



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO DE FÍSICA JUAN JOSÉ GIAMBIAGI

Resistividad lineal en el modelo de Hubbard

TESIS DE LICENCIATURA

Federico Bai

Director: Dr. Alberto Camjayi

Marzo de 2024

TEMA: Metales de Planck. Resistividad lineal en el modelo de Hubbard.

ALUMNO: Federico Bai.

LU N°: 173/19

LUGAR DE TRABAJO: Instituto de Física de Buenos Aires (IFIBA) - Universidad de Buenos Aires (UBA).

DIRECTOR DEL TRABAJO: Dr. Alberto Camjayi.

FECHA DE INICIACIÓN: Marzo de 2023

FECHA DE FINALIZACIÓN: Marzo de 2024

FECHA DE EXAMEN:

INFORME FINAL APROBADO POR:

Autor	Jurado
.....
Director	Jurado
.....
Profesora de Tesis de Licenciatura	Jurado
.....

Índice general

1. Introducción	5
2. Modelos teóricos	7
2.1. Modelo de Hubbard	7
2.2. Modelo de impureza de Anderson	8
2.3. Líquido de Fermi	8
2.3.1. Evolución adiabática y cuasipartículas	8
2.3.2. Tiempo de vida finito y bases microscópicas del Líquido de Fermi	10
3. Teoría de Campo Medio Dimático (DMFT)	13
3.1. Campo medio clásico	13
3.2. Ecuaciones de DMFT para el modelo de Hubbard	14
3.3. Límite de dimensión infinita	16
3.4. El modelo de Hubbard y la transición de Mott	16
3.5. Modelo propuesto	19
3.5.1. Auto-consistencia	20
3.5.2. Conexión con el problema original	21
4. Cálculo de la conductividad	22
4.1. Modelo de Drude-Lorentz	22
4.1.1. Modelo de Drude	22
4.1.2. Interbandas	24
4.2. Teoría de respuesta lineal	25
4.3. Fórmula de Kubo	26
4.4. Sustitución de Peierls	28
4.5. Representación espectral	30
5. Caracterización del modelo	33
5.1. Implementación de DMFT	33
5.2. Transición metal-aislante	34
5.3. Comparación con el límite atómico	38
5.4. Densidades de estados	40
5.5. Peso de las cuasipartículas	43
6. Estudio de la conductividad óptica	45
6.1. Conductividad en la zona (I)	45
6.2. Conductividad en la zona (III)	47

7. Conclusiones	51
A. Grados de libertad integrados	55
A.1. Integral de camino y modelo	55
A.2. La nueva acción	56
A.3. Comparación con cambio de base	57
B. El método de la cavidad	60
C. Límite atómico	63

Capítulo 1

Introducción

El origen de la superconductividad de alta temperatura crítica es uno de los grandes misterios de la física. Es conocido que el estado normal de los superconductores de alta temperatura muestra una resistividad que es lineal en un rango amplio de temperaturas [1, 2]. El hecho de que este comportamiento sea observado en sistemas correlacionados de distinto tipo sugiere un origen microscópico común.

La resistividad lineal en temperatura no es un fenómeno poco común en materia condensada, sino que se observa prácticamente siempre, para temperaturas moderadamente altas $T > \Theta_D/5$, en donde Θ_D es la temperatura de Debye. La dependencia en temperatura de la resistividad usualmente es la que se muestra en la Fig. 1.1, en donde se observa el comportamiento lineal a alta temperatura. Para temperaturas bajas, entran en juego efectos tales como el scattering

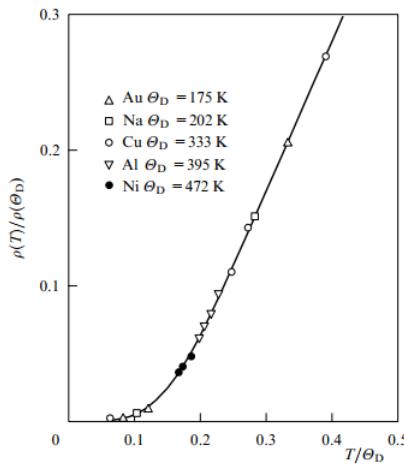


Figura 1.1: Dependencia de la resistividad en función de la temperatura para metales típicos. Imagen tomada de [3].

