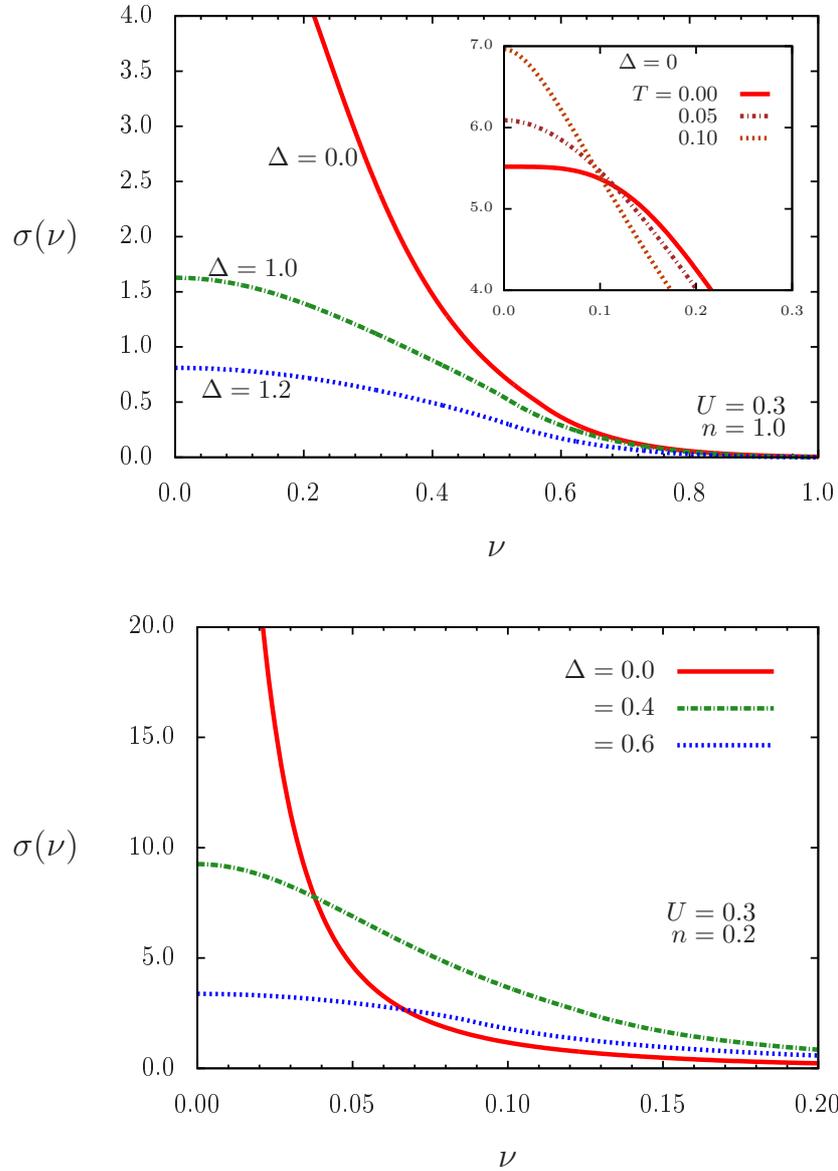


Figura 3.9: Condutividade em função da frequência para $U = 0.3$ e diversos valores de Δ . No gráfico superior $n = 1.0$, enquanto no gráfico inferior $n = 0.2$. O *inset* mostra em detalhes o limite de baixa frequência e o processo de ativação térmica.

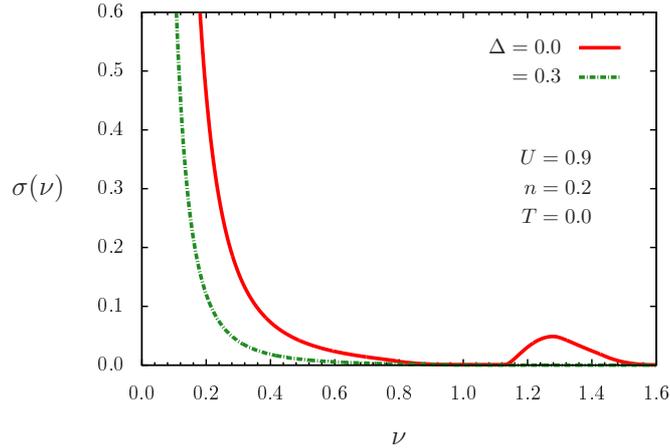


Figura 3.10: Condutividade óptica para $U = 0.9$, $n = 0.2$ e $T = 0.0$. Além do comportamento tipo Drude, uma condutividade finita surge na região de alta frequência que vai a zero com uma desordem baixa.

Ainda analisando o *inset* da Fig. 3.9, onde utilizamos três temperaturas ($T = 0, 0.05$ e 0.1), constatamos que há um processo de ativação térmica, causando um ganho de condutividade com $\nu \rightarrow 0$; Essa ativação é devida a existência de uma depressão na DOS no nível de Fermi, visível na Fig. 3.2.

No regime intermediário de interação, as características de baixa densidade permanecem as mesmas, em diferentes escalas, mostrando um comportamento “quase Drude”, exceto pelo surgimento de um lóbulo na região de altas frequências em correspondência à sub-banda superior de Hubbard, em concordância com os diagramas vistos nas Fig. 3.5 e 3.7; assim, temos a presença de um *gap* de correlação e essa pequena região de condutividade finita em alta frequência, devido a existência de estados estendidos acima desse *gap*, que rapidamente vai a zero com o aumento da desordem, como podemos constatar ao observarmos a Fig. 3.10. Em decorrência da localização de Anderson, o pico de baixa frequência vai a zero quando a desordem é intensa o suficiente.

Remetemo-nos agora às informações fornecidas pelo diagrama de fases referente ao caso onde a banda se encontra meio-cheia (Fig. 3.1). Como constatamos, há uma fase isolante de Mott que se estende a partir de interações intermediárias ($U = 0.5$). E ainda, de acordo com com aquele diagrama, existe um *gap* ~ 0.3 para $U = 0.9$. Assim, esperamos que a condutividade mostre uma característica de isolante, ou seja, $\sigma(\nu) = 0.0$ em algum intervalo de frequência, o que podemos confirmar no gráfico da Fig. 3.11. Nesta figura notamos a presença de um *gap* para desordem fraca e o estabelecimento de um regime metálico para desordem intermediária. Esse regime permanece, mas com uma condutividade que se reduz significativamente quando a intensidade da desordem se aproxima do limite para localização de Anderson e, naturalmente, indo a zero. Para esse caso, a sequência de estados, do isolante de Mott para metal e então isolante de Anderson, pode ser seguido ao longo de uma linha vertical em $U = 0.9$ no diagrama da Fig. 3.1.

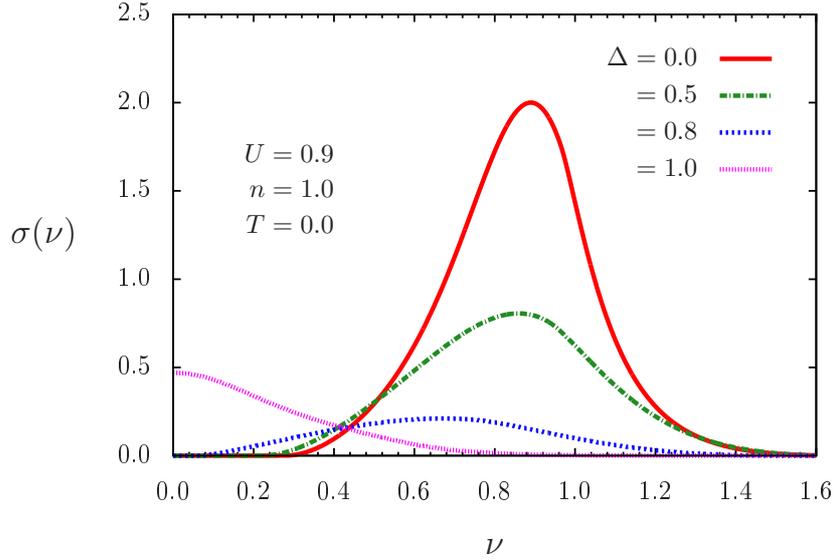


Figura 3.11: Condutividade óptica para o regime intermediário de interação ($U = 0.9$) com banda meio-cheia. O *gap* de Mott é visível para desordem fraca, mas um comportamento metálico é recuperado para um certo intervalo de valores de Δ (comportamento representado por $\Delta = 1.0$).

Para o regime de interação forte ($U = 1.5$), são observados comportamentos similares ao segundo regime de interação, exceto pelo fato de que os valores de condutividade são menores, principalmente a baixas frequências. No caso de banda meio-cheia, devido à maior extensão do *gap*, devemos nos atentar aos efeitos de temperatura na condutividade. É pertinente ressaltarmos que este efeito provém essencialmente das funções de Fermi que aparecem nas equações (2.30) e (2.31). As funções espectrais não são afetadas pela temperatura, exceto por um deslocamento pouco significativo do potencial químico, o que não ocorre quando a banda está meio-cheia devido à simetria partícula-buraco. O efeito que mais nos chama a atenção está relacionado ao efeito térmico na condutividade óptica, ocorrendo para um típico isolante de Mott, como mostramos na figura (3.12) para $U = 1.5$ e $n = 1.0$. O efeito de temperatura é o de “ligar” a condutividade no *gap* de Mott. Obviamente, esse efeito depende da temperatura e do tamanho do *gap*. Para esse caso onde a interação é forte, a temperatura necessária para ocorrer tal processo é alta a ponto de se tornar não física.

3.4 Condutividade estática

Apresentamos, aqui, uma análise sucinta do comportamento da condutividade estática em função da temperatura para o modelo que estamos estudando, considerando ainda os efeitos do grau de desordem. Como vimos na equação (2.31), a dependência com a

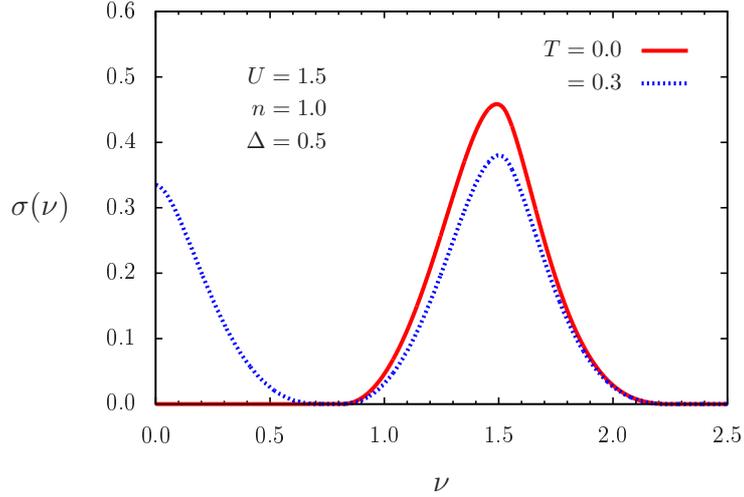


Figura 3.12: Efeito de temperatura na condutividade óptica para $U = 1.5$ e $n = 1$. A uma temperatura suficientemente alta há uma condutividade não nula no *gap* de Mott.

temperatura está relacionada ao fator $\beta = 1/T$ e à função de Fermi.

Podemos visualizar alguns resultados para a condutividade estática em função da temperatura para $U = 0.3$ e $n = 1.0$ na Fig 3.13, onde usamos várias intensidades de desordem. Para os três últimos valores de Δ , observamos um comportamento praticamente constante no intervalo de temperatura considerado (no máximo uma ordem de grandeza menor do que a largura de banda). Observamos um comportamento levemente diferenciado para os resultados com $\Delta = 0.0$ e $\Delta = 0.2$. Isso se deve ao fato de que nesse regime de interação, com pouca ou nenhuma desordem, a já mencionada depressão na DOS no centro da banda (observemos a Fig. 3.2), causando esse pequeno ganho de condutividade por ativação térmica.

De fato, fazemos uma melhor visualização dos efeitos de temperatura em um intervalo razoável obtidos da condutividade estática. Um caso que ilustra bem isso é mostrado na Fig. 3.14, onde $U = 0.9$ e $n = 1.0$, para várias intensidades de desordem. Nesse regime intermediário de interação temos resultados bem diferenciados do caso anterior. Isso é natural, pois agora temos a presença de um *gap* que se reflete no comportamento da condutividade estática para desordens mais baixas (entre $\Delta = 0.0$ e $\Delta = 0.8$). Nesse estado de Mott, o valor de $\sigma(T)$ cresce com o aumento da temperatura. Mas esse comportamento muda para um estado metálico com o aumento da desordem. Como um último regime, temos com que a progressão desse aumento causa uma redução da condutividade, levando a uma intensidade nula na localização de Anderson. Mesmo restrita a um valor específico de interação e preenchimento de banda, a Fig. 3.14 contém os dois tipos de comportamento observados nos outros casos estudados. Para $U = 0.3$ observamos somente um comportamento metálico, enquanto para $U = 1.5$ o comportamento é sempre isolante, do tipo ativado termicamente.

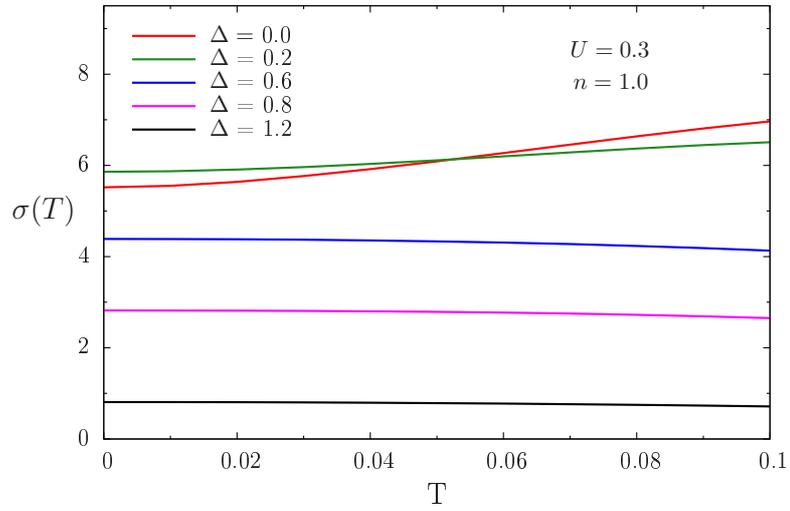


Figura 3.13: Condutividade estática em função da temperatura para o primeiro regime de interação e $n = 1.0$, com diversos valores de Δ . O comportamento é o de um condutor.

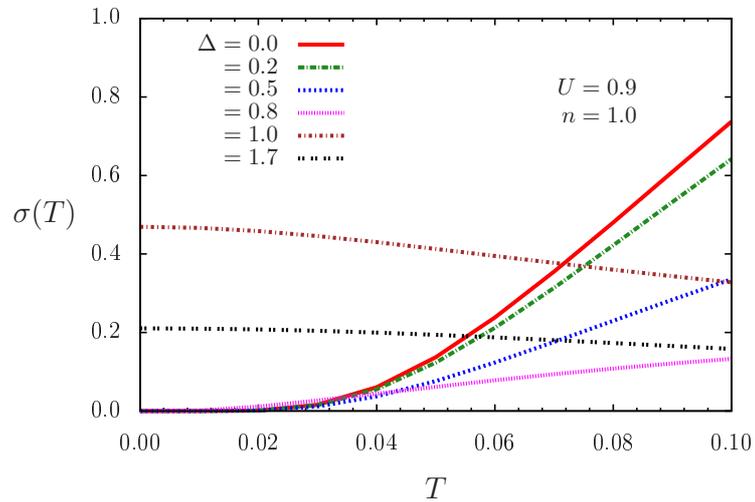


Figura 3.14: Condutividade estática em função da temperatura para $U = 0.9$, $n = 1.0$ e desordens de $\Delta = 0.0$ a $\Delta = 1.7$. A condutividade termicamente ativada na região isolante evolui para um estado metálico com o aumento de desordem.

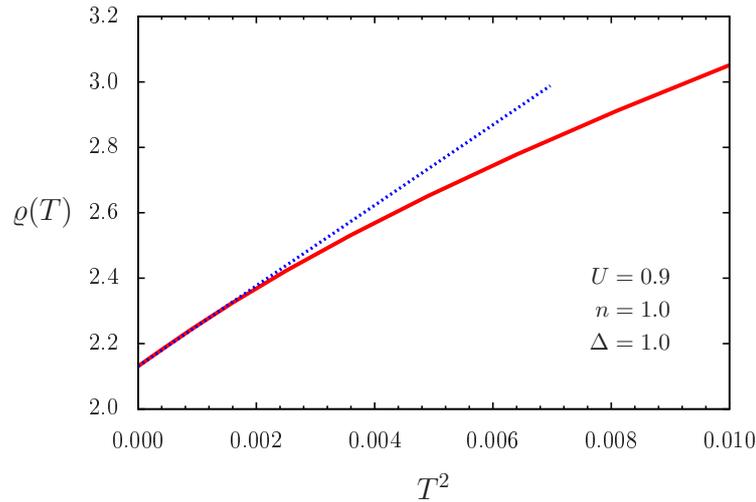


Figura 3.15: Resistividade em função de T^2 na região de baixa temperatura para o caso do estado metálico induzido por desordem. A linha tracejada é apenas um guia para visualizar o comportamento inicial tipo líquido de Fermi.

Chamamos agora a atenção para o fato de que plotar a resistividade $\varrho(T) = 1/\sigma(T)$ nos permite notar uma dependência com T^2 a temperaturas muito baixas, como podemos observar na Fig. 3.15, indicando que o regime metálico induzido por desordem é de natureza do tipo líquido de Fermi. Porém, não é isso o que acontece num sistema sem desordem, quando um estado metálico existe à baixa interação, como já observamos na condutividade óptica para $U = 0.3$. É importante ressaltarmos que os regimes metálicos e isolantes observados através da condutividade (estática ou dinâmica) são consistentes com os regimes que podem ser visualizados nos respectivos diagramas de fases da Fig. 3.8.

Capítulo 4

Modelo de uma banda com ordem magnética

Passamos agora a estudar a fase “magnética” do modelo Falicov-Kimball, procurando abordar não somente os efeitos de desordem, já estudados para banda semipreenchida [34], mas principalmente a combinação desses efeitos com os advindos de variações na concentração eletrônica. É conhecido o fato de que o estado paramagnético no modelo de Hubbard para uma banda semipreenchida e sem desordem é instável frente a um ordenamento antiferromagnético para qualquer valor não nulo de U . Essa instabilidade é observada no modelo FK e permanece na presença de desordem, mas somente abaixo de um Δ crítico que é função de U [34]. Portanto, torna-se interessante estudarmos como se altera esse comportamento fora da condição $n = 1$.