electrón-electrón y el scattering fonón-electrón, términos que producen dependencias de tipo T^2 y T^5 respectivamente. Lo llamativo del estado normal de los superconductores de alta temperatura es que el comportamiento lineal comienza desde temperaturas mucho más bajas que en los metales usuales y se mantiene hasta las altas. Este tipo de comportamiento implicaría la ausencia de cuasipartículas en el sistema. Los sistemas con transporte mediado por cuasipartículas son descritos por la teoría del Líquido de Fermi (Fermi Liquid), mientras que a los materiales

sin cuasipartículas se los llama por su nombre en inglés Non-Fermi Liquid. Actualmente no hay una explicación teórica sobre este comportamiento lineal de la resistividad, el cual se presenta en materiales diversos, como por ejemplo cupratos, fermiones pesados, y superconductores orgánicos, sistemas con mecanismos de scattering muy distintos. La idea de un marco que capture varios de estos regímenes es apoyada por la observación experimental de una escala de tiempo universal que sustenta la resistividad lineal [4, 5]. Se han formulado distintos tipos de explicaciones para esta escala incluyendo cotas a la resistividad en analogía con AdS/CFT [6]. Por otro lado, también se han realizado críticas sobre la manera en la que fueron analizados los datos experimentales para llegar a la conclusión de dicha escala [3].

Con la finalidad de modelar este comportamiento lineal, se han propuesto diversos modelos y se ha estudiado su resistividad. Entre ellos destaca el modelo SYK, con raíces en el modelado de vidrios de espín y, más recientemente, de la física de agujeros negros [7, 8]. El problema es que su conexión con los modelos microscópicos aun no está clara. También se observó este comportamiento para dopajes óptimos del modelo de Hubbard 2D [9].

A lo largo de esta tesis, se propuso un modelo el cual consiste en el modelo de Hubbard del dímero, pero con solo correlación en uno de los sitios. En primer lugar se caracterizó este modelo, para luego pasar al estudio de la conductividad.

En el Capítulo 2 se brinda una breve introducción al modelo de Hubbard y al modelo de impureza de Anderson, como así una introducción a los lineamientos base de la teoría del Líquido de Fermi.

En el Capítulo 3 se brinda una introducción a la herramienta que se va a emplear a lo largo de esta tesis para el estudio del modelo propuesto, la Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT). Se explica el caso de un campo medio clásico para luego pasar al caso particular del modelo de Hubbard. Luego se analiza el caso de dimensión infinita y algunos resultados del modelo de Hubbard relacionados con la transición de Mott. Finalmente se especifica el modelo propuesto a estudiar, así como sus ecuaciones de DMFT.

En el Capítulo 4 se detalla la formulación empleada para el cálculo de la conductividad óptica, realizándose esto específicamente para el modelo propuesto.

En el Capítulo 5 se realiza la caracterización del modelo propuesto mediante DMFT y Monte Carlo de Tiempo Continuo (CTQMC). Se detallan la relación entre los parámetros para la transición metal-aislante, así como un estudio de los números de ocupación del modelo para distintas temperaturas. Se realiza una breve comparación con un caso límite y se estudian las densidades de estados de los distintos regímenes. Finalmente se brinda un análisis de la influencia de las cuasipartículas para los distintos valores de los parámetros.

Por último, en el Capítulo 6 se muestran los resultados obtenidos para la conductividad en los distintos números de ocupación. Se realiza un estudio de la resistividad en función de la temperatura en donde se encuentra una región de los parámetros que pareciera indicar un comportamiento de un sistema Non-Fermi Liquid.

Capítulo 2

Modelos teóricos

2.1. Modelo de Hubbard

En un sistema electrónico real como un cristal metálico, puede resultar extremadamente difícil modelar el comportamiento de los electrones. Afortunadamente, a bajas temperaturas solo son excitados un subconjunto de grados de libertad electrónicos, por lo que se trabaja con un Hamiltoniano efectivo el cual describe la física de baja energía. Un modelo que ha resultado de gran interés a lo largo del tiempo es el modelo de Hubbard [10, 11], el cual es el modelo mínimo que captura la competencia entre la energía cinética, que favorece la deslocalización de la función de onda electrónica, y la energía potencial de Coulomb, que tiende a localizarlos. El modelo de Hubbard de una banda puede ser escrito en el formalismo de segunda cuantización como:

$$H = - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2.1)$$

en donde $c_{i\sigma}^\dagger$ y $c_{j\sigma}$ representan los operadores fermiónicos de creación y destrucción para un electrón con espín σ ($\sigma = \uparrow$ o \downarrow) en el sitio i y en el sitio j respectivamente. El primer término describe el salto del electrón desde el sitio j al i , por lo tanto es el término que representa a la energía cinética. El segundo término describe la repulsión Coulombiana local de magnitud $U > 0$ cuando dos partículas de espines opuestos ocupan el mismo sitio, en donde $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ es el operador número de partículas en el sitio i con espín σ . Usualmente se toma interacción a primeros vecinos notada por $\langle i, j \rangle$ con $t_{ij} = t$.

La escala más importante en el Hamiltoniano (2.1) corresponde al cociente U/t el cual determina el peso relativo entre los dos aspectos que compiten en la dinámica. El número de partículas medio por estado y la dimensión del sistema son factores determinantes en el resultado de la competencia.

Este modelo ha jugado un rol central en la teoría del magnetismo, transiciones metal-aislante y más recientemente en la descripción del movimiento de electrones en superconductores de alta temperatura. Con la excepción de la física en una dimensión, todavía no se tiene una noción completa de la física que puede emergir de este modelo. Una predicción de este modelo es que si la repulsión Coulombiana se vuelve muy grande comparada al término cinético, los electrones se vuelven localizados generando un aislante de Mott [12, 13], esto ocurre cuando la banda está semi llena, con un electrón por sitio.

2.2. Modelo de impureza de Anderson

El modelo de impureza de Anderson [14, 15] describe una impureza magnética acoplada a un baño de conducción. Este modelo va a ser útil para DMFT ya que es el modelo sobre el cual se mapea el problema original de Hubbard.

En primer lugar, el metal del modelo tiene una banda de conducción, la cual puede ser descrita mediante un modelo no interactuante efectivo:

$$H_c = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (2.2)$$

Para el ion de la impureza se considera un sitio (al que notamos como d) que puede estar ocupado por un único fermión o dos fermiones con distintos espines, en donde en el segundo caso habrá que tener en cuenta la repulsión Coulombiana:

$$H_d + H_U = \sum_{\sigma} (\epsilon_d - \mu) c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}. \quad (2.3)$$

Los electrones que ocupan la banda de conducción se acoplan con los que están en la impureza. Este acoplamiento es debido a que los estados de la impureza y los de la banda de conducción se superponen espacialmente y son cercanos en energía, dando lugar a una hibridación entre ambos. Esto se ve reflejado en un término no diagonal del Hamiltoniano dado por:

$$H_{\text{hyb}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}} c_{d\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{d\sigma}. \quad (2.4)$$

Finalmente, sumando todas las contribuciones se obtiene el Hamiltoniano del modelo de Anderson

$$H_{AM} = H_c + H_d + H_U + H_{\text{hyb}}, \quad (2.5)$$

este modelo ha sido utilizado para describir numerosos efectos en la física de electrones fuertemente correlacionados.

2.3. Líquido de Fermi

El desarrollo presentado en esta sección está basado en el expuesto en las Refs. [10] y [14].

2.3.1. Evolución adiabática y cuasipartículas

El concepto de Líquido de Fermi [14, 10, 16] fue desarrollado por Landau y su conclusión principal es que un gas de partículas interactuantes puede ser descrito por un sistema de cuasipartículas casi no interactuantes. Conceptualmente explica por qué un sistema de electrones en un metal puede explicarse a partir de un gas de partículas independientes.

La idea es que partiendo del sistema no interactuante de partículas uno puede analizar el caso interactuante mediante teoría de perturbaciones. Si las excitaciones del sistema no interactuante están conectadas a las excitaciones del caso interactuante mediante una correspondencia uno a uno, entonces se dice que están conectadas adiabáticamente.

Nombremos el momento de cada partícula en el sistema no interactuante como \mathbf{p} y su componente de espín $\sigma = \pm 1/2$. El número $n_{p\sigma}$ de fermiones con momento \mathbf{p} y componente de espín σ es uno o cero, debido al principio de exclusión de Pauli. El estado cuántico del sistema no interactuante puede ser descrito mediante estas ocupaciones como:

$$|\Psi\rangle = |n_{p_1\sigma_1}, n_{p_2\sigma_2}, \dots\rangle. \quad (2.6)$$

En el estado fundamental $|\Psi_0\rangle$, todos los estados con momento p menor al momento de Fermi p_F están ocupados y todos los estados por encima de la superficie de Fermi están vacíos, lo que se traduce como:

$$|\Psi_0\rangle : \quad n_{p\sigma} = \begin{cases} 1 & \text{si } p < p_F \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (2.7)$$

Si la interacción se prende infinitamente lento, el estado $|\Psi_0\rangle$ evolucionará suavemente hasta convertirse en el estado fundamental del sistema interactuante. Esta condición no se cumple si el sistema atraviesa un cambio de fases, en ese caso los estados inicial y final no pueden ser conectados utilizando teoría de perturbaciones. Pero si se evitan esos casos, la evolución adiabática es válida.