4.1 Densidade de estados na fase magnética

Como agora temos uma função de Green para cada subrede, naturalmente devemos obter a DOS correspondente a cada uma delas. Considerando que há a possibilidade de obtermos ordem magnética, esperamos que a forma como a DOS se apresenta seja distinta das que obtivemos até então.

Na Fig. 4.1 temos um exemplo de DOS para um sistema que apresenta ordem magnética em duas situações próximas: em ambos os casos temos $n = 1$ e ausência de desordem, mas existe uma pequena diferença nos valores da interação coulombiana U . Fazemos ainda uma comparação entre os casos PM e AF, sendo que a solução PM (que não é a solução estável para os parâmetros escolhidos) é obtida pelo procedimento empregado no Capítulo 3, isto é, impondo-se a condição $\langle n^f \rangle = \langle n^c \rangle = n/2$. A diferença entre os dois casos é mais visível na solução PM, pois temos um isolante de Mott para $U = 0.6$ e um metal para $U = 0.4$. Essa MIT observada entre os dois casos ($U = 0.4$ e $U = 0.6$) é facilmente identificada no diagrama de fases para a banda semipreenchida (Fig. 3.1),

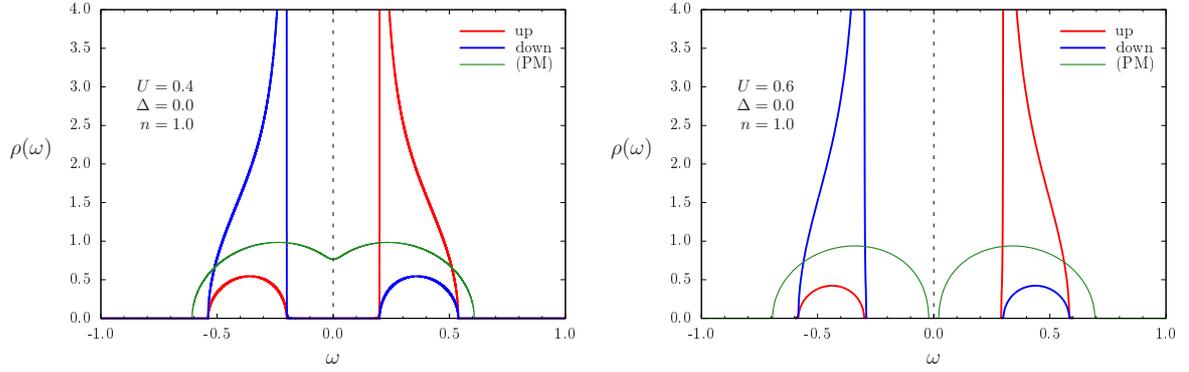


Figura 4.1: Densidade de estados para $n = 1.0$ e sem desordem ($\Delta = 0.0$), com $U = 0.4$ (esquerda) e $U = 0.6$ (direita). A linha vertical tracejada indica o nível de Fermi, mostrando que temos um isolante para o caso AF, enquanto a solução PM mostra a passagem por uma transição metal-isolante de Mott.

onde há uma transição de fases em $U = 0.5$ para $\Delta = 0.0$. A DOS na solução AF mostra essencialmente o mesmo comportamento, com a abertura de um *gap* no nível de Fermi devido ao ordenamento magnético. As designações *up* e *down* na figura são arbitrárias, correspondendo às densidades de estado para as subredes *A* e *B*. Como estamos tratando do caso de banda semi-preenchida, observamos a simetria em relação ao nível de Fermi, identificado na figura pela linha vertical tracejada.

Para exemplificar os efeitos de dopagem e desordem, na Fig. 4.2 vemos a densidade de estados para um sistema com interação $U = 1.8$, densidade $n = 0.95$ e três valores de amplitude de desordem, $\Delta = 0.5, 1.0$ e 1.5 . O efeito de densidade é similar ao que foi visto no caso paramagnético, especialmente no que diz respeito ao reposicionamento do nível de Fermi. Assim, o sistema passa a apresentar um caráter metálico, ou seja, temos um metal antiferromagnético ao sairmos do semipreenchimento. Porém, o aumento da desordem reduz rapidamente a média geométrica da DOS, que reflete a distribuição de estados estendidos, fazendo com que o sistema se torne um isolante de Anderson com ordem magnética. Também podemos notar que a intensidade da polarização magnética (diferença entre as densidades de estados das duas sub-redes) também é reduzida com o aumento da desordem. Esse efeito é amplificado pelo aumento da dopagem, que também tende a desestabilizar a ordem magnética.

Esse tipo de comportamento se repete para outras escolhas de parâmetros, em maior ou menor intensidade, podendo levar a estados com ou sem ordem magnética, com caráter isolante ou metálico. Realizamos uma análise sistemática do comportamento da DOS variando U , Δ e n , o que levou à determinação de diagramas de fases que serão apresentados adiante. Outras informações sobre a fase ordenada, incluindo o efeito da temperatura, podem ser obtidas através da magnetização de subrede, que analisaremos na próxima seção.

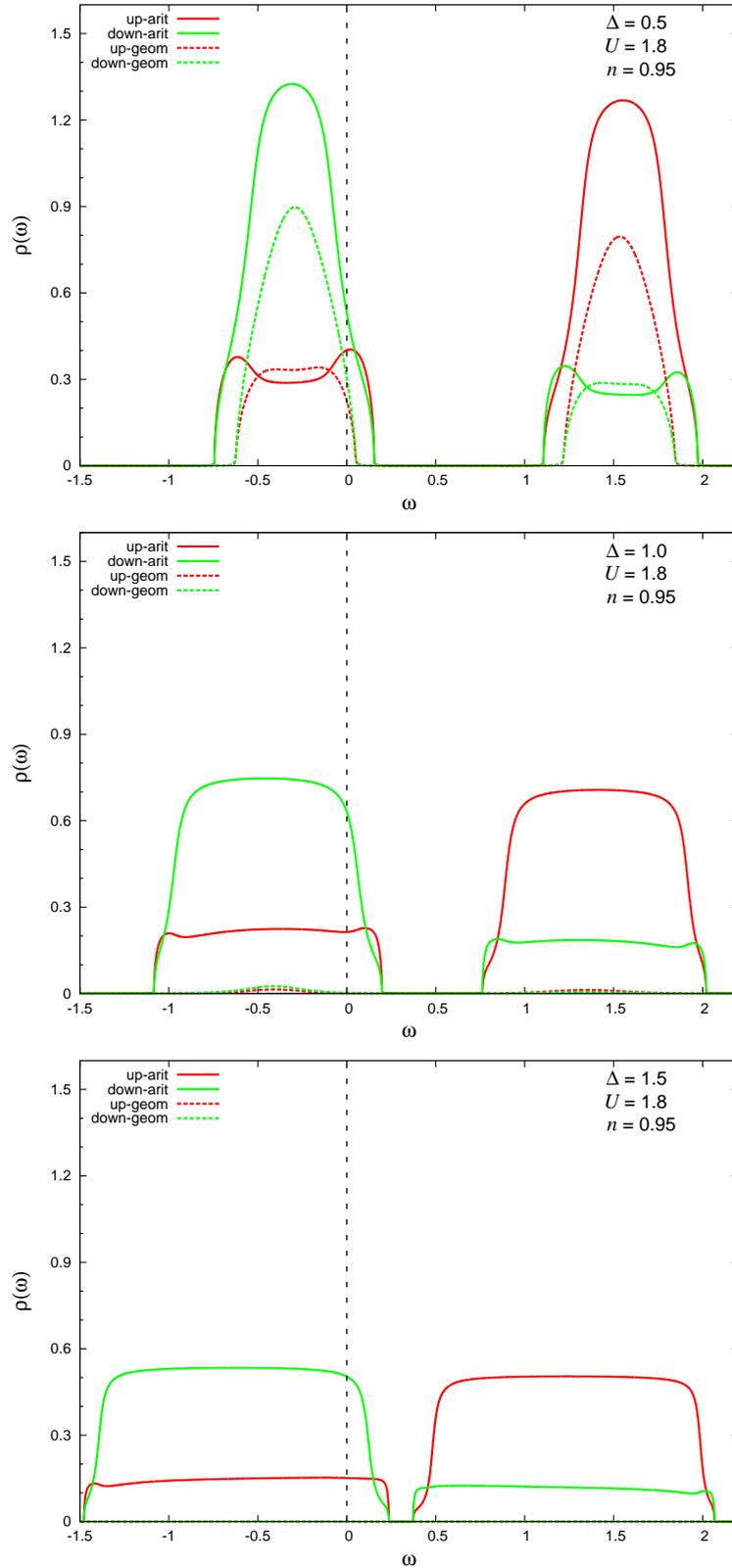


Figura 4.2: Densidade de estados para $n = 0.95$, $U = 1.8$ e três valores de Δ , em sequência crescente de cima para baixo. Observamos a passagem de um estado metálico para um isolante de Anderson, mantendo o caráter magnético.

4.2 Magnetização em função da temperatura

A fase com ordem magnética é caracterizada por uma diferença nos números médios de ocupação de cada tipo de partícula entre uma subrede e a outra. A magnetização de subrede propriamente dita deveria ser o módulo da diferença entre os números de ocupação f e c nos sítios de uma dada subrede, ou seja, $\frac{1}{2}|\langle n^c \rangle_A - \langle n^f \rangle_A|$, onde o fator $\frac{1}{2}$ vem do spin dos elétrons. Por outro lado, o parâmetro de ordem característico do ordenamento *chessboard* no modelo FK envolve a diferença de ocupação f entre as duas subredes, que é igual a 1 no caso $n = 1$ (sítios vizinhos alternadamente ocupados e não ocupados por partículas f). Considerando a mobilidade das partículas c , optamos por definir a “magnetização”

$$M = \frac{1}{2} |\langle n^f \rangle_A - \langle n^f \rangle_B| , \quad (4.1)$$

que satura no valor “clássico” $n/2$ da magnetização de subrede.

Veremos aqui quais os efeitos na magnetização provenientes da desordem e densidade de partículas, mas também incluindo a variação da temperatura, com o intuito de encontramos a temperatura na qual a magnetização vai a zero, ocorrendo a transição AF \rightarrow PM, ou seja, a *temperatura de Néel* T_N .

A Fig. 4.3 apresenta curvas de magnetização em função da temperatura para $n = 1$, intensidade de interação $U = 1.0$ e valores do parâmetro de medida da desordem que variam de $\Delta = 0.0$ a $\Delta = 0.7$. Uma primeira característica que observamos é a redução de T_N com o aumento da desordem. Assim, espera-se que para um certo valor de Δ haja uma transição AF \rightarrow PM com $T_N = 0.0$. Um outro efeito observado é que a magnetização deixa de saturar no valor máximo $M = n/2$ quando a desordem é suficientemente alta, o que ocorre para $\Delta = 0.7$ na figura.

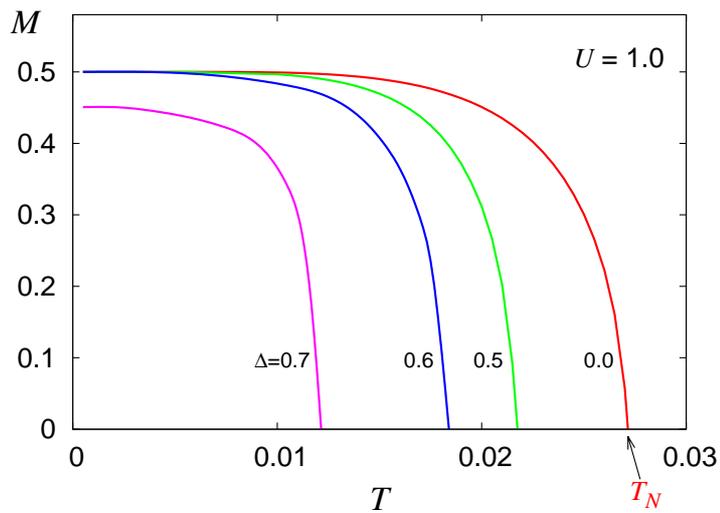


Figura 4.3: Efeito da desordem na magnetização versus temperatura para a banda semipreenchida e $U = 1.0$

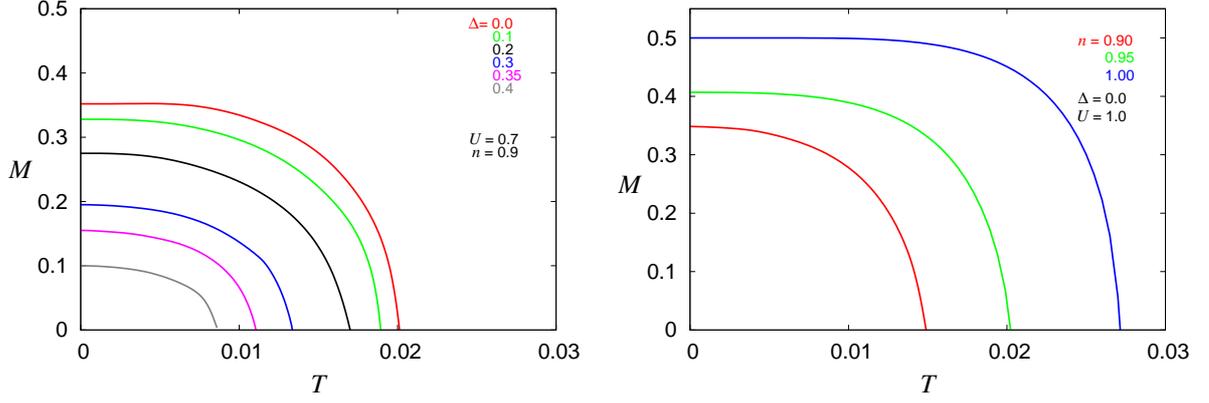


Figura 4.4: Redução progressiva de T_N por causas distintas. À esquerda variamos a desordem com $U = 0.7$ e $n = 0.9$, enquanto à direita variamos n , mantendo $\Delta = 0.0$ e $U = 1.0$.

Os efeitos de variação da dopagem e da desordem sobre as curvas de magnetização em função da temperatura são exemplificados na Fig. 4.4. Para um U fixo em cada caso, a figura mostra o comportamento das curvas M vs. T em função do aumento progressivo da desordem com n fixo (esquerda) ou redução progressiva da densidade com desordem fixa (direita). Em ambos os casos verifica-se a redução de T_N , assim como da magnetização de saturação. O papel da interação coulombiana será analisado em maior detalhe a seguir.

4.3 Diagramas de fases

Das curvas de magnetização, podemos extrair os valores de T_N a fim de construirmos diagramas de fases, analisando o comportamento da temperatura de Néel em função da interação, desordem e concentração de portadores de carga.

Como podemos ver na Fig. 4.5, na ausência de desordem, $T_N(U)$ cresce rapidamente na região de baixa interação, partindo de $U = 0.0$, até alcançar um valor máximo. A partir desse máximo, inicia-se uma curva decrescente menos acentuada, assemelhando-se ao comportamento tipo Heisenberg ($T_N \sim J \equiv t^2/U$) para interações mais intensas. Para $\Delta > 0$, o comportamento é similar, porém com valores e posições distintas do máximo de T_N , além de apresentar valores críticos $U_c > 0$ em $T_N = 0$, crescentes com Δ . Também observamos que a temperatura de Néel passa a não depender da desordem no regime de interação forte, tendo em vista que a natureza da desordem considerada aqui não afeta o *hopping* e, portanto, não afeta a interação de troca entre spins localizados nesse regime.

É possível analisarmos o efeito da variação de concentração eletrônica sobre $T_N(U)$ como visto na Fig. 4.6, na ausência de desordem. É marcante a influência da densidade de partículas, fazendo com que a fase AF torne-se cada vez menos presente no diagrama. Notamos ainda que não somente a desordem faz surgirem os valores de U_c já mencionados (pelo lado esquerdo) mas também passa a existir um segundo valor crítico de interação,

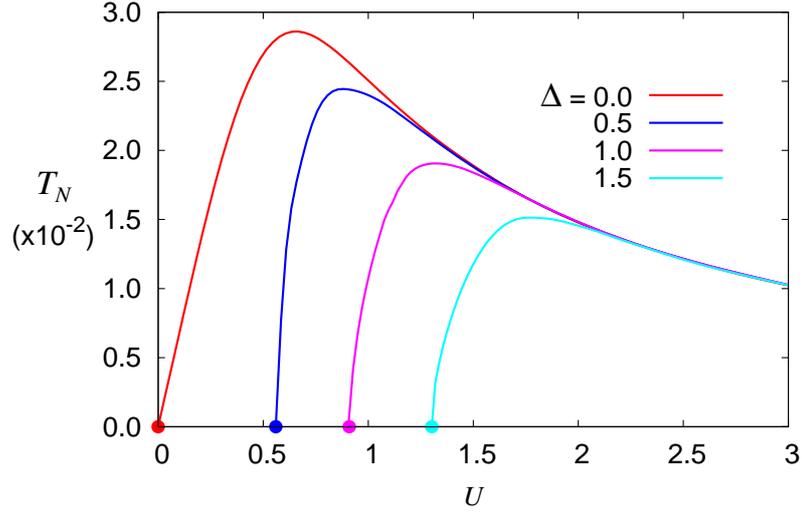


Figura 4.5: Temperatura de Néel em função da interação coulombiana para o caso $n = 1$, variando a intensidade da desordem. Abaixo das linhas temos uma fase antiferromagnética. Quando $\Delta > 0$, temos que $U_c > 0$. Para um regime de grande correlação, a desordem passa a não fazer efeito.

como podemos constatar para as concentrações $n = 0.80$ e $n = 0.78$. Com isso, o comportamento observado para dopagem nula ou muito baixa não é preservado, já que não há mais a tendência ao *clean-limit* de spins localizados.

Os resultados mostrados nas figuras anteriores podem ser reorganizados de uma forma que evidencie a variação de T_N em função da dopagem. Na Fig. 4.7, mantemos fixo o valor de interação coulombiana em $U = 0.5$ e incluímos o papel da desordem, destacando três valores de Δ . As linhas representam a transição entre as fases AF e PM, sendo que a região abaixo de cada curva corresponde a uma fase AF. Fica claro que a desordem faz diminuir os valores de T_N e conseqüentemente a fase AF torna-se cada vez menos presente. Podemos criar o mesmo tipo de gráfico, porém com $\Delta = 0$ e onde variamos U ; trata-se da figura (4.8), para a qual chamamos a atenção para a linha $n = 1.0$ a fim de analisarmos a comportamento de T_N . Os dados referentes a essa análise em específico estão dispostos na linha vermelha da figura (4.5).

Para reunir todas as informações coletadas até então, a respeito do comportamento magnético, podemos gerar diagramas de fases Δ vs. U para diferentes densidades. Como já mencionamos anteriormente, quando existe a solução antiferromagnética, ela é estável frente à paramagnética. Assim, sobre os diagramas de fases paramagnéticos, discutidos no Capítulo 3, superpomos a curva referente aos valores de Δ e U em que $T_N \rightarrow 0$, obtendo assim um diagrama de fases magnético. Utilizamos ainda quatro valores típicos da densidade de partículas, $n = 1.00, 0.95, 0.90$ e 0.80 , gerando os diagramas de fases mostrados na Fig. 4.9.

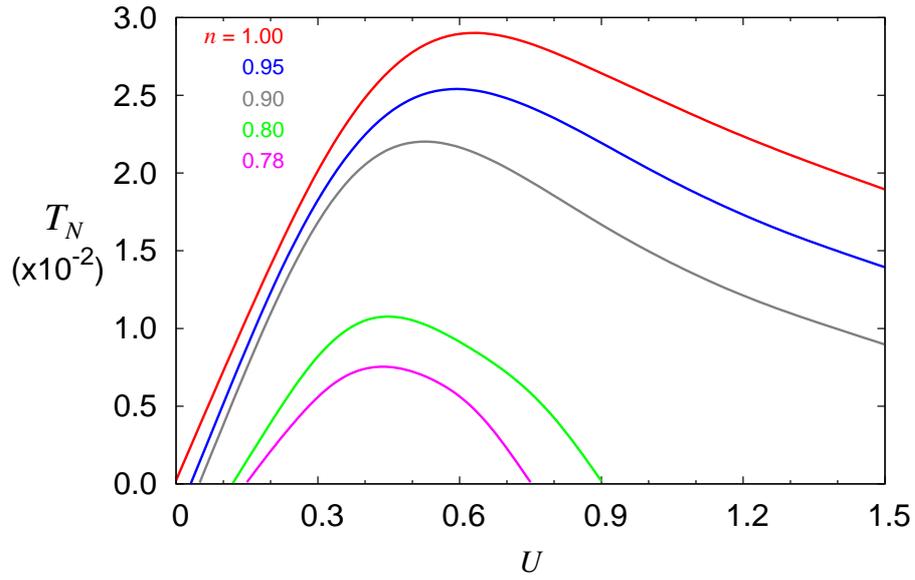


Figura 4.6: T_N em função de U para $\Delta = 0$ e $n \leq 1.0$. Surge um segundo valor crítico de interação pela direita, com a fase AF tornando-se cada vez menos presente no diagrama com a redução de n .

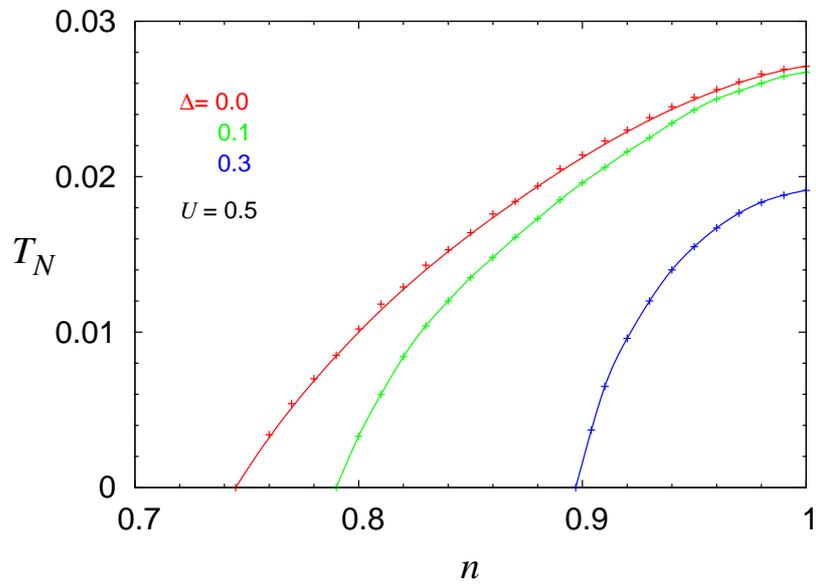


Figura 4.7: Temperatura de Néel vs. concentração para $U = 0.5$ e desordens $\Delta = 0$, $\Delta = 0.1$ e $\Delta = 0.3$. As linhas representam a transição entre as fases AF e PM, sendo que a região abaixo de cada curva corresponde a uma fase AF.

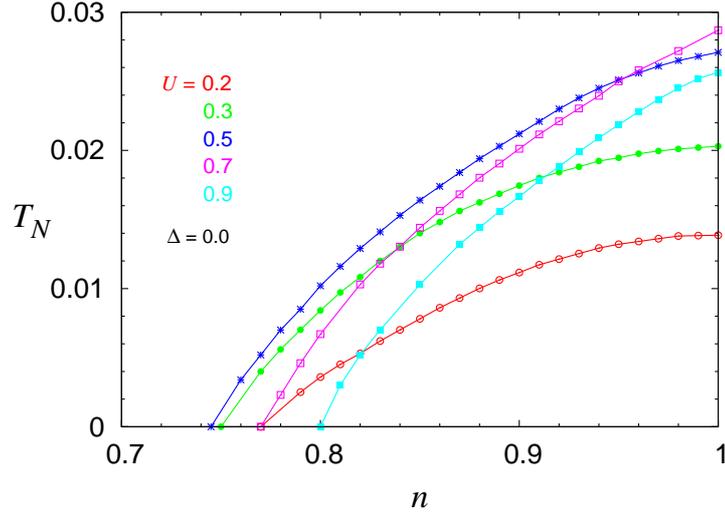


Figura 4.8: $T_N(n)$ vs. n na ausência de desordem, onde incluímos o efeito da interação, destacando vários valores de U no intervalo $0.2 \leq U \leq 0.9$.

Como podemos observar no gráfico superior esquerdo da Fig. 4.9, para $n = 1$ há uma riqueza de informações que devemos apresentar mais detalhadamente. A fase magnética é separada da não magnética pela linha azul contínua, na qual Δ aumenta com U . Vemos que a curva de Mott (azul pontilhada) ainda está presente, porém inteiramente dentro da região AF. Assim, teremos uma transição de uma fase magnética tipo isolante de Mott para uma fase magnética tipo isolante de Anderson. A região referente ao isolante de Anderson permanece a mesma que no caso paramagnético, porém temos agora uma parte onde tal isolante é magnético, como mostrado na figura. Notamos ainda a região destacada em cinza, onde há uma intersecção entre a curva referente ao caso paramagnético metálico e a curva da fase magnética. Vemos que em tal região há uma linha tracejada em preto, representando uma MIT. Acima dessa curva, temos um metal magnético, enquanto abaixo dela temos um isolante magnético em uma região onde não há um gap de Mott. O *gap* é aberto no nível de Fermi pelo estabelecimento da ordem magnética, que provoca uma reconstrução da superfície de Fermi. Em muitos sistemas isso é associado a um efeito de *nesting* da superfície de Fermi, o que explica o ordenamento para qualquer valor não nulo de U .

Quando diminuimos a concentração, temos uma menor complexidade do diagrama de fases em relação ao da banda semipreenchida. Para $n = 0.95$, notamos que ainda há uma intersecção de áreas, destacada em cinza. Porém, como no caso paramagnético, temos a ausência de *gap* de Mott, de forma que a curva que limitava a fase metálica, como vista na Fig. 3.8, permanece a mesma. Assim, a única diferença é que agora temos dois tipos de metal, um com ordem e outro sem ordem magnética. De forma semelhante, temos um isolante de Anderson magnético e outro paramagnético.

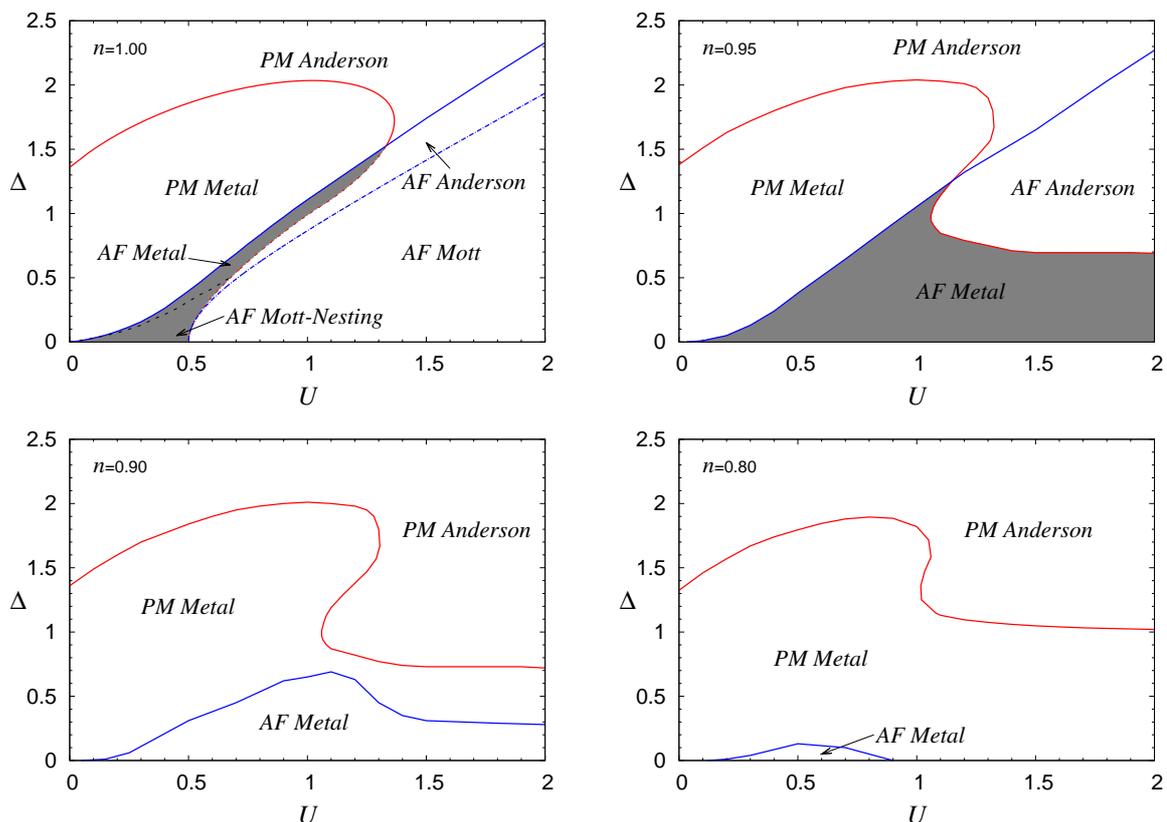


Figura 4.9: Diagramas de fases magnéticos para quatro concentrações: $n = 1.00$, 0.95 , 0.90 e 0.80 . Dependendo do conjunto de parâmetros, podemos ter isolantes por efeito de correlação (Mott), por localização (Anderson) e por efeito do ordenamento magnético (“nesting”), além das fases metálicas paramagnética e antiferromagnética.

Já para $n = 0.90$, notamos que os limites das regiões magnética e metálica não têm mais intersecção, o mesmo ocorrendo para $n = 0.80$. Assim, a fase magnética vai se tornando cada vez menos presente no diagrama, chegando a se tornar inexistente para valores pouco menores que $n = 0.80$. A partir daí voltamos aos diagramas de fases obtidos para o caso paramagnético (Fig. 3.8).

Concluindo esta parte do nosso estudo, gostaríamos de comentar que o comportamento de T_N , tanto com a dopagem quanto com a desordem, é observado em sistemas reais. Por exemplo, o diagrama de fases dos cupratos supercondutores de alta temperatura crítica, reproduzido na Fig. 1.6, mostra o decréscimo de T_N na região de baixa dopagem, antes do aparecimento de um “domo supercondutor” em dopagens intermediárias. A nossa abordagem não contempla uma solução supercondutora. Entretanto, podemos apresentar a variação com a dopagem e a desordem de uma medida da “metallicidade” do sistema, representada pelo valor da densidade de estados estendidos no nível de Fermi. Reunindo as duas informações, podemos apresentar um “diagrama de fases” qualitativo como mostrado na Fig. 4.10, que apresenta a mesma estrutura dos diagramas experimentais. Nessa figura, o eixo horizontal não indica a densidade eletrônica n , mas sim $\delta n \equiv 1 - n$, que mede a “dopagem” (no caso, com buracos) a partir da banda semipreenchida. Embora não te-

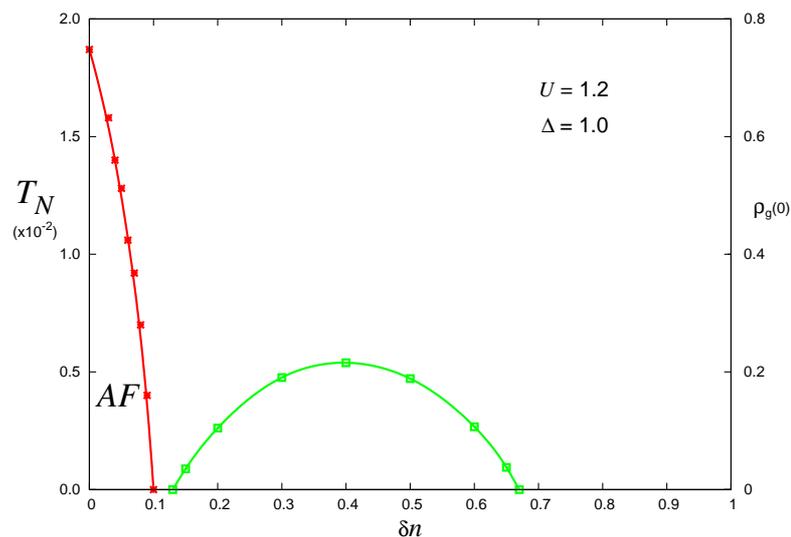


Figura 4.10: Diagrama de fases qualitativo com “domo supercondutor”, enfatizando a região de presença de estados estendidos no nível de Fermi

nhamos uma solução supercondutora, é razoável supor que existe uma correlação entre o valor da DOS no nível de Fermi e a temperatura crítica supercondutora, já que existe uma relação explícita entre essas duas quantidades se a supercondutividade é do tipo BCS [36, 37].

Capítulo 5

Modelo de três bandas

Após o término das duas etapas anteriores, estamos aptos a desenvolver toda a metodologia para o modelo de três bandas. Para os materiais cerâmicos supercondutores, sob a via experimental, muito se tem conseguido obter, mas do ponto de vista teórico é enorme o desafio para descrever tais materiais [?, 38]. Mesmo no estado normal, tem sido bastante complicado descrever sua estrutura eletrônica. Uma característica marcante dos HTSC (*High-Temperature Superconductors*) é a presença de planos formados por óxido de cobre (CuO_2), sendo estes os responsáveis pelo comportamento supercondutor no material [35, 39, 40, 42, 44]. Esses planos podem ser modelados por uma rede quadrada, sendo que a presença de três átomos por célula primitiva leva a um modelo de Hubbard de três bandas [35], já referido rapidamente no Capítulo 1.

Cabe observarmos que a unidade de energia, neste capítulo, será o valor do *hopping* t entre vizinhos na rede. No modelo de três bandas não existe um *scaling* desse hopping com a dimensão espacial, como no caso de uma banda, o que significa que a solução DMFT é uma aproximação em qualquer dimensão.

Com o modelo sem desordem [41], foi obtido o diagrama de fases mostrado na Fig. 5.1, onde podemos ver a variação da temperatura de Néel T_N em função de n , sendo que $n > 1$ corresponde à dopagem com buracos e $n < 1$ com elétrons. Nesse diagrama, podemos notar que a temperatura de Néel máxima ocorre com dopagem nula ($n = 1.0$). Em um diagrama experimental (Fig. 1.6), a região delimitada pela fase antiferromagnética não apresenta a continuidade em $n = 1.0$ observada na Fig. 5.1. Isso acontece porque as dopagens com buracos ou elétrons são feitas a partir de compostos diferentes, que apresentam, obviamente, temperaturas de Néel distintas. A expectativa mais natural é que a desordem altere a extensão do diagrama em dopagem, além do valor máximo de T_N . Também será interessante observarmos as alterações da densidade de estados, exemplificada para o caso sem desordem e com dopagem nula na Fig. 5.2, retirada da referência [41].

Conforme comentamos no Capítulo 1, podemos escrever a versão Falicov-Kimbal do

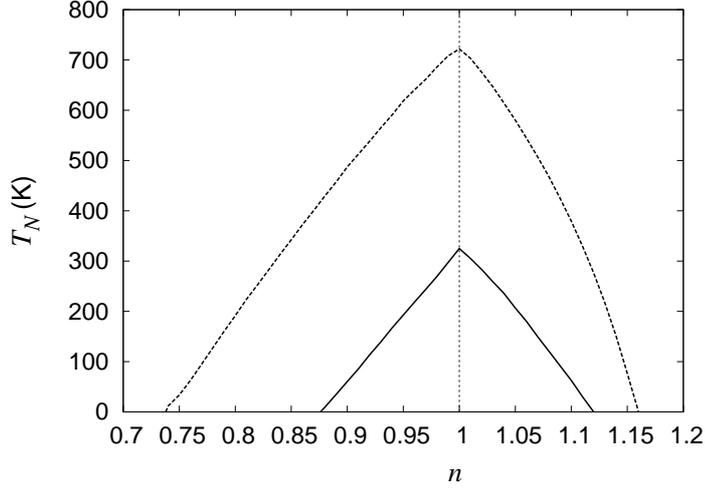


Figura 5.1: Diagrama de fases mostrando T_N em função da concentração n de buracos ($n > 1.0$) ou elétrons ($n < 1.0$) para $U = 7.2t$ (linha contínua), que é realista, e $U = 2.8t$ (linha tracejada), que maximiza T_N . Figura da referência [41].

modelo de Hubbard de três bandas (na representação de buracos) como

$$\mathcal{H} = \varepsilon_d \sum_i (n_i^d + n_i^f) + E_f \sum_i n_i^f + U \sum_i n_i^d n_i^f - t \sum_{\langle ij \rangle} (d_i^\dagger p_j + p_j^\dagger d_i). \quad (5.1)$$

Os orbitais d ($d_{x^2-y^2}$) do cobre estão centrados nos sítios de uma rede quadrada 2D, enquanto os orbitais p do oxigênio (p_x ou p_y) estão centrados entre os sítios de cobre. Na verdade, o modelo é efetivamente de duas bandas, tendo em vista que podem ser consideradas duas combinações lineares ortogonais dos orbitais p_x e p_y , sendo que uma delas não tem hibridização com os orbitais d do cobre, permanecendo como uma “banda” de largura zero. A energia de referência é $\varepsilon_p = 0$, e com isso nós temos $\varepsilon_d = -E_{CT}$, o *gap* de transferência de carga entre os níveis d e p . E_f deve ser ajustado para ter o número correto de elétrons localizados f .