Consideremos ahora que al estado $|\Psi_0\rangle$ se le agrega una partícula sobre la superficie de Fermi con momento \mathbf{p}_0 y se repite el proceso de incluir lentamente las interacciones. En este caso se está haciendo evolucionar un estado excitado, por lo que hay que tener en cuenta que al no encontrarse en la superficie de Fermi, un electrón puede decaer emitiendo pares de partícula-agujero, lo que disipa energía de una manera irreversible. Para evitar esto, el tiempo de vida medio de la partícula tiene que ser mayor que el tiempo de encendido de las interacciones. Dado que este último es infinito, y es de interés el estudio de excitaciones que no estén en la superficie de Fermi, se ignora el error cometido al no trabajar con partículas de tiempo de vida medio infinito, ya que este error puede volverse arbitrariamente chico al trabajar con perturbaciones pequeñas alrededor del estado fundamental.

La evolución adiabática conserva el momento del nuevo estado en el sistema no interactuante, el cual evolucionará suavemente a un estado final de cuasipartícula definido por:

$$|\Psi\rangle_{\mathbf{p}_0\sigma_0} : \quad n_{p\sigma} = \begin{cases} 1 & \text{si } p < p_F \text{ o } \mathbf{p} = \mathbf{p}_0, \sigma = \sigma_0 \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (2.8)$$

El estado de cuasipartícula tiene momento total \mathbf{p}_0 con $|\mathbf{p}_0| > p_F$ y energía mayor a la del estado fundamental. Se le llama estado de cuasipartícula porque se comporta en casi todo sentido como el de una sola partícula. La diferencia es que la cuasipartícula de Landau está solo bien definida cerca de la superficie de Fermi, ya que lejos de esta las cuasipartículas adquieren un tiempo de vida finito (mientras que en la superficie de Fermi es infinito), y una vez que el tiempo de vida se vuelve comparable con la excitación de energía de las cuasipartículas, el concepto de cuasipartícula pierde sentido.

Pero no solo se conserva el momento entre el sistema no interactuante y el interactuante, sino que también todas aquellas magnitudes que son conservadas por el Hamiltoniano, como la carga, la corriente y el espín, ya que los operadores correspondientes comutan con el Hamiltoniano. Por lo tanto, las cuasipartículas se definen como las excitaciones del sistema interactuante que se corresponden con la creación o aniquilación de partículas. Estas excitaciones pueden ser caracterizadas por los mismos números cuánticos que en el caso no interactuante. Para un sistema con invarianza translacional de electrones interactuando entre sí mediante la fuerza de Coulomb, los números cuánticos son el momento \mathbf{p} , el espín σ , la carga eléctrica $-e$ y la velocidad $v_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/m$. A bajas temperaturas hay solo algunas cuasipartículas que conforman un gas diluido.

2.3.2. Tiempo de vida finito y bases microscópicas del Líquido de Fermi

Si se tiene en cuenta el scattering entre cuasipartículas (mecanismo que existe puesto que las cuasipartículas poseen carga eléctrica, por lo tanto interactúan mediante la interacción de Coulomb) se obtiene que las mismas tienen un tiempo de vida finito que se relaciona con la temperatura mediante [14]

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} \propto T^2, \quad (2.9)$$

en donde $\tau_{\mathbf{k}}$ es el tiempo de vida de las cuasipartículas. Este tiempo de vida diverge para bajas temperaturas y entonces la condición para la aproximación adiabática se cumple en tanto la temperatura sea mucho más baja que la energía de Fermi. Dado que en metales usuales la energía de Fermi es una escala de energía grande, la condición se cumple inclusive para temperaturas moderadamente elevadas.