5.1 Solução Paramagnética

Dado o hamiltoniano (5.1), devemos proceder de forma a desenvolvermos um método analítico baseado nas funções de Green via DMFT, como fizemos para o modelo de uma banda no Capítulo 2. Inicialmente, escrevemos as funções de Green para os dois orbitais da forma

$$G_{\mathbf{k}}^p(i\omega_n) = g_p(i\omega_n) + g_p(i\omega_n) V_{\mathbf{k}} \mathcal{G}_d(i\omega_n) V_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^p(i\omega_n) \quad (5.2)$$

$$G_{\mathbf{k}}^d(i\omega_n) = \mathcal{G}_d(i\omega_n) + \mathcal{G}_d(i\omega_n) V_{\mathbf{k}} g_p(i\omega_n) V_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^d(i\omega_n) \quad , \quad (5.3)$$

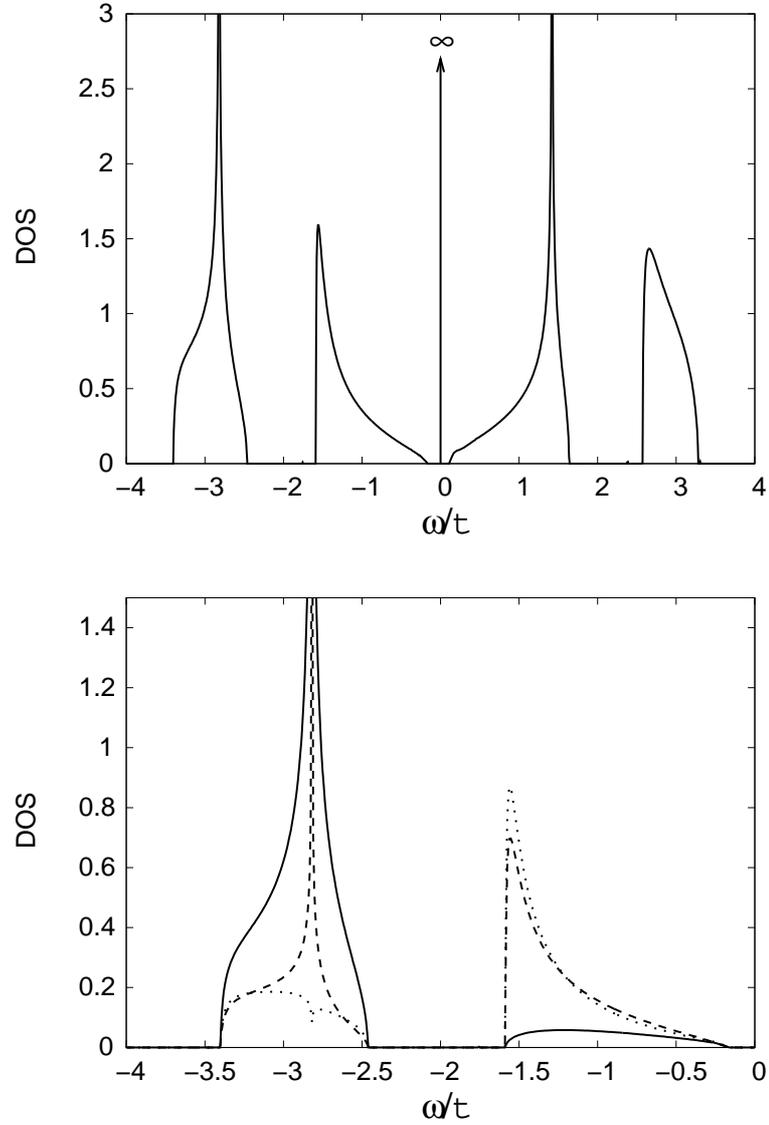


Figura 5.2: DOS no caso antiferromagnético para $U = 2.8t$, $E_{ct} = U/2$, $n = 1.0$ e $T \rightarrow 0$. No gráfico superior temos todas as bandas, inclusive a banda p não hibridizada em $\omega = 0$. No gráfico inferior temos o setor de baixa energia, mostrando explicitamente todas as contribuições: *spin-up d* (linha contínua), *spin-down d* (linha pontilhada) e p (linha tracejada). Figura da referência [41].

onde $\mathcal{G}_d(i\omega_n)$ é a função de Green irredutível de um sítio para os elétrons d , que inclui a interação local, enquanto escrevemos a função de Green referente aos elétrons p de uma forma mais simplificada dada por

$$g_p(i\omega_n) = (i\omega_n + \mu)^{-1} \quad (5.4)$$

já que os elétrons p não são correlacionados.

Alternativamente, podemos substituir a Eq. (5.2) por

$$G_{\mathbf{k}}^p(i\omega_n) = g_p(i\omega_n) + g_p(i\omega_n)V_{\mathbf{k}}G_{\mathbf{k}}^d(i\omega_n)V_{\mathbf{k}}g_p(i\omega_n), \quad (5.5)$$

onde

$$V_{\mathbf{k}} = -2t\gamma_{\mathbf{k}} \quad (5.6)$$

comporta-se como uma hibridização d - p . Aqui, $\gamma_{\mathbf{k}}$ vem da transformada de Fourier do termo de hopping em (5.1). Podemos facilmente mostrar que

$$\gamma_{\mathbf{k}}^2 = 1 - \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y) = 1 + \epsilon_{\mathbf{k}}, \quad (5.7)$$

onde $\epsilon_{\mathbf{k}}$ é a relação de dispersão para a rede quadrada simples com meia largura da banda unitária, ou seja, $-1 \leq \epsilon_{\mathbf{k}} \leq 1$. Então,

$$V_{\mathbf{k}}^2 = 4t^2(1 + \epsilon_{\mathbf{k}}). \quad (5.8)$$

Partindo de (5.2), podemos escrever

$$G_{\mathbf{k}}^p(i\omega_n) = \frac{1}{[g_p(i\omega_n)]^{-1} - V_{\mathbf{k}}^2\mathcal{G}_d(i\omega_n)} = \frac{1}{[g_p(i\omega_n)]^{-1} - 4t^2\mathcal{G}_d(i\omega_n) - 4t^2\mathcal{G}_d(i\omega_n)\epsilon_{\mathbf{k}}} \quad (5.9)$$

e de (5.3)

$$G_{\mathbf{k}}^d(i\omega_n) = \frac{1}{[\mathcal{G}_d(i\omega_n)]^{-1} - V_{\mathbf{k}}^2g_p(i\omega_n)} = \frac{1}{[\mathcal{G}_d(i\omega_n)]^{-1} - 4t^2g_p(i\omega_n) - 4t^2g_p(i\omega_n)\epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (5.10)$$

A função de Green local para os elétrons d é

$$G_{ii}^d(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{[\mathcal{G}_d(i\omega_n)]^{-1} - 4t^2g_p(i\omega_n) - 4t^2g_p(i\omega_n)\epsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{[\widehat{\mathcal{G}}_d(i\omega_n)]^{-1} - \eta_d(i\omega_n)}. \quad (5.11)$$

Isso resulta na relação usual

$$[\widehat{\mathcal{G}}_d(i\omega_n)]^{-1} = [G_{ii}^d(i\omega_n)]^{-1} + \eta_d(i\omega_n), \quad (5.12)$$

onde η_d é o campo médio dinâmico (ou função de hibridização). Com isso, definimos a

função de Green local irreduzível para os elétrons d como

$$[\widehat{\mathcal{G}}_d(i\omega_n)]^{-1} \equiv [\mathcal{G}_d(i\omega_n)]^{-1} - 4t^2 g_p(i\omega_n). \quad (5.13)$$

Neste momento vale a pena observarmos dois pontos:

- A “função de conexão” $V_{\mathbf{k}}^2 g_p$ tem uma parte *local*, $4t^2 g_p$, e uma parte *não-local*, $4t^2 g_p \epsilon_{\mathbf{k}}$.
- A parte local renormaliza \mathcal{G}_d para $\widehat{\mathcal{G}}_d$. Então, podemos escrever a Eq. (5.3) como

$$G_{\mathbf{k}}^d(i\omega_n) = \widehat{\mathcal{G}}_d(i\omega_n) + \widehat{\mathcal{G}}_d(i\omega_n) 4t^2 g_p(i\omega_n) \epsilon_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^d(i\omega_n). \quad (5.14)$$

que pode ser obtida da Eq. (5.10) usando a Eq. (5.13).

Das Eqs. (5.11), (5.12) e (5.13), obtemos uma condição de autoconsistência dada por

$$G_{ii}^d(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{[G_{ii}^d(i\omega_n)]^{-1} + \eta_d(i\omega_n) - 4t^2 g_p(i\omega_n) \epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (5.15)$$

que podemos escrever como

$$G_{ii}^d(i\omega_n) = \frac{\xi_p}{4t^2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\xi - \epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (5.16)$$

onde definimos

$$\xi_p(i\omega_n) \equiv [g_p(i\omega_n)]^{-1} \quad (5.17)$$

$$\xi_d(i\omega_n) \equiv [\widehat{\mathcal{G}}_d(i\omega_n)]^{-1} = [G_{ii}^d(i\omega_n)]^{-1} + \eta_d(i\omega_n) \quad (5.18)$$

$$\zeta \equiv \frac{\xi_d \xi_p}{4t^2}. \quad (5.19)$$

A Eq. (5.19) permite-nos reescrever (5.16) como

$$G_{ii}^d(i\omega_n) = \frac{\zeta}{\xi_d} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\zeta - \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (5.20)$$

Então, podemos colocar a autoconsistência na forma integral

$$G_{ii}^d(i\omega_n) = \frac{\zeta}{\xi_d} \int \frac{\rho_0(\epsilon) d\epsilon}{\zeta - \epsilon}, \quad (5.21)$$

onde $\rho_0(\epsilon)$ é a DOS da rede quadrada, que pode ser dada por

$$\rho_0(\epsilon) = \frac{4}{\pi^2} \theta(1 - |\epsilon|) \frac{1}{1 + |\epsilon|} K \left(\frac{1 - |\epsilon|}{1 + |\epsilon|} \right), \quad (5.22)$$

em termos da integral elíptica completa de primeiro tipo,

$$K(s) = \int_0^1 \frac{dx}{[(1-x^2)(1-s^2x^2)]^{1/2}}. \quad (5.23)$$

Devido à forma das Eqs. (5.11) e (5.13), a solução de um sítio para Falicov-Kimbal é a usual, ou seja

$$G_{ii}^d(i\omega_n) = \frac{1 - \langle n_i^f \rangle}{i\omega_n - \varepsilon_d + \mu - \widehat{\eta}_d(i\omega_n)} + \frac{\langle n_i^f \rangle}{i\omega_n - (\varepsilon_d + U) + \mu - \widehat{\eta}_d(i\omega_n)}, \quad (5.24)$$

mas o campo médio dinâmico total atuando em um sítio d é

$$\widehat{\eta}_d(i\omega_n) \equiv \eta_d(i\omega_n) + 4t^2 g_p(i\omega_n). \quad (5.25)$$

Para μ fixo e levando-se em conta as definições (5.17-5.19), as Eqs. (5.21) a (5.25) fornecem uma solução autoconsistente para os elétrons d e f , com o número médio dos elétrons d sendo obtidos através de

$$\langle n_d \rangle = T \sum_n G_{ii}^d(i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+}. \quad (5.26)$$

Já que estamos focando na solução paramagnética, temos a condição $\langle n_f \rangle = \langle n_d \rangle$. Porém, o potencial químico deve ser ajustado para dar o número total de partículas escolhido. Então precisamos avaliar $\langle n_p \rangle$.

Da Eq. (5.9), nós temos que

$$G_{\mathbf{k}}^p(i\omega_n) = \frac{1}{[g_p(i\omega_n)]^{-1} - 4t^2 \mathcal{G}_d(i\omega_n) (1 + \epsilon_{\mathbf{k}})}. \quad (5.27)$$

Se multiplicarmos o numerador e o denominador por $\mathcal{G}_d^{-1}/4t^2$, e levarmos em conta as Eqs. (5.13), (5.18) e (5.19), facilmente notamos que

$$G_{\mathbf{k}}^p(i\omega_n) = \frac{[\xi_d + 4t^2 g_p(i\omega_n)]/4t^2}{\zeta - \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (5.28)$$

Então, somamos sobre \mathbf{k} e usamos a Eq. (5.16) para obtermos

$$G_{ii}^p(i\omega_n) = g_p(i\omega_n) [\xi_d + 4t^2 g_p(i\omega_n)] G_{ii}^d(i\omega_n). \quad (5.29)$$

Das Eqs. (5.19) e (5.21) resulta

$$G_{ii}^p(i\omega_n) = g_p(\zeta + 1) \int \frac{\rho_0(\epsilon) d\epsilon}{\zeta - \epsilon}. \quad (5.30)$$

É importante ressaltarmos que esta não é uma condição de autoconsistência, já que ζ é determinada da autoconsistência relacionada à G_{ii}^d .

O número médio dos elétrons p pode ser obtido de

$$\langle n_p \rangle = T \sum_n G_{ii}^p(i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+}. \quad (5.31)$$

Notemos que está é somente a contribuição dos orbitais p que hibridizam com os orbitais d . Existe uma contribuição adicional proveniente da banda não-ligante (p'), dada por

$$\langle n_{p'} \rangle = \frac{1}{e^{-\beta\mu} + 1}. \quad (5.32)$$

Em princípio, todas as quantidades dependentes de frequência podem ser analiticamente continuadas no plano complexo ($i\omega_n \rightarrow z$). Então, a representação espectral geral de uma função de Green nos permite escrever

$$G_{ii}^\alpha(z) = \int \frac{\rho_\alpha(\omega) d\omega}{z - \omega}, \quad \alpha = d, p \quad (5.33)$$

onde

$$\rho_\alpha(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{ii}^\alpha(\omega + i0^+) \quad (5.34)$$

é a DOS local para excitações de uma partícula do tipo α .

Se usarmos (5.33) em (5.26) ou (5.31), e levarmos em conta a identidade

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{i\omega_n 0^+}}{i\omega_n - \varepsilon} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon} + 1} \equiv f(\varepsilon), \quad (5.35)$$

podemos obter os números médios de ocupação que são dados por

$$\langle n_\alpha \rangle = \int \rho_\alpha(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (5.36)$$

Notemos que μ aparece em $\rho_\alpha(\varepsilon)$ e não em $f(\varepsilon)$, devido a sua presença explícita no Hamiltoniano.

Algoritmo para o caso paramagnético – Iniciando com uma dada temperatura T e uma tentativa de potencial químico μ , o conjunto autoconsistente (5.17–5.19, 5.21–5.24, 5.29) é resolvido para as funções de Green, então as densidades de estados são obtidas de (5.34) e os números de ocupação (5.32,5.36); o número total é conferido com o valor desejado, μ é corrigido (se necessário), e o processo é iterado.

5.2 Solução Antiferromagnética

Primeiramente, observamos que a Eq. (5.14) tem exatamente a mesma estrutura conhecida para o caso de uma banda, exceto que $\epsilon_{\mathbf{k}}$ carrega o fator extra $4t^2 g_p(i\omega_n)$. Assumindo que a banda p não tenha polarização de spin, podemos proceder da mesma forma como no problema de uma banda para trabalharmos com ordenamento AF.

Dividindo a rede em duas subredes, A e B , podemos escrever uma equação equivalente à Eq. (5.14) para qualquer um deles. Por exemplo,

$$G_{\mathbf{k}}^A(i\omega_n) = \widehat{\mathcal{G}}_A(i\omega_n) + \widehat{\mathcal{G}}_A(i\omega_n) 4t^2 g_p(i\omega_n) \epsilon_{\mathbf{k}} \widehat{\mathcal{G}}_B(i\omega_n) 4t^2 g_p(i\omega_n) \epsilon_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^A(i\omega_n). \quad (5.37)$$

Então,

$$G_{\mathbf{k}}^A(i\omega_n) = \frac{\widehat{\mathcal{G}}_A(i\omega_n)}{1 - \widehat{\mathcal{G}}_A(i\omega_n) \widehat{\mathcal{G}}_B(i\omega_n) [4t^2 g_p(i\omega_n)]^2 \epsilon_{\mathbf{k}}^2}. \quad (5.38)$$

Adaptando as definições (5.18–5.19) para o caso magnético, nós temos

$$\xi_{\gamma}(i\omega_n) \equiv [\widehat{\mathcal{G}}_{\gamma}(i\omega_n)]^{-1} = [\mathcal{G}_{\gamma}(i\omega_n)]^{-1} - 4t^2 g_p(i\omega_n); \quad \gamma = A, B \quad (5.39)$$

e

$$\tilde{\xi} \equiv \sqrt{\xi_A \xi_B}; \quad \tilde{\zeta} \equiv \frac{\tilde{\xi} \xi_p}{4t^2}. \quad (5.40)$$

Com isso, a condição de autoconsistência fica

$$G_{ii}^A(i\omega_n) = \frac{\tilde{\zeta}^2}{\xi_A} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\tilde{\zeta}^2 - \epsilon_{\mathbf{k}}^2}. \quad (5.41)$$

Escrevendo o denominador na soma de vetores de onda como $(\tilde{\zeta} - \epsilon_{\mathbf{k}})(\tilde{\zeta} + \epsilon_{\mathbf{k}})$, separando as frações parciais e fazendo $\epsilon_{\mathbf{k}} \rightarrow -\epsilon_{\mathbf{k}}$ na segunda soma, chegamos a

$$G_{ii}^A(i\omega_n) = \frac{\tilde{\zeta}}{\xi_A} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\tilde{\zeta} - \epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (5.42)$$

correspondendo à forma integral

$$G_{ii}^{\gamma}(i\omega_n) = \frac{\tilde{\zeta}}{\xi_{\gamma}} \int \frac{\rho_0(\epsilon) d\epsilon}{\tilde{\zeta} - \epsilon}; \quad \gamma = A, B. \quad (5.43)$$

Notemos que isso reproduz a condição PM (5.21) se usarmos $\xi_A = \xi_B = \xi_d$, neste caso $\tilde{\zeta} \rightarrow \zeta$.

As outras equações necessárias para a solução autoconsistente com ordenamento AF são diretamente obtidas daquelas previamente derivadas do caso PM. Com isso, podemos

escrever a função de Green local e a função de hibridização, respectivamente, como

$$G_{ii}^\gamma(i\omega_n) = \frac{1 - \langle n_i^f \rangle^\gamma}{i\omega_n - \varepsilon_d + \mu - \hat{\eta}_\gamma(i\omega_n)} + \frac{\langle n_i^f \rangle^\gamma}{i\omega_n - (\varepsilon_d + U) + \mu - \hat{\eta}_\gamma(i\omega_n)} \quad (5.44)$$

$$\hat{\eta}_\gamma(i\omega_n) \equiv \eta_\gamma(i\omega_n) + 4t^2 g_p(i\omega_n) \quad (5.45)$$

De forma semelhante ao caso de uma banda, as equações que determinam os números de ocupação f em cada subrede são

$$\langle n_i^f \rangle^\gamma = \frac{1}{e^{\beta(\mathcal{E}_f^\gamma - \mu)} + 1} \quad (5.46)$$

$$\mathcal{E}_f^\gamma \equiv \varepsilon_d + E_f + T \sum_n [L_0^\gamma(i\omega_n) - L_U^\gamma(i\omega_n)] e^{i\omega_n 0^+} \quad (5.47)$$

$$L_0^\gamma(i\omega_n) \equiv \ln[i\omega_n - \varepsilon_d + \mu - \hat{\eta}_\gamma(i\omega_n)] \quad (5.48)$$

$$L_U^\gamma(i\omega_n) \equiv \ln[i\omega_n - (\varepsilon_d + U) + \mu - \hat{\eta}_\gamma(i\omega_n)] \quad (5.49)$$

Também podemos escrever a Eq. (5.47) em termos de frequência real,

$$\mathcal{E}_f^\gamma \equiv \varepsilon_d + E_f - \frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) [L_0^\gamma(\omega) - L_U^\gamma(\omega)] \quad (5.50)$$

com a usual continuação analítica $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$ aplicada a todas as funções de frequência.

O número médio dos elétrons não hibridizados p continua a ser dado pela Eq. (5.32), enquanto os números médios para todos os elétrons itinerantes ainda podem ser obtidos da Eq. (5.36), usada para os elétrons d ($\gamma = A, B$) como também para os elétrons hibridizados p . Com o intuito de obtermos a DOS para este último, precisamos encontrar a função de Green para os elétrons p no caso AF.

Já que metade dos vizinhos de qualquer átomo de oxigênio estão na subrede A e a outra metade na subrede B , devemos escrever a Eq. (5.27) como

$$G_{\mathbf{k}}^p(i\omega_n) = \frac{1}{[g_p(i\omega_n)]^{-1} - 4t^2 \bar{\mathcal{G}}_d(i\omega_n) (1 + \epsilon_{\mathbf{k}})}, \quad (5.51)$$

onde

$$\bar{\mathcal{G}}_d(i\omega_n) \equiv \frac{1}{2} [\mathcal{G}_A(i\omega_n) + \mathcal{G}_B(i\omega_n)]. \quad (5.52)$$

Com um desenvolvimento similar ao caso PM, nós chegamos de forma equivalente à Eq. (5.28),

$$G_{\mathbf{k}}^p(i\omega_n) = \frac{[\bar{\xi}_d + 4t^2 g_p(i\omega_n)]/4t^2}{\bar{\zeta}_d - \epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (5.53)$$

onde definimos

$$\bar{\xi}_d \equiv [\bar{\mathcal{G}}_d]^{-1} - 4t^2 g_p; \quad \bar{\zeta}_d \equiv \frac{\bar{\xi}_d \xi_p}{4t^2}, \quad (5.54)$$

de maneira que, após uma soma sobre \mathbf{k} , a função de Green local para os elétrons p assume uma forma similar a obtida para o caso PM, de modo que podemos escrever a Eq. (5.29) como

$$G_{ii}^p(i\omega_n) = g_p(i\omega_n) [\bar{\xi}_d + 4t^2 g_p(i\omega_n)] \overline{G_{ii}^d}(i\omega_n). \quad (5.55)$$

Aqui,

$$\overline{G_{ii}^d}(i\omega_n) = \frac{\bar{\zeta}_d}{\xi_d} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\bar{\zeta}_d - \epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (5.56)$$

tendo a mesma forma que a Eq. (5.20) no caso PM. Finalmente, levando a soma em \mathbf{k} a uma integral de energia, nós temos

$$G_{ii}^p(i\omega_n) = g_p(\bar{\zeta}_d + 1) \int \frac{\rho_0(\epsilon) d\epsilon}{\bar{\zeta}_d - \epsilon}. \quad (5.57)$$

Como relatamos para a solução PM, esta última equação depende do cálculo de $\bar{\zeta}_d$ da solução autoconsistente para a função de Green G_{ii}^A e G_{ii}^B para os elétrons d . Estes irão diretamente fornecer ξ_A e ξ_B , os quais determinam $\tilde{\xi} = \sqrt{\xi_A \xi_B}$, e conseqüentemente $\tilde{\zeta} = \tilde{\xi} \xi_p / 4t^2$. Dado que G_{ii}^p é determinado por $\bar{\zeta}_d$ (dependente de $\bar{\xi}_d$), deveríamos escrever esta última quantidade em termos de ξ_A e ξ_B . Observando que $\tilde{\xi}$ é uma *média geométrica* de ξ_A and ξ_B , também podemos definir uma *média aritmética*

$$\bar{\xi} \equiv \frac{1}{2} [\xi_A + \xi_B]. \quad (5.58)$$

Então, definindo

$$\bar{\zeta} \equiv \frac{\bar{\xi} \xi_p}{4t^2} \quad (5.59)$$

e após um pouco de álgebra, encontramos que

$$\bar{\zeta}_d = \frac{\tilde{\zeta}^2 + \bar{\zeta}}{\bar{\zeta} + 1}. \quad (5.60)$$

Podemos constatar que o limite PM é recuperado quando $\xi_A = \xi_B = \xi_d$, when $\tilde{\zeta}$, $\bar{\zeta}$, e $\bar{\zeta}_d$ tornam-se todos iguais a ζ .

Algoritmo para o caso antiferromagnético – Levando-se em conta as definições (5.40), resolvemos as Eqs. (5.43–5.50) autoconsistentemente para G_{ii}^γ ($\gamma = A, B$) e $\langle n_i^f \rangle^\gamma$. Isso também fornece $\bar{\zeta}_d$. Usamos a Eq. (5.57) para calcular G_{ii}^p . Determinamos $\langle n_p \rangle$ e $\langle n_d^\gamma \rangle$ através da Eq. (5.36), obtendo número total de partículas. Comparamos com o valor desejado, corrigimos μ (se necessário), e iteramos o processo.

5.3 Resultados Preliminares

Apresentaremos aqui os primeiros resultados obtidos para o modelo de Hubbard de três bandas, utilizando a aproximação Falicov-Kimbal com DMFT. Como pudemos notar pelas duas últimas seções desenvolvidas, temos um maior número de funções participantes dos ciclos autoconsistentes, de forma que todo o processo se torna muito mais “pesado” do ponto de vista numérico.

Inicialmente, sem ordenamento magnético, mostramos o caso mais simples possível, o que corresponde ao limite não interagente ($U = 0.0$) com um *gap* de transferência de carga nulo ($\varepsilon_d = -E_{CT} = 0.0$) e sem desordem ($\Delta = 0$). Esse caso específico pode ser observado nos dois gráficos da Fig. 5.3. Como era de se esperar, vemos uma estrutura diretamente decorrente da densidade de estados da rede quadrada.

As 3 bandas podem ser observadas ainda na Fig. 5.3, sendo elas a banda *d* do cobre, a banda *p* do oxigênio e a banda *p'* não hibridizada, representada pela seta vertical e localizada em $|\mu|$. Quando o *gap* de transferência de carga é nulo, temos que as bandas *d* e *p* são coincidentes (*p'* fica entre elas, no meio), como podemos observar pelos dois gráficos. Para um valor finito de E_{CT} , vemos a separação em sub-bandas. O nível de Fermi é representado pela linha vertical tracejada, indicando que, para os parâmetros adotados na figura, trata-se de um metal. No gráfico à direita, onde destacamos somente a banda *d*, analisamos o efeito do aumento na interação coulombiana, ficando nítida a abertura de um *gap* de correlação a partir de $U = 1.5$. Para esses dois gráficos, utilizamos densidade $n = 1.0$ e cabe lembrar aqui que esse valor não mais corresponde ao caso de banda semipreenchida, como estávamos acostumados nas etapas anteriores, pois estamos lidando com três bandas.

Nos dois primeiros gráficos da Fig. 5.3, utilizamos parâmetros puramente teóricos,

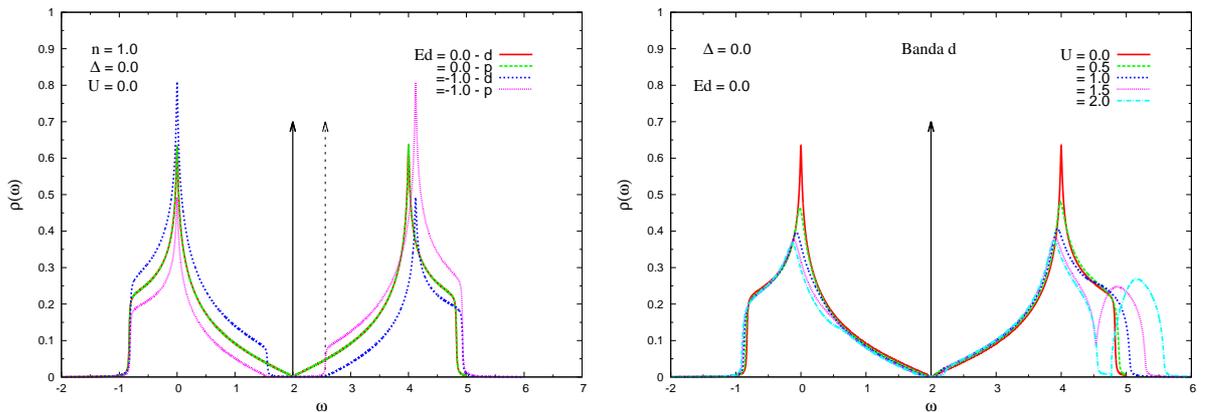


Figura 5.3: DOS para o modelo de Hubbard de 3 bandas onde $U = 0$, $\varepsilon_d = -E_{CT} = 0$, e $\Delta = 0$. No gráfico à esquerda observamos as bandas *d*, *p* e *p'* (banda não hibridizada, representada pela seta vertical). A linha vertical tracejada indica o nível de Fermi. No gráfico à direita podemos observar o efeito da interação coulombiana.

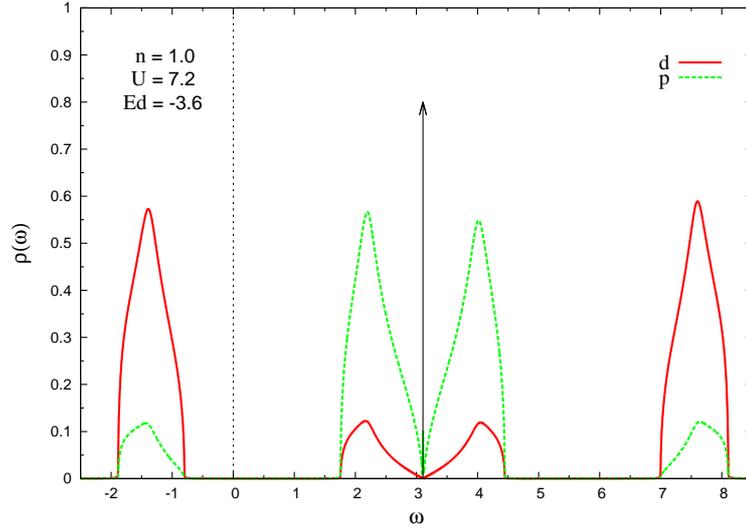


Figura 5.4: DOS para $\Delta = 0.0$ e $n = 1.0$, onde temos um isolante paramagnético. Em vermelho temos a banda d e em verde a banda p . A banda p' é representada pela seta vertical. A linha vertical tracejada indica o nível de Fermi.

objetivando somente analisar certos comportamentos, de forma que, a partir de então, iremos utilizar valores que correspondem ao caso realístico do ponto de vista experimental. Assim, os parâmetros serão $U = 7.2$ e $\varepsilon_d = -U/2 = -3.6$, onde iremos fazer análises com respeito à variação na intensidade de desordem e na concentração de partículas.

Na Fig. 5.4, mostramos o caso onde temos $n = 1.0$ sem desordem. Ao observarmos o nível de Fermi (linha vertical tracejada), concluímos que estamos lidando com um isolante, ficando o buraco, então, presente na sub-banda hibridizada ($p + d$) mais baixa. A interação é bastante considerável, o que produz um *gap* que leva a outra sub-banda para uma faixa de energia bem mais alta. Observamos ainda uma simetria em relação à localização da banda p' .

Podemos analisar o comportamento da densidade de estados frente à variação da concentração de portadores de carga, o que mostramos na Fig. 5.5, onde utilizamos $n = 1.0$, $n = 0.6$ e $n = 0.2$ no gráfico à esquerda e $n = 1.0$, $n = 1.4$ e $n = 1.8$ no gráfico à direita; ainda sem influência da desordem e onde destacamos somente a banda d . A primeira observação que fazemos é sobre o fato de que, para as concentrações diferentes de $n = 1.0$ consideradas, passamos a ter um sistema metálico, já que o nível de Fermi se encontra na sub-banda de mais baixa energia no caso de dopagem com elétrons ou na sub-banda intermediária no caso de dopagem com buracos. Além desse reposicionamento do nível de Fermi, observamos o comportamento da redistribuição do peso espectral (já destacado em outras oportunidades, quando estávamos discutindo o problema de uma banda), ficando a sub-banda inferior com um maior peso na dopagem com elétrons. Esse efeito é pouco pronunciado para dopagem com buracos, pois nesse caso o nível de Fermi se encontra próximo da banda p' , no centro das bandas, provocando uma quase simetria.

Até então, o que apresentamos nesta seção foi para um sistema sem influência de de-

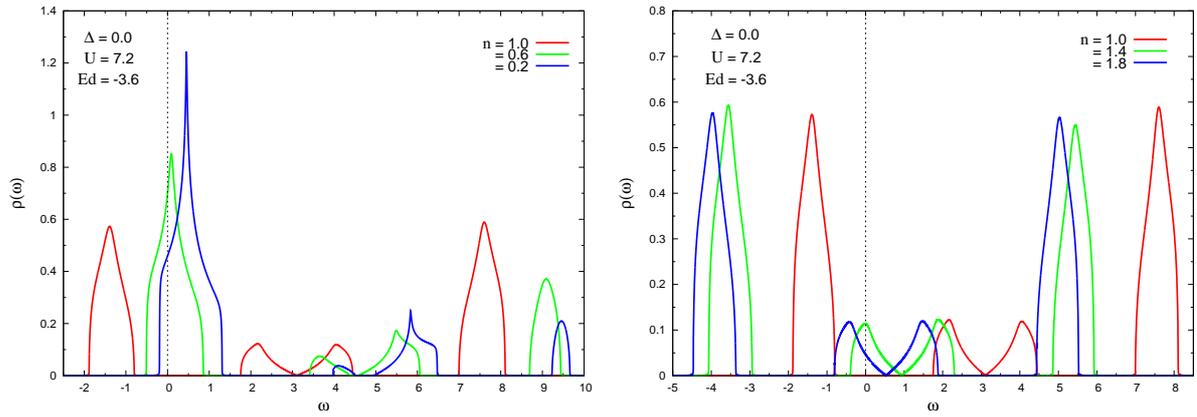


Figura 5.5: DOS no limite não interagente e sem desordem, onde, na banda d , variamos a concentração de elétrons à esquerda e de buracos à direita.

sordem. Agora passamos a utilizar os dois tipos de médias. A Fig. 5.6 nos mostra algumas informações. Para os dois gráficos, onde a densidade é $n = 1.4$, comparamos o sistema sem desordem com os casos onde $\Delta = U/4 = 1.8$ e $\Delta = 3U/8 = 2.7$, ambos com médias aritmética e geométrica. No gráfico à esquerda, destacamos qual o comportamento da banda d , enquanto à direita temos o referente à banda p . O efeito de desordem é muito mais efetivo nas sub-bandas extremas, de modo que as sub-bandas do centro sofrem pouca influência. Nessa região intermediária, as bandas p e p' são predominantes, porém nossa proposta de solução ao problema não induz desordem nessas bandas, levando a esse efeito mínimo sofrido com $\Delta > 0$. Ainda focados nessa região de energia, notamos que para a média geométrica há um certo ganho nos picos; teoricamente, teríamos pelo menos os mesmos valores fornecidos pela média aritmética (que representa todos os estados), porém esse efeito se dá pela hibridização entre as bandas. Já que a banda d sofre uma atenuação mais intensa, isso provoca uma redistribuição dos estados para a banda p .