La función que mide la densidad de estados debida a la adición de partículas es la función de Green retardada G^R . Consideremos la función de Green retardada de una partícula, que en general puede ser escrita como

$$G^R(\mathbf{k}, w) = \frac{1}{w - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma^R(\mathbf{k}, w)}, \quad (2.10)$$

en donde $\xi_{\mathbf{k}} = k^2/2m - \mu$ es la energía del electrón libre medida respecto del potencial químico μ y $\Sigma^R(\mathbf{k}, w)$ es la auto-energía retardada. Si la escribimos separando a la auto-energía en su parte real y parte imaginaria queda:

$$G^R(\mathbf{k}, w) = \frac{1}{w - [\xi_{\mathbf{k}} + \text{Re}\Sigma^R(\mathbf{k}, w)] - i\text{Im}\Sigma^R(\mathbf{k}, w)}. \quad (2.11)$$

Dado que la noción de cuasipartícula tiene sentido en zonas cercanas a la superficie de Fermi, esto quiere decir que se puede inspeccionar el caso en el que los valores del número de onda \mathbf{k} son cercanos al número de onda renormalizado de Fermi \tilde{k}_F , el cual se define a partir de pedir que la parte real de la energía se anule, es decir, $\xi_{\tilde{k}_F} + \text{Re}\Sigma^R(\tilde{k}_F, 0) = 0$. Para k cercano a \tilde{k}_F se puede hacer una expansión de G^R en potencias de $k - \tilde{k}_F$ y w , lo que lleva a

$$\begin{aligned} G^R(\mathbf{k}, w) &\approx [w - w\partial_w \text{Re}\Sigma^R - (k - \tilde{k}_F)\partial_{\mathbf{k}}(\xi_{\mathbf{k}} + \text{Re}\Sigma^R) - i\text{Im}\Sigma^R]^{-1} \\ &\equiv Z \left[w - \tilde{\xi}_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tilde{\tau}_{\mathbf{k}}(w)} \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

en donde

$$Z^{-1} = 1 - \frac{\partial}{\partial w} \text{Re}\Sigma^R(\tilde{k}_F, w) \Big|_{w=0} \quad (2.13)$$

$$\tilde{\xi}_{\mathbf{k}} = (k - \tilde{k}_F)Z \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}(\xi_{\mathbf{k}} + \text{Re}\Sigma^R(\mathbf{k}, 0))_{k=\tilde{k}_F} \quad (2.14)$$

$$\frac{1}{\tilde{\tau}_{\mathbf{k}}(w)} = -2Z\text{Im}\Sigma^R(\mathbf{k}, w). \quad (2.15)$$

La energía efectiva suele ser expresada como

$$\tilde{\xi}_{\mathbf{k}} = \frac{(k - \tilde{k}_F)\tilde{k}_F}{m^*}, \quad (2.16)$$

en donde m^* corresponde a la masa efectiva la cual es expresada según

$$\frac{m}{m^*} = Z \left(1 + \frac{m}{\tilde{k}_F} \frac{\partial}{\partial k} \text{Re}\Sigma^R(k, 0) \Big|_{k=\tilde{k}_F} \right). \quad (2.17)$$

Dado que para bajas temperaturas, el tiempo de vida de las cuasipartículas tiende a infinito, eso implica debido a la Ec. (2.15) que $\text{Im}\Sigma^R \approx -\eta$ con η chico. En este caso, veamos como es la función espectral $A(\mathbf{k}, w)$, la cual se define como

$$A(\mathbf{k}, w) \equiv -2\text{Im}G^R(\mathbf{k}, w). \quad (2.18)$$

Para tiempo de vida de cuasipartículas infinito, la Ec. (2.12) queda

$$\begin{aligned} G^R(\mathbf{k}, w) &= \frac{Z}{w - \tilde{\xi}_{\mathbf{k}} + iZ\nu} \\ &= \frac{Z(w - \tilde{\xi}_{\mathbf{k}} - iZ\eta)}{(w - \tilde{\xi}_{\mathbf{k}})^2 + (Z\eta)^2}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

por lo tanto, utilizando la Ec. (2.18):

$$A(\mathbf{k}, w) \approx 2\pi Z\delta(w - \tilde{\xi}_{\mathbf{k}}). \quad (2.20)$$

En donde se utilizó que η es chico y la definición de la delta de Dirac, la cual se puede definir como el límite de una Lorentziana

$$\delta(x) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2}. \quad (2.21)$$

Por lo tanto, si la auto-energía posee una parte imaginaria chica, la función espectral tiene un pico en $w = \tilde{\xi}_{\mathbf{k}}$. Esta función espectral es similar a la función espectral de un gas de electrones no interactuantes dada por $A_0(\mathbf{k}, w) = 2\pi\delta(w - \xi_{\mathbf{k}})$, solo que ahora el polo es identificado como la cuasipartícula que fue definida en la teoría de Líquido de Fermi. Una de las diferencias es que esta función espectral no cumple con la condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dw}{2\pi} A(\mathbf{k}, w) = 1, \quad (2.22)$$

por lo tanto, hay que agregarle una parte a la densidad espectral que integre como $1 - Z$. Entonces queda definida como

$$A(\mathbf{k}, w) = 2\pi Z\delta(w - \tilde{\xi}_{\mathbf{k}}) + A'(\mathbf{k}, w), \quad (2.23)$$

en donde $A'(\mathbf{k}, w)$ contiene excitaciones de muchos cuerpos mas complicadas (Ver Fig. 2.1).