Considerando o efeito da desordem sob a ótica da média geométrica, podemos construir

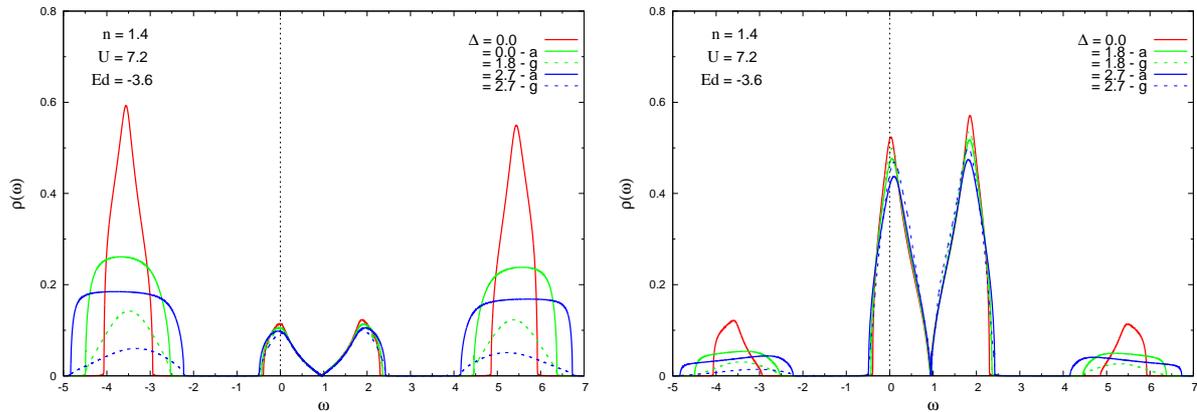


Figura 5.6: Efeito de desordem na DOS. Temos à esquerda a banda d , enquanto à direita a banda p . A influência do Δ é muito maior nas sub-bandas extremas, onde a banda d é predominante.

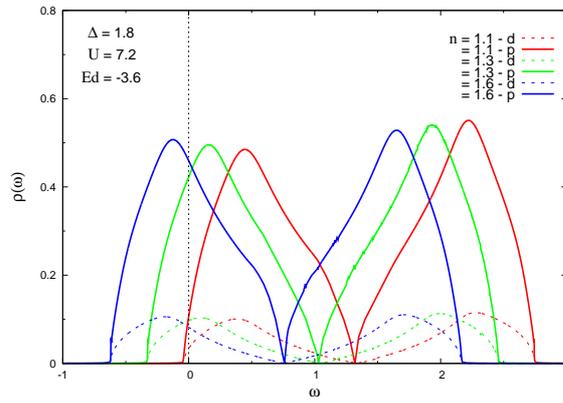


Figura 5.7: DOS geométrica próxima ao nível de Fermi para as bandas d e p .

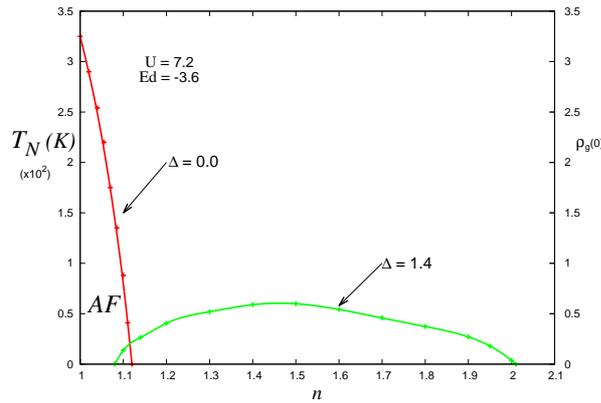


Figura 5.8: “Diagrama de fases” indicativo, onde há a fase AF como delimitada com $\Delta = 0$, e o “domo” obtido pelos valores da DOS de estados estendidos no nível de Fermi.

o gráfico mostrado na Fig. 5.7, destacando a faixa central de energia, onde a banda p é predominante. Nesta figura, utilizamos três valores de concentração (1.1, 1.3 e 1.6) com o objetivo de mostrar quando não há mais estados estendidos no nível de Fermi, o que nesse exemplo ocorre para um valor de concentração pouco abaixo de $n = 1.1$.

Da mesma forma como procedemos na análise do diagrama T_N vs. n para uma banda, onde incluímos um “domo supercondutor” (Fig. 4.10), podemos fazer o mesmo neste momento, obtendo os valores da DOS com média geométrica no nível de Fermi para as bandas d e p . Utilizando os valores $T_N(n)$ (sem desordem) da Fig. 5.1 para dopagem com buracos, obtemos o gráfico da Fig. 5.8.

Esse exemplo mostra uma superposição entre as regiões isolante AF e condutora, porém destacamos o fato de que as curvas correspondem a valores distintos de Δ : na região antiferromagnética temos um sistema sem desordem, enquanto no domo temos a influência de uma desordem $\Delta = 1.4$. Pelo que vimos no caso de uma banda, a adição de desordem deve reduzir a região de estabilidade da fase AF. Por outro lado, o nível de Fermi encontra-se em uma região onde a banda p é predominante, e os efeitos de desordem não são significativos para essa banda, pois somente as energias dos níveis d são aleatórias.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Este trabalho teve por objetivo desenvolver um estudo dos efeitos de desordem e dopagem nas propriedades eletrônicas e magnéticas de modelos para sistemas eletrônicos correlacionados, utilizando a Teoria de Campo Médio Dinâmico – DMFT. Utilizamos simplificações dos modelos de Hubbard de uma e três bandas, correspondentes ao modelo de Falicov-Kimball no caso de uma banda. Essa simplificação facilita a implementação do processo de autoconsistência que é parte integrante do método.

Na primeira etapa deste trabalho, concentramos nossa atenção no modelo de uma única banda, sem ordem magnética, mas fora da condição de banda semi-preenchida. Isso permitiu o domínio de um aspecto prático importante que é o controle do potencial químico para uma concentração eletrônica definida. Esse controle é desnecessário na situação de simetria partícula-buraco, isto é, para banda semi-preenchida, objeto de estudos anteriores dos efeitos de desordem nesse tipo de modelo de sistemas correlacionados.

A partir do cálculo de funções de Green, obtivemos densidades de estados, utilizando médias configuracionais aritmética e geométrica para monitorar as transições envolvendo a fase metálica (estados estendidos) e isolantes do tipo Mott (*gap*) ou Anderson (estados localizados). A visualização dos efeitos combinados de desordem e correlações eletrônicas foi feita através de diagramas espectrais, mostrando as regiões do espectro com estados estendidos e localizados. A partir daí, foi possível construir diagramas de fases para intensidades variáveis de interação e desordem, com ênfase ainda nos efeitos de alteração do preenchimento de banda. Isso permitiu verificar a ausência de transição de Mott fora da condição de banda semi-preenchida e a redução dos efeitos de correlação para baixas concentrações eletrônicas.

Os diversos comportamentos observados nos diagramas espectrais e diagramas de fases foram confirmados pela análise da condutividade elétrica, tanto dependente de frequência quanto no limite estático.

Quando passamos a considerar ordem magnética no sistema, pudemos observar efeitos de desordem e concentração de portadores de carga na magnetização e, naturalmente, na temperatura de Néel. Com isso, pudemos refazer o diagrama de fases, mostrando uma

maior riqueza de detalhes, com fases metálicas, isolante de Anderson e isolante de Mott AF, todas elas com ou sem ordem magnética, bem como uma fase isolante AF fora da região Mott.

Finalmente, iniciamos um estudo com o modelo de Hubbard de três bandas, ainda usando a aproximação FK com DMFT. Pudemos observar efeitos de desordem e concentração de partículas na densidade de estados. Constatamos que, no caso de dopagem com buracos, onde o nível de Fermi está próximo da região em que a banda p é predominante, temos um efeito bastante atenuado da desordem, já que consideramos que somente a banda d tem energias locais com distribuição aleatória, e o efeito sobre a banda p é indireto, via hibridização. Apesar de que os resultados são ainda incompletos, sem uma análise detalhada da fase com ordem magnética, esboçamos um diagrama de fases similar ao que é observado nos supercondutores de alta temperatura crítica, com uma fase antiferromagnética para baixa dopagem e uma região de dopagem intermediária com dominância do caráter metálico, onde a supercondutividade se estabelece.

Como perspectiva de continuidade do trabalho, a mais imediata é, sem dúvida, o estudo da fase AF do modelo de três bandas quanto aos efeitos de desordem associados aos de dopagem.

Por outro lado, ficou claro que a região de dopagem relevante para comparação com as propriedades dos cupratos supercondutores envolve uma predominância da banda p , sobre a qual os efeitos de desordem implementados via uma distribuição de energias dos níveis d são pouco expressivos. Fisicamente, seria de esperar que os efeitos de desordem também se manifestassem sobre as energias locais dos orbitais p do oxigênio. Na abordagem que empregamos, os níveis p aparecem como mediadores do movimento dos elétrons d . Neste contexto, uma desordem p deveria se manifestar em um *hopping* efetivo aleatório, mas isso nos afasta do padrão do método DMFT, no qual o *hopping* é absorvido no campo médio dinâmico, que é determinado de forma autoconsistente, sendo, portanto, uma quantidade global do sistema. O maior desafio é, portanto, como incorporar efeitos de desordem nos orbitais p do modelo de três bandas dentro de um esquema do tipo DMFT.

Apêndice

ARTIGO PUBLICADO

Effects of band filling in the Anderson-Falicov-Kimball model

Rubens D. B. Carvalho and M. A. Gusmão

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, C.P. 15051, 91501-970 Porto Alegre, Brazil

(Received 12 November 2012; published 19 February 2013)

In this work, we study the Anderson-Falicov-Kimball model within the dynamical mean field theory for the Bethe lattice, restricting our analysis to the nonmagnetic case. The one-particle density of states is obtained by both arithmetic and geometric averages over disorder, since only the latter can detect localization in the absence of an energy gap. Varying the strengths of Coulomb interaction and disorder at zero temperature, we construct phase diagrams for this model, where we distinguish spectral regions with localized states, with extended states, or with a correlation-induced gap. With this, we identify metal-insulator transitions driven by correlation and disorder, as well as the competition between these effects. This is done for various band fillings, since our main interest here is to study how the variation of the electron density affects the phase diagrams previously obtained for half-filling. The picture revealed by the density of states is further checked by evaluating the static and dynamic conductivities, including temperature effects.

DOI: [10.1103/PhysRevB.87.085122](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.085122)

PACS number(s): 71.10.Fd, 71.23.-k, 71.30.+h

I. INTRODUCTION

Electrons in narrowband solids are strongly affected by the Coulomb interaction as well as lattice disorder. Both effects can lead to a metal-insulator transition (MIT), but of different nature: a correlation-induced Mott insulating state^{1,2} and disorder-induced Anderson localization.³ The existence of the Mott phase is also significantly dependent on band filling, and one can expect the interplay between correlations and disorder to be substantially affected by variations of the number of electrons.

Theoretical approaches to deal with this kind of system are usually based on the Hubbard Hamiltonian or related models, including disorder as a distribution of on-site energies. The Mott-Hubbard MIT is characterized by a gap opening at the Fermi level in the one-particle density of states (DOS).² Hence, it seems appropriate to utilize the DOS at the Fermi level as a monitoring parameter of an MIT. However, in the disordered case one has to average the DOS over disorder. As it happens, the simple (arithmetic) averaged DOS does not show any gap at the Anderson localization transition. It is the *typical* value of the DOS, obtained by means of a geometric average over disorder⁴ (with possible extensions involving generalized averages⁵), that does go to zero when the states at the Fermi level become localized, and thus can be used as indicative of the Anderson transition. Nevertheless, the information provided by the arithmetic average is also important in that it keeps track of all the states. Thus, the combined information from both averages of the DOS in the whole energy range allows one to locate the regions of localized and extended states.

Apart from the effect of disorder, one of the most employed approaches to the problem of determining electronic structure in strongly correlated systems is the dynamical mean field theory (DMFT), introduced by Metzner and Vollhardt⁶ in 1989 (for a review, see Refs. 7 and 8). The theory is formally exact in the limit of infinite dimensions, in the sense that in this limit the self-energy becomes purely local, allowing for an exact self-consistent connection between the site-diagonal one-particle Green's function of the lattice and that of an effective single-site (or *impurity*) problem. Nevertheless, the latter has no closed analytical solution in general, and one must

resort to approximate *impurity solvers*, mostly numerical.⁹ Alternatively, one can use “simplified” models that allow for closed analytic relations which can be solved by a simple numerical iteration procedure. This is the case of the *simplified Hubbard model*, as introduced by van Dongen and Vollhardt.¹⁰ It is a reinterpretation of the Falicov-Kimball (FK) model¹¹ in which the two spinless fermions of the latter represent the two spin states of the electrons, thus eliminating spin-flip processes. The FK model has an exact solution in infinite dimensions,^{12–14} and it has been used with relative success^{15–17} to obtain phase diagrams in the presence of local disorder, characterizing the Anderson-Falicov-Kimball (AFK) model.

Essentially all the previous studies of correlation and disorder in the the Hubbard or FK models^{15–17} were restricted to the half-filled case. The obtained phase diagrams for varying disorder strength and Coulomb interaction show a metallic state, a Mott-insulator phase (which might be hidden by antiferromagnetic order), and an Anderson-localization regime. Here we focus on the AFK model away from half-filling, in the nonmagnetic case. We follow the evolution of the phase diagram from the strongly correlated regime near half-filling, where the Mott-insulator phase is suppressed by doping, toward the uncorrelated Anderson-localization limit at very low filling. We will also discuss the characteristics of the metallic regimes as probed by the optical and static conductivities.

The paper is organized as follows. In Sec. II we present the model and the DMFT approach to solve it, including the disorder averages of the DOS and calculation of conductivity. Section III describes our results for the DOS at various band fillings, typical values of the Coulomb interaction U , and a broad range of values of disorder strength Δ . It also includes spectral diagrams showing the frequency regions with extended or localized states as U and Δ are varied, and Δ versus U phase diagrams for different filling fractions. Complementary results for the conductivity (both static and frequency-dependent) are shown in Sec. IV, including its behavior with temperature. Final comments and conclusions are presented in Sec. V.

II. MODEL AND METHOD

The Anderson-Falicov-Kimball model can be represented by the Hamiltonian

$$H = \sum_i \varepsilon_i (n_i^c + n_i^f) - t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + U \sum_i n_i^c n_i^f, \quad (1)$$

where we employ the usual notation of creation, annihilation, and number operators (in the Wannier representation) for two kinds of spinless fermions. The c fermions can move with a nearest-neighbor hopping integral t , and experience Coulomb repulsion U by the nonmoving f fermions. The local energies ε_i are random, with a uniform probability distribution of width Δ .

The exact solution of the FK model in infinite dimensions^{12–14} is an example of DMFT with an analytic solution of the *impurity* problem. It yields a closed form for the c -particle Green's function at a finite temperature T ,

$$G_{ii}(\omega_n) = \frac{1-p}{i\omega_n - \bar{\varepsilon}_i - \lambda(\omega_n)} + \frac{p}{i\omega_n - \bar{\varepsilon}_i - U - \lambda(\omega_n)}, \quad (2)$$

where $\omega_n = (2n+1)\pi T$, for integer n , are Matsubara frequencies, $\bar{\varepsilon}_i \equiv \varepsilon_i - \mu$ is the local energy measured with respect to the chemical potential, p measures the probability of finding an f particle at site i , and $\lambda(\omega_n)$ are the Fourier components of the dynamical mean field connecting this site to the c -particle reservoir that replaces the lattice.

Clearly, p can be viewed as the average number of f particles per site, and must be determined self-consistently. Keeping in mind the analogy of c and f fermions with spin-up and spin-down electrons in the Hubbard model, the total number of particles per site corresponds to the band-filling fraction n . At half-filling ($n=1$) and low temperatures, an *antiferromagnetic* phase is known to be stable,¹³ corresponding to a chess-board-like distribution of c and f particles on a bipartite lattice. This ordered state is stable in the presence of Anderson-like disorder¹⁷ up to a critical disorder strength Δ_c which depends on the value of U . On the other hand, a *paramagnetic* state must have equal average numbers for both particles, i.e., $\langle n_c \rangle = \langle n_f \rangle$, independent of the site index. Since we are interested in the effect of band filling, and since the magnetic state tends to be suppressed away from half-filling, we will focus on the nonmagnetic case, for which the self-consistent solution implies that $p = n/2$. Then the only unknown in Eq. (2) is the dynamical mean field $\lambda(\omega_n)$, which can be determined from the self-consistent condition that the site-diagonal lattice Green's function must be equal to the effective single-site solution with the same self-energy $\Sigma_i(\omega_n)$, which is purely local in the limit $d \rightarrow \infty$. This can be expressed by the equality

$$\int \frac{\rho_0(\varepsilon) d\varepsilon}{i\omega_n - \bar{\varepsilon}_i - \varepsilon - \Sigma_i(\omega_n)} = \frac{1}{i\omega_n - \bar{\varepsilon}_i - \lambda(\omega_n) - \Sigma_i(\omega_n)}, \quad (3)$$

$\rho_0(\varepsilon)$ being the density of states (DOS) for the uncorrelated band. The right-hand side of this last equation reproduces the local Green's function (2) if we write the self-energy as

$$\Sigma_i(\omega_n) = pU + \frac{p(1-p)U^2}{\omega - \bar{\varepsilon}_i + \mu - (1-p)U - \lambda(\omega_n)}. \quad (4)$$

With disorder, the Green's functions must be averaged over the distribution of local energies ε_i . Then, Eq. (3) implies that

$$G_{ii}^{av}(\omega_n) = \int \frac{\rho_0(\varepsilon) d\varepsilon}{[G_{ii}^{av}(\omega_n)]^{-1} + \lambda(\omega_n) - \varepsilon}, \quad (5)$$

complemented by the disorder average of Eq. (2). Actually, we have to determine the single-site spectral density $\rho_i(\omega)$, for each disorder realization, by performing the analytic continuation $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$ to obtain the retarded Green's function $G_{ii}(\omega)$, which yields $\rho_i(\omega) = -\text{Im} G_{ii}(\omega)/\pi$. The latter is then averaged to obtain the final spectral density, or local DOS.

At this point, it is worth recalling that we must use two kinds of averages, arithmetic and geometric. With $[\cdot]_a$ denoting the arithmetic average, we have $\rho_a(\omega) = [\rho_i(\omega)]_a$ and $\rho_g(\omega) = \exp[\ln \rho_i(\omega)]_a$. The self-consistent determination of the corresponding $G_a(\omega)$ or $G_g(\omega)$ implies that we have different hybridization functions $\lambda_a(\omega)$ and $\lambda_g(\omega)$.