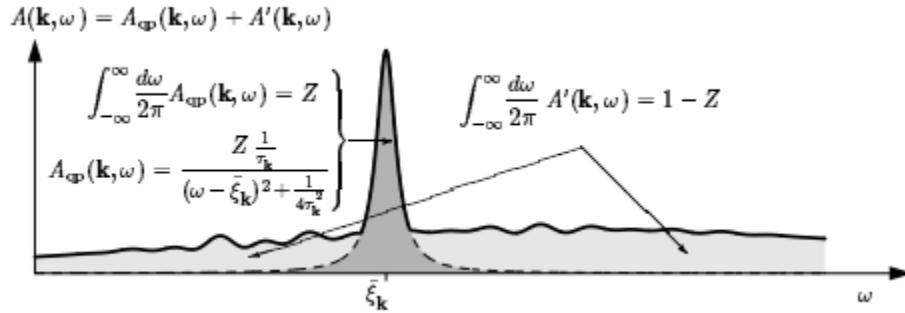


Figura 2.1: Función espectral total en función de la frecuencia w . Contiene un pico el cual es asociado con la cuasipartícula, aunque también contiene otras contribuciones debidas a excitaciones de muchos cuerpos. Figura extraída de [14]

Falta demostrar que la parte imaginaria de la auto-energía efectivamente es chica. Este es un resultado conocido [14] y postula que la parte imaginaria de cualquier diagrama para la auto-energía va a cero como w^2 o más rápido, es decir

$$\text{Im}\Sigma^R(k_F, w) \propto \max(w^2, T^2). \quad (2.24)$$

Esto explica por qué la teoría del Líquido de Fermi funciona, ya que cuando la parte imaginaria de la auto-energía se va a cero, la función de Green de una partícula es la misma que la del caso libre.

Capítulo 3

Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT)

La Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT por sus siglas en inglés) es una de las herramientas fundamentales para el entendimiento de materiales fuertemente correlacionados. Se han obtenido grandes avances en el estudio del modelo de Hubbard gracias a esta herramienta. La idea esencial es reemplazar un modelo de red por un problema de impureza cuántica de un solo sitio rodeado por un medio efectivo el cual es determinado auto-consistentemente. Este modelo de impureza ofrece una imagen intuitiva de las dinámicas locales de un sistema de muchos cuerpos cuántico. La condición de auto-consistencia captura la invarianza traslacional y los efectos de coherencia de la red. La formulación expuesta sigue de cerca la presentada en [17].

3.1. Campo medio clásico

El objetivo de una teoría de campo medio es aproximar un problema de una red con muchos grados de libertad por un problema de un solo sitio efectivo con menos grados de libertad. La idea física subyacente es que la dinámica en un sitio dado puede ser pensada como la interacción de los grados de libertad en ese sitio con un baño externo creado por todos los otros grados de libertad de los otros sitios.

Veamos como un ejemplo simple de esto el caso del modelo de Ising con acople ferromagnético $J_{ij} > 0$ entre primeros vecinos en una red con número de coordinación z :

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i. \quad (3.1)$$

La teoría de campo medio de Weiss consiste en ver a cada sitio (por ejemplo, el sitio o) como gobernado por un Hamiltoniano efectivo

$$H_{\text{eff}} = -h_{\text{eff}} S_o. \quad (3.2)$$

Todas las interacciones con los sitios restantes son incluidas en el campo efectivo h_{eff} . La función de partición efectiva está dada por

$$Z_{\text{eff}} = \sum_{S_o=\pm 1} \exp(\beta h_{\text{eff}} S_o) = 2 \cosh \beta h_{\text{eff}}, \quad (3.3)$$

y la magnetización en el sitio o , m_o , es::

$$m_o = \frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_{\text{eff}}} \frac{\partial Z_{\text{eff}}}{\partial h_{\text{eff}}} = \tanh \beta h_{\text{eff}}. \quad (3.4)$$

Si ahora tomamos $m_i = \langle S_i \rangle$ como la magnetización en el sitio i , suponemos invarianza translacional ($J_{ij} = J$ para primeros vecinos y $m_i = m$) y aproximamos el baño efectivo como:

$$h_{\text{eff}} \approx h + \sum_i J_{oi} m_i = h + z J m, \quad (3.5)$$

juntando con la Ec. (3.4) se llega a la ecuación de campo medio para la magnetización

$$m = \tanh(\beta h + z \beta J m) \quad (3.6)$$

Estas ecuaciones de campo medio son, en general, una aproximación a la verdadera solución del modelo de Ising. Pero se vuelve exacta en el límite de coordinación de la red grande. Esto es bastante intuitivo ya que cuando los primeros vecinos son muchos, es más natural tratarlos a todos como un baño efectivo ya que las fluctuaciones espaciales del campo local se vuelven despreciables.