We will consider an uncorrelated DOS corresponding to a Bethe lattice¹⁸ in the limit of infinite coordination ($z \rightarrow \infty$), $\rho_0(\varepsilon) = \frac{4}{\pi W} \sqrt{1 - 4(\varepsilon/W)^2}$, where $W = 4t^*$ is the bandwidth, $t^* = \sqrt{z}t$ being the scaled hopping integral.¹⁹ Since no hopping loops are possible in the Bethe lattice, the only way for an electron to visit the rest of the lattice is by going out and coming back through the same nearest-neighbor site (any one of them). This implies a simple relation for the hybridization function, $\lambda_a(\omega) = zt^2 G_a(\omega) = W^2 G_a(\omega)/16$, where $\alpha = a, g$. In the following, we will choose the bandwidth as the unit of energy, so that $W = 1$. In addition, we will adopt the usual convention of dropping the Planck and Boltzmann constants, so that energy, temperature, and frequency are all measured in the same units, and will be given here by pure numbers.

III. DOS AND PHASE DIAGRAMS

To perform a detailed analysis of the problem, we solved numerically the DMFT equations, obtaining densities of states for a variety of values of the relevant parameters. All the calculations reported in this section are for $T = 0$. The most probable value of the DOS is used to monitor the metal-insulator transition mediated by correlation and/or disorder. Both $\rho_g(\omega)$ and $\rho_a(\omega)$ are used to distinguish between spectral regions with a gap, with extended states, or with localized states.

The phase diagrams previously obtained^{16,17} for the half-filling case without magnetic order allow us to distinguish three different regimes: (i) the weak-interaction regime for $U < 1/2$, where one sees Anderson localization as Δ becomes sufficiently large, but there are no significant correlation effects; (ii) the intermediate-interaction regime for $1/2 < U \lesssim 1.4$, where Mott-insulator, metallic, and Anderson-localization regions exist for varying Δ ; and (iii) the strong-interaction regime for $U \gtrsim 1.4$, where no metallic state exists, but the insulating state shows a competition between correlation and disorder effects. For our analysis, we will choose a typical value of U in each of these regimes, namely $U = 0.3, 0.9$, and 1.5 . We will then determine the averaged densities of states for five band fillings, ranging from $n = 0.2$ to 1.0 .

In the first regime ($U = 0.3$), Fig. 1 shows densities of states with arithmetic and geometric average for a moderate

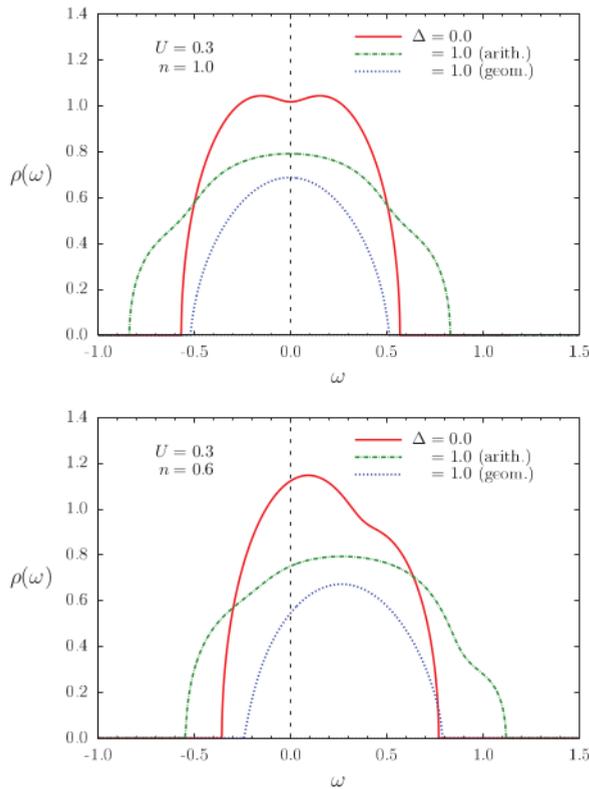


FIG. 1. (Color online) Local DOS at half-filling (top) and at $n = 0.6$ (bottom) for $U = 0.3$, showing the effect of a moderate disorder ($\Delta = 1.0$) with both kinds of averages. Notice the reduction of the number of extended states (given by the geometric average) and the overall band broadening (shown by the arithmetic average).

disorder ($\Delta = 1.0$) in comparison with the clean limit. For this low interaction value there is no Mott gap, only a shallow depletion of the DOS at the Fermi level for the half-filled band in the clean limit. The main difference when moving away from half-filling is the loss of particle-hole symmetry, with the Fermi level being displaced towards the band bottom. The general behavior of the two kinds of averages is clearly noticeable in Fig. 1, that is, the arithmetic-averaged DOS is broadened but preserves the area, while the geometric-averaged one loses spectral weight due to a reduction in the number of extended states. It is then clear that the states at the band edges are the first to become localized.

This situation does not change qualitatively when further reducing the band filling, as can be seen from the spectral diagrams shown in Fig. 2. These diagrams show the spectral regions where there are extended or localized states in the band. Also clearly visible are the overall band broadening as well as the suppression of extended states above a critical disorder strength that characterizes the localization transition. Observing the dashed vertical line that marks the Fermi level, one can see that Anderson localization occurs at different values of Δ for different band fillings.

In the intermediate-interaction regime we observe the opening of a Mott gap, as shown in the top panel of Fig. 3. This gap shrinks with increasing disorder and eventually closes. It happens first for the arithmetic-averaged DOS, implying that the gap observed in the geometric average is actually filled

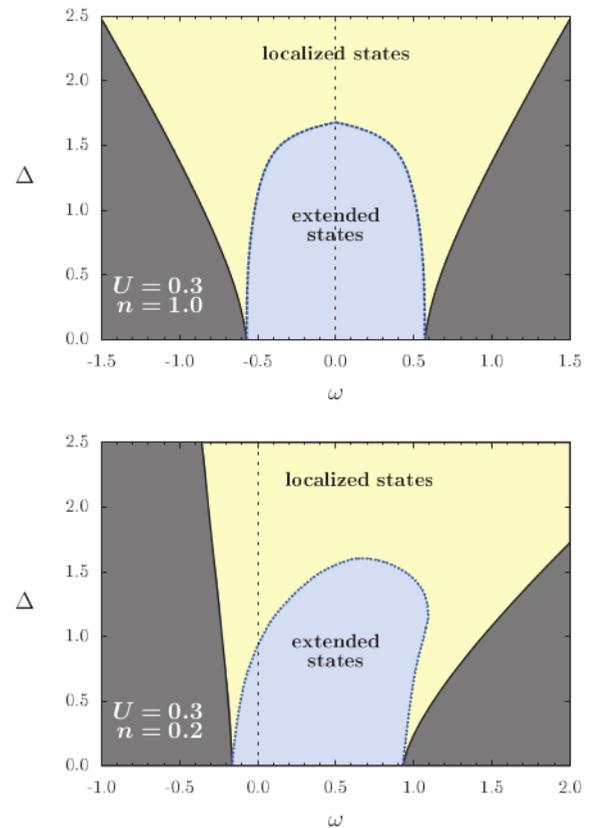


FIG. 2. (Color online) Spectral diagrams for $U = 0.3$ at half-filling (top) and very low filling (bottom). No qualitative changes are noticed, except for the loss of particle-hole symmetry and the displacement of the Fermi level toward the band's lower edge when the band filling is reduced.

with localized states. Away from half-filling (bottom panel of Fig. 3), the Fermi level drops into the lower Hubbard subband and the system becomes metallic. This is confirmed by the spectral diagrams of Fig. 4. There we can see that the topology of the spectral diagrams changes as the band filling is reduced. The half-filled case (not shown) is similar to the top panel of Fig. 4, but it shows particle-hole symmetry, so that the gap at weak disorder contains the Fermi level. Then, with increasing disorder the system evolves from a Mott insulator, through a regime in which the Mott gap is filled with localized states (corresponding to the DOS in the top panel of Fig. 3), into a metallic state (when the gap in the geometric-averaged DOS also closes), finally becoming an Anderson insulator when all the states localize.

For the strong-interaction regime, shown for $U = 1.5$ in Fig. 5, we see a more robust correlation gap, as expected. At half-filling (top panel of Fig. 5), the low-disorder behavior is the same as in the intermediate regime, but it changes significantly for strong disorder. For instance, the Mott gap never closes in the region where extended states still exist, so that we have a direct transition between Mott and Anderson insulators. In contrast, for low band filling (bottom panel of Fig. 5), the low-energy physics is essentially the same for all correlation regimes, showing only the Anderson-localization transition from the metallic state, although the diagrams are very different on the higher-energy part of the spectrum.

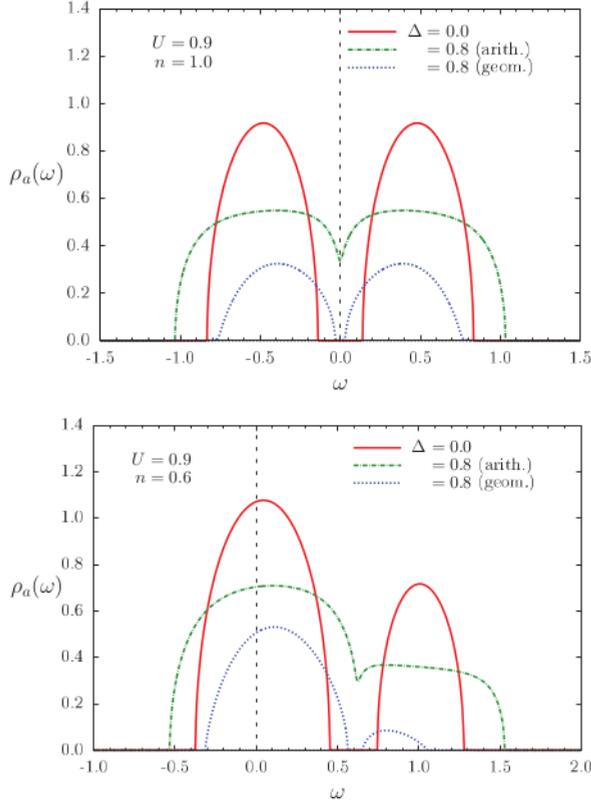


FIG. 3. (Color online) DOS for $n = 1.0$ (top) and 0.6 (bottom), $U = 0.9$, and $\Delta = 0.8$, a disorder strength for which a gap still exists in the geometric average but no longer in the arithmetic one.

The above results can be summed up in phase diagrams of the Anderson-Falicov-Kimball model for varying U and Δ at different band fillings, which are shown in Fig. 6. The lines for each n correspond to the Δ values at which the Fermi level crosses the borderline between extended and localized states in the spectral diagrams for each U . The only exception is the point at $U = 0.5$ and $\Delta = 0$ at $n = 1$, for which the transition is the Mott MIT. For all the other band fillings, as can be seen in Fig. 6, the Mott phase does not exist. Nevertheless, the Anderson MIT is clearly affected by correlation. Obviously, this effect is stronger near half-filling, and tends to disappear as the electron density becomes very low. At electron densities not far from $n = 1$, we can see that the weak-disorder metallic state is quickly suppressed as the disorder increases. In this *correlated Anderson-localization regime*, the Fermi level falls in a region of localized states close to a correlation gap. As the disorder is further increased, we see a reentrance of the metallic state, now much less correlated (as will be better seen in Sec. IV), which is finally suppressed in the strong-disorder region, where the *normal* Anderson-insulator state sets in.

IV. CONDUCTIVITY

The features that we observed in the spectral diagrams must show up in the optical conductivity, and it is interesting to study this quantity in detail. In general, the frequency-dependent conductivity $\sigma(\nu)$, in the context of linear-response theory, is described by the Kubo formula, which involves a current-current correlation function. In DMFT, the calculation of this

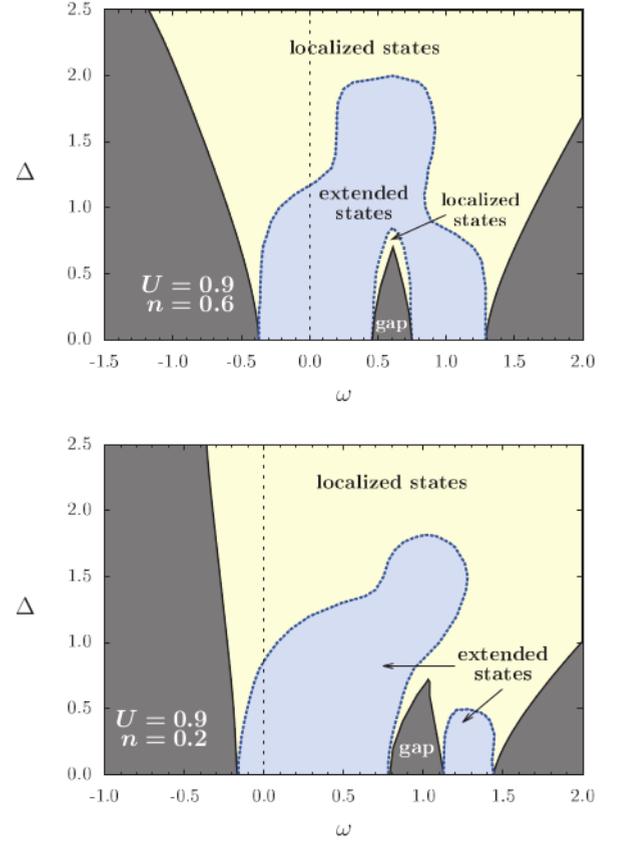


FIG. 4. (Color online) Spectral phase diagram for $U = 0.9$, with $n = 0.6$ (top) and 0.2 (bottom). The half-filling diagram is similar to the top panel, except that particle-hole symmetry is restored, so that the system is a Mott insulator for weak disorder.

function is simplified due to the absence of vertex corrections, which vanish in the limit $d \rightarrow \infty$. We then have²⁰

$$\sigma(\nu) = \pi \int d\epsilon \rho_0(\epsilon) \int d\omega \rho(\epsilon, \omega) \rho(\epsilon, \omega + \nu) \times \frac{f(\omega) - f(\omega + \nu)}{\nu}, \quad (6)$$

where $f(\epsilon)$ is the Fermi-Dirac function, $\rho_0(\epsilon)$ is the uncorrelated DOS, and $\rho(\epsilon, \omega)$ is the spectral density of the correlated energy-dependent Green's function. From Eq. (5), after the analytic continuation $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$, we have

$$\rho(\epsilon, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ [G_{ii}^{\text{av}}(\omega)]^{-1} + \lambda(\omega) - \epsilon \}^{-1}, \quad (7)$$

and we must choose the geometric average, since only extended states contribute to the conductivity.

The limit $\nu \rightarrow 0$ in Eq. (6) gives us the static conductivity as a function of temperature,

$$\sigma(T) = \frac{\pi}{T} \int d\epsilon \rho_0(\epsilon) \int d\omega [\rho(\epsilon, \omega)]^2 f(\omega) [1 - f(\omega)]. \quad (8)$$

Results for the weak-interaction regime are shown in Fig. 7. The behavior is essentially what one should expect for a conductor, but the low-frequency peak is progressively reduced as disorder increases, and eventually disappears at the Anderson-localization transition, where all the states become

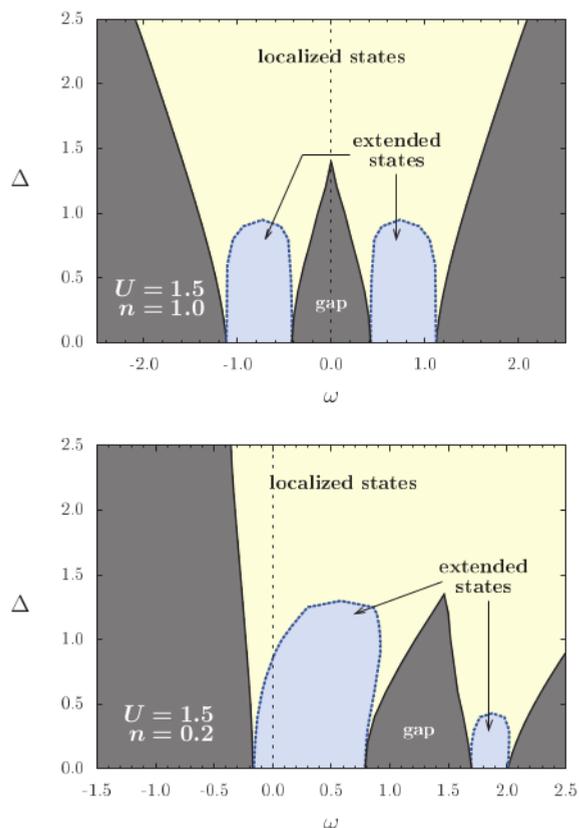


FIG. 5. (Color online) Spectral phase diagram in the strong-coupling regime ($U = 1.5$) for $n = 1.0$ (top) and 0.2 (bottom).

localized and the conductivity vanishes. In the inset of the top panel of Fig. 7 we highlight the existence of thermal activation in the clean limit at half-filling, as we can see that the conductivity for $\nu \rightarrow 0$ grows with temperature. This can be understood by inspecting the corresponding DOS, shown in the top panel of Fig. 1, where it is clear that there are regions of higher DOS slightly away from the Fermi level. Both this feature of the DOS and the conductivity behavior at low frequencies are non-Fermi-liquid characteristics, as expected for the FK model due to the absence of spin-flip processes.

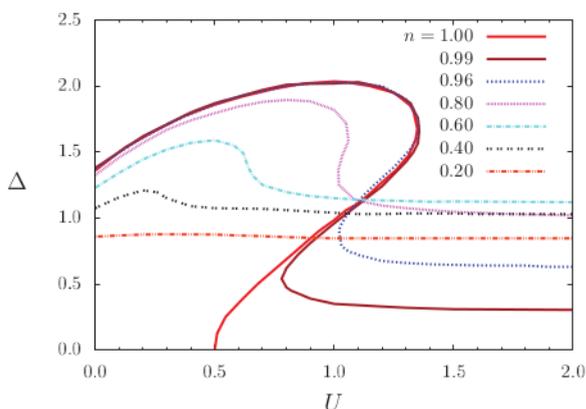


FIG. 6. (Color online) Phase diagram of the Anderson-Falicov-Kimball model for various concentrations. A Mott insulator phase exists only at half-filling.

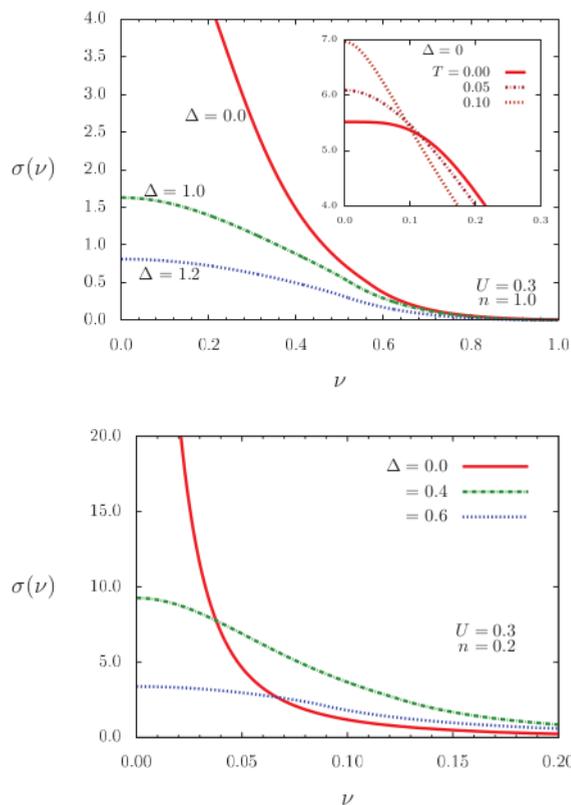


FIG. 7. (Color online) Optical conductivity in the weak-interaction regime ($U = 0.3$) at half-filling (top) and in the low-density limit ($n = 0.2$). In both cases, we see a typical conductor behavior, with a more pronounced Drude-like peak at low density and in the clean limit. The inset in the top panel shows an activation behavior at low frequencies for $n = 1$ and no disorder, due to the lower DOS at the Fermi level observed in Fig. 1.

The low-density scenario does not change in the other interaction regimes, except for the overall scale and for the visibility of high-frequency “bumps” coming from the

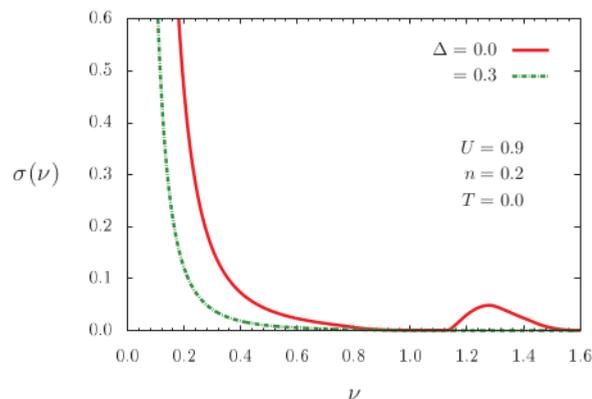


FIG. 8. (Color online) Optical conductivity in the intermediate-interaction regime ($U = 0.9$) in the low-density limit ($n = 0.2$). Apart from the Drude-like behavior, a nonzero conductivity appears in the clean limit at high frequencies due to extended states existing above the correlation gap. This is suppressed by a moderately low disorder. For much higher disorder (not shown), the low-frequency peak also vanishes and the system becomes an Anderson insulator.

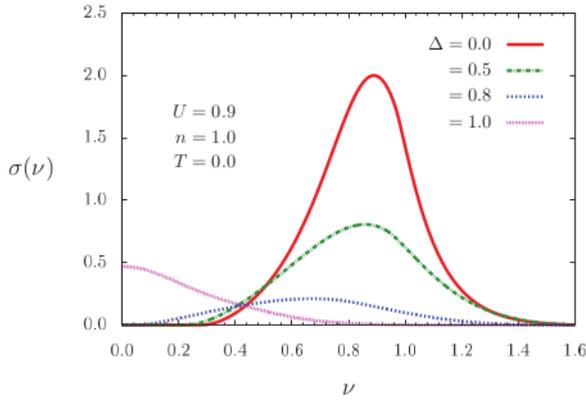


FIG. 9. (Color online) Optical conductivity in the intermediate-interaction regime ($U = 0.9$) at half-filling. The Mott gap is visible for weak disorder, but a metallic behavior is recovered for a certain range of values of Δ (exemplified by $\Delta = 1.0$).

upper Hubbard subband, which quickly vanish with increasing disorder. This is exemplified for $U = 0.9$ in Fig. 8, but it also occurs for $U = 1.5$. One can easily correlate these conductivity features with the low-density spectral diagrams of Figs. 4 or 5.

The situation is very different at half-filling, as we begin with a Mott insulator in the clean limit for intermediate or strong Coulomb interaction. Again we illustrate this with results for $U = 0.9$, shown in Fig. 9. There we can see a progressive suppression of the high-frequency peak in the optical conductivity as disorder grows, and the appearance of a low-frequency one when the system becomes metallic. This metallic peak first grows, then diminishes, and finally vanishes at the critical disorder strength for Anderson localization. For this case, the sequence of states, from Mott-insulator to metal to Anderson insulator, can be followed along a vertical line at $U = 0.9$ in the phase diagram for $n = 1.0$ in Fig. 6. Notice that a low-frequency peak always exists away from half-filling, although only for very weak disorder as $n \rightarrow 1$.

We now turn to the effect of temperature on the conductivity. It is worth mentioning that this effect comes essentially from the Fermi functions appearing in Eqs. (6) and (8). The spectral functions are not affected by temperature, except for a very

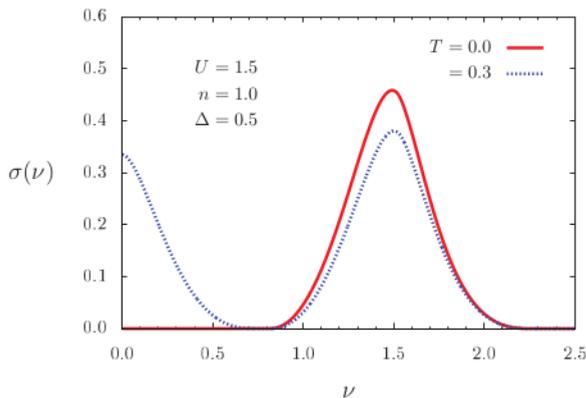


FIG. 10. (Color online) Effect of temperature on the optical conductivity for $U = 1.5$ and $n = 1$. A finite temperature yields a nonzero conductivity for frequencies inside the Mott gap.

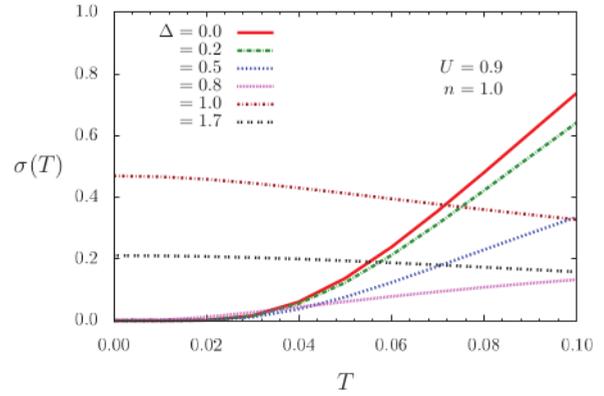


FIG. 11. (Color online) Static conductivity as a function of temperature for $U = 0.9$ at half-filling. The activated conductivity in the insulating region at low disorder evolves to a metallic behavior as the disorder increases.

small displacement of the chemical potential, which does not occur at half-filling due to particle-hole symmetry.

The most striking thermal effect in the optical conductivity occurs for a Mott-insulator ground state, as illustrated in Fig. 10 for $U = 1.5$ at half-filling. The temperature effect is to “turn on” the optical conductivity inside the Mott gap. Of course, the obtained intensity depends on the temperature and on the gap size. For the strong-coupling case shown in Fig. 10, the temperature necessary for such a visible effect is unphysically high.

Indeed, a better visualization of temperature effects in a reasonable range is obtained from the static conductivity. An illustrative case is that of $U = 0.9$ at half-filling, shown in Fig. 11 for various disorder strengths. In the Mott state at low disorder, the conductivity is thermally activated, but this behavior changes to that of a metal as the disorder increases. In this last regime, further growth of disorder intensity causes a reduction of the conductivity and leads to its vanishing in the Anderson-localization regime. Even though it is restricted to a specific interaction value and band filling, Fig. 11 contains the two kinds of behavior observed for the other cases studied.

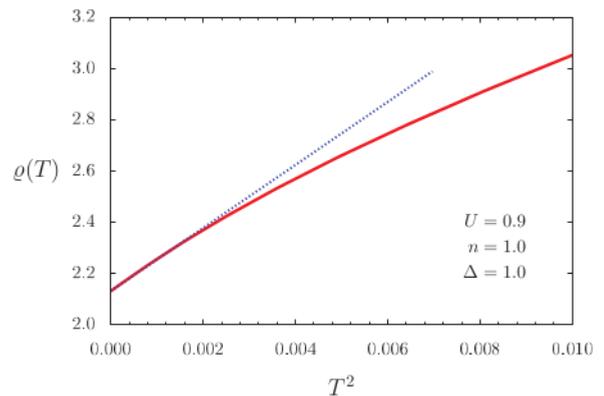


FIG. 12. (Color online) Resistivity in the low-temperature region for a case of a disorder-induced metallic state. Notice that the horizontal axis is the temperature squared. The dotted straight line is just an aid to visualize the initial Fermi-liquid behavior.

For $U = 0.3$, one observes only the metallic behavior, while for $U = 1.5$ the behavior is always of the activated type.

It is interesting to point out that plotting the resistivity $\rho(T) = 1/\sigma(T)$ allows us to see a T^2 dependence (on top of a finite residual resistivity) at very low temperatures. This is shown in Fig. 12, and it indicates that the metallic regime induced by disorder is of a Fermi-liquid nature. However, this is not the case in the clean limit when a metallic state exists at weak coupling, as we already observed in the optical conductivity for $U = 0.3$.

V. CONCLUSIONS

We have analyzed the combined effects of Coulomb correlation, local disorder, and band filling using an Anderson-Falicov-Kimball model, which means including Coulomb correlations in a simplified version of the Hubbard model without spin-flip, and adding disorder through a uniform distribution of on-site energies. This analysis involved calculation of one-particle Green's functions in the DMFT scheme, with arithmetic and geometric averages over disorder. With this, we obtained the single-particle DOS and built up diagrams showing the spectral distribution of extended and localized states, as well as the presence of correlation gaps for typical interaction or disorder regimes, with special focus on the effects of varying the electron density.

One of our main results is a set of phase diagrams for various band fillings as a function of the controlling parameters of correlation (U) and disorder (Δ). It shows clearly that a

Mott-insulator state exists only at half-filling. Nevertheless, for densities not far from $n = 1$ the presence of a correlation gap, even though it does not contain the Fermi level, is relevant, affecting the nature of the Anderson-localization regime induced at moderate disorder. In this region, the phase diagram shows reentrance of the metallic phase before the final establishment of Anderson localization at strong disorder.

Our study was complemented by calculation of the optical and static conductivities for the various cases, which could be consistently compared with the scenario inferred from the spectral diagrams. Here we obtain that, although the Falicov-Kimball model with finite Coulomb interaction and no disorder is not a Fermi liquid, the metallic state induced by disorder does show Fermi-liquid behavior in the low-temperature variation of the resistivity.

As a final comment, we would like to stress that, despite the simplification introduced by the Falicov-Kimball model in the description of a true electronic conduction band, the possibility of an exact solution within the DMFT scheme allows for a detailed investigation of the interplay between correlation and disorder. In addition, it is worth mentioning that actual FK systems can be experimentally realized in cold-atom optical lattices,²¹ for which the kind of calculations performed in the present work can be of significant value.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported in part by Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Brazil.

¹N. Mott and R. Peierls, *Proc. R. Soc. London* **49**, 72 (1937).

²J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **276**, 238 (1963).

³P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).

⁴V. Dobrosavljevic, A. A. Pastor, and B. K. Nikolic, *Europhys. Lett.* **62**, 76 (2003).

⁵A. M. C. Souza, D. O. Maionchi, and H. J. Herrmann, *Phys. Rev. B* **76**, 035111 (2007).

⁶W. Metzner and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).

⁷A. Georges, W. Kotliar, G. Krauth, and M. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).

⁸D. Vollhardt, *Dynamical Mean-Field Theory of Electronic Correlations in Models and Materials*, AIP Conference Proceedings No. 1297, edited by A. Avella and F. Mancini (AIP, New York, 2010), p. 339.

⁹R. Bulla, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 136 (1999).

¹⁰P. G. J. van Dongen and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1663 (1990).

¹¹L. Falicov and J. Kimball, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 997 (1969).

¹²U. Brandt and C. Mielsch, *Z. Phys. B* **75**, 365 (1989).

¹³V. Janis, *Z. Phys. B* **83**, 227 (1991).

¹⁴J. K. Freericks and V. Zlatić, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1333 (2003).

¹⁵K. Byczuk, W. Hofstetter, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 056404 (2005).

¹⁶K. Byczuk, *Phys. Rev. B* **71**, 205105 (2005).

¹⁷M. A. Gusmão, *Phys. Rev. B* **77**, 245116 (2008).

¹⁸H. Bethe, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **150**, 552 (1935).

¹⁹E. MÅ $\frac{1}{4}$ ller-Hartmann, *Z. Phys. B* **76**, 211 (1989).

²⁰M. Jarrell, J. K. Freericks, and T. Pruschke, *Phys. Rev. B* **51**, 11704 (1995).

²¹M. M. Maška, R. Lemański, J. K. Freericks, and C. J. Williams, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 060404 (2008).

Referências Bibliográficas

- [1] Anderson, P. W., Phys. Rev. **109**, 1492, 1958.
- [2] Anderson, P. W., Phys. Rev. **124**, 41, 1961.
- [3] Anderson, P. W., Rev. Mod. Phys. **50**, 191, 1978.
- [4] Boer, J H. and Verway, E. J. W., Proc. R. Soc. London **A49**, 59, 1937.
- [5] Mott, N. and Peierls, R., Proc. R. Soc. London **49**, 72, 1937.
- [6] Vollhardt, Dieter, Ann. Phys. (Berlin) **524**, 1-19, 2012.
- [7] Hubbard, J., Proc. R. Soc. London, Ser. A **276**, 238, 1963.
- [8] Imada, Masatoshi and Fujimori, Atsushi and Tokura, Yoshinori, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039-1263, 1998.
- [9] Shubert, G., Veibe, A., Wellein, G. and Fehske, H. in: High Performance Computing in Science and Engineering Garching 2004, A. Bode, F. Durst (Eds.), Springer Verlag, **1**, 237-250, 2005.
- [10] Laad, M. S. and Craco, L and Müller-Hartmann, E., Phys. Rev. B. **64**, 195114, 2001.
- [11] Dobrosavljevic, V. and Kotliar, G., Phys. Rev. **78**, 3943, 1997.
- [12] Souza, Andre M. C., Maionchi, D. O.,and Herrmann, Hans J., Phys. Rev. B **76**, 035111, 2007.
- [13] Vollhardt, Dieter, AIP Conf. Proc. **1297**, 339, 2010.
- [14] Georges, A., Kotliar, G., Krauth, W.,and Rozemberg, M.J., Rev. of Mod. Phys. **68**, 13-125, 1996.
- [15] Gutzwiller, M.C., Phys. Rev. Lett. **10**, 159, 1963.
- [16] Kanamori, J., Prog. Theor. Phys. **30**, 275, 1963.
- [17] Schmidt, D., and Tomczyk, H., and Slama, S., and Zimmermann, C., Phys. Rev. Lett. **112**, 115302, 2014.

- [18] Block, Immanuel Nature Physics **1**, 23-30, 2005.
- [19] Janis, V. Z. Phys. B **83**, 227, 1991.
- [20] Weiss, Pierre, J. Phys. Theor. Appl. **6**, 661–690, 1907.
- [21] Fock, V.A., Z. Physik **98** 145 (1935).
- [22] Hartree, D.R., Wiley, N.Y. (1957).
- [23] Metzner, W., and Vollhardt, D., Phys. Rev. Lett. **62**, 324, 1989.
- [24] Müller-Hartmann, E. Z. Phys. B **76**, 211, 1989.
- [25] Kotliar, G., and Vollhardt, D. Phys. Today **3**, 13, 2004.
- [26] Byczuk, Krzysztof, Hofstetter, Walter and Dieter, Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **94**, 056404, 2005.
- [27] P. G. J. van Dongen and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **65**, 1663 (1990).
- [28] Falicov, L.M., and Kimball, J.C., Phys. Rev. Lett. **22**, 997, 1969.
- [29] Brandt, U., and Mielsch, C., Z. Phys. B **75**, 365, 1989.
- [30] Freericks, J. K., and Zlatic, V. Rev. of Mod. Phys. **75**, 1333-1382, 2003.
- [31] Tran, Minh-Tien, Phys. Rev. B **76**, 245122, 2007.
- [32] Bethe, H.A., Proc. R. Soc. London, Ser. A **150**, 552, 1935.
- [33] Byczuk, Krzysztof, Phys. Rev. B **71**, 205105, 2005.
- [34] Gusmão, M. A., Phys. Rev. B **77**, 245116, 2008.
- [35] Emery, V. J., Phys. Rev. Lett. **58** 2794 (1987).
- [36] Taylor, B. J. and Maple, M. B. Phys. Rev. Lett. **102**, 137003, 2009.
- [37] Bardeen, J. and Cooper, L. N. and Schrieffer, J. R. Phys. Rev. **106**, 162–164, 1957.
- [38] Anderson, P. W. Journal of Physics: Conference Series **449**, 012001, 2013.
- [39] Anderson, P. W. Science **235**, 1196-1198, 1987.
- [40] Zhang, F. C. and Rice, T. M. and Shiba, H. Supercond. Sci. Technol. **1**, 36, 1988.
- [41] Beatrici, A. and Gusmão, M.A., J. Phys.: Condens. Matter **17**, 8079, 2005.
- [42] M. B. Maple, MRS Bulletin XV, No. 6 (1990) 60

- [43] Craco, L and Gusmão, M.A., Phys. Rev. B **54**, 1629, 1996.
- [44] Maier, Th. and Zolfl, M.B. and Pruschke, Th. and Keller, J., Eur. Phys. J. B **7**, 377, 1998.
- [45] Zubarev, D. N., Usp. Fiz. Nauk **71**, 71, 1960.
- [46] Dobrosavljevic, V., Pastor, A. A. and Nikolic, Branislav K. Europhys. Lett. **62**, 76, 2003.
- [47] Jarrell, M, Freericks, J.K. and Pruschke, Th, Phys. Rev. B **51**, 11704, 1995.
- [48] Thouless, David, Int. J. Mod. Phys. B **24**, 1507, 2010.
- [49] Consiglio, R and Gusmão, M.A., Phys. Rev. B **55**, 6825, 1997.