A partir de la Ec. (3.5) es claro que el acoplamiento J debe escalar como $J = J^*/z$ para que se alcance un límite finito cuando $z \rightarrow \infty$.

3.2. Ecuaciones de DMFT para el modelo de Hubbard

El mismo método puede ser extendido a un sistema de muchos cuerpos cuántico, veamos el caso con el modelo de Hubbard, el cual podemos escribir como

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (3.7)$$

La descripción de campo medio asocia a este Hamiltoniano una dinámica efectiva de un solo sitio, la cual es descrita en términos de una acción en tiempo imaginario para los grados de libertad fermionicos en ese sitio:

$$S_{\text{eff}} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{o\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{o\sigma}(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_{o\uparrow}(\tau) n_{o\downarrow}(\tau). \quad (3.8)$$

En donde $c_{o\sigma}^\dagger$ y $c_{o\sigma}$ son variables de Grassman asociadas a los operadores creación y destrucción respectivamente. $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ corresponde a la amplitud efectiva de que un fermión sea creado en el sitio aislado a tiempo τ (viniendo del baño externo) y sea destruido a tiempo τ' (es devuelto al baño externo). $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$ juega el rol del campo efectivo de Weiss, aunque la principal diferencia con el caso clásico es que esta función de Weiss generalizada depende del tiempo en lugar de ser un número.

La acción efectiva de un solo sitio aislado descrita en la Ec. (3.8) coincide con la acción obtenida mediante una sola impureza en el modelo de Anderson, que describe una impureza magnética acoplada a un baño de conducción. En términos de segunda cuantización, el Hamiltoniano del modelo de Anderson se puede escribir como:

$$H_{AM} = \sum_{l\sigma} \epsilon_l a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} + \sum_{l\sigma} V_l (a_{l\sigma}^\dagger c_{o\sigma} + c_{o\sigma}^\dagger a_{l\sigma}) - \mu \sum_\sigma c_{o\sigma}^\dagger c_{o\sigma} + U n_{o\uparrow} n_{o\downarrow}, \quad (3.9)$$

utilizando el formalismo de integrales de camino, se llega a que

$$\mathcal{G}_0^{-1}(iw_n)^{\text{AM}} = iw_n + \mu - \Delta(iw_n), \quad (3.10)$$

$$\Delta(iw_n) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{iw_n - \epsilon_l}, \quad (3.11)$$

en donde $\Delta(iw_n)$ corresponde a la función hibridación del modelo. Para el modelo de impureza podemos definir la función de Green interactuante como $G_{\text{imp}}(\tau - \tau') \equiv -\langle T_\tau c(\tau) c^\dagger(\tau') \rangle_{S_{\text{eff}}}$ (T_τ corresponde al operador ordenamiento temporal), a su vez también podemos definir la auto-energía del modelo de impureza como

$$\Sigma_{\text{imp}} \equiv \mathcal{G}_0^{-1}(iw_n)^{\text{AM}} - G_{\text{imp}}^{-1}(iw_n) = iw_n + \mu - \Delta(iw_n) - G_{\text{imp}}^{-1}. \quad (3.12)$$

Volviendo al modelo de red original, también podemos hacer lo propio definiendo la función de Green de una partícula como $G_{ij}(\tau - \tau') \equiv -\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle$, cuya transformada de Fourier es:

$$G(\mathbf{k}, iw_n) = \frac{1}{iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, iw_n)}. \quad (3.13)$$

La primera aproximación de DMFT (que, sin embargo, es exacta cuando el número de coordinación es infinito) es que la auto-energía es independiente de \mathbf{k} , es decir, que es puramente local en el espacio: $\Sigma_{ij}(iw_n) = \delta_{ij}\Sigma(iw_n)$.

La aproximación de campo medio se realiza a partir de igualar la auto-energía del modelo de impureza con la de la red original

$$\Sigma_{\text{imp}}(iw_n) \approx \Sigma_{\text{loc}}(iw_n). \quad (3.14)$$

Si reemplazamos esto en la Ec. (3.12) y utilizamos $G_{\text{imp}} = G_{\text{loc}}$ obtenemos

$$\Delta(iw_n) \cong iw_n + \mu - \Sigma_{\text{loc}} - G_{\text{loc}}^{-1}, \quad (3.15)$$

por lo tanto, la condición de auto-consistencia queda expresada como una condición sobre la función de hibridación Δ . La información de la red utilizada queda incluida en G_{loc} ya que

$$G_{\text{loc}}(iw_n) = \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, iw_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\text{loc}}(iw_n)} = \int d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)}{\zeta - \epsilon} \equiv \tilde{D}(\zeta), \quad (3.16)$$

en donde se definió $\zeta \equiv iw_n + \mu - \Sigma_{\text{loc}}(iw_n)$ y $\tilde{D}(\zeta)$ corresponde a la transformada de Hilbert, $\rho(\epsilon)$ es la densidad de estados de la red no interactuante.

La estructura de la Teoría de Campo Medio Dinámico consiste en una ecuación funcional para la función local de Green $G_{\text{loc}}(iw_n)$ y la función de Weiss $\mathcal{G}_0(iw_n)$. A diferencia del caso clásico, la acción efectiva S_{eff} es de un problema de muchos cuerpos. Esto es debido a que el enfoque congela las fluctuaciones espaciales pero mantiene las fluctuaciones cuánticas locales. Como función de un tiempo imaginario, cada sitio es expuesto a transiciones entre los cuatro estados cuánticos posibles, $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ y $|\uparrow\downarrow\rangle$ mediante intercambio de electrones con el resto de la red descrita como un baño externo. La información de la dinámica de estos procesos se encuentra en la función de Weiss $\mathcal{G}_0(\tau - \tau')$.

A efectos prácticos, la resolución de las ecuaciones se realiza de manera iterativa, inicializando el problema con una cierta $\Delta(iw_n)$ que puede ser, por ejemplo, la del caso no interactuante. Con esto se resuelve el problema de la impureza, lo que brinda $\Sigma_{\text{imp}} = \Sigma_{\text{loc}}$. Luego, utilizando la Ec. (3.16) se obtiene G_{loc} , que se utiliza para encontrar un nuevo valor para $\Delta(iw_n)$ mediante la condición de auto-consistencia de la Ec. (3.15) y con esto volver a resolver el problema de la impureza. Este ciclo continua hasta que $\Delta(iw_n)$ converge, en muchos casos esto se logra independientemente de la elección inicial de la función de hibridación.

3.3. Límite de dimensión infinita

Las ecuaciones de campo medio se vuelven exactas en el límite de número de coordinación infinito en cualquier red. En particular, el caso de interés para este trabajo es el de la red de Bethe (árbol de Cayley). Esta red corresponde a una estructura de tipo árbol que para el caso de número de conectividad $z = 3$ es la mostrada en la Fig. 3.1. El término de hopping se

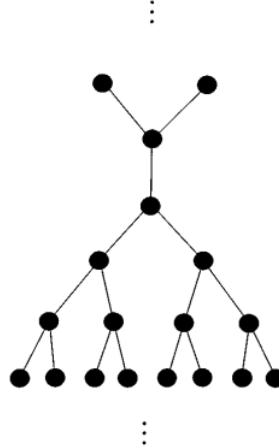


Figura 3.1: Red de Bethe para $z = 3$. Figura tomada de [17].

renormaliza mediante $t_{ij} = t/\sqrt{z}$. Para el caso de $z \rightarrow \infty$ la densidad de estados de esta red es

$$\rho(\epsilon) = \frac{\sqrt{4t^2 - \epsilon^2}}{2\pi t^2}, \quad |\epsilon| < 2t. \quad (3.17)$$

Para este caso particular de red con numero de coordinación infinito la función de Weiss es

$$\mathcal{G}_0^{-1}(iw_n) = iw_n + \mu - t^2 G(iw_n), \quad (3.18)$$

que comparando con la Ec. (3.10) se obtiene

$$\Delta(iw_n) = t^2 G(iw_n). \quad (3.19)$$

Por lo tanto, se observa la gran ventaja de esta red, y es la simplicidad de su auto-consistencia. También su transformada de Hilbert posee una expresión sencilla en el límite de dimensión infinita

$$\tilde{D}(\zeta) = \frac{\zeta - \sqrt{\zeta^2 - 4t^2}}{2t^2}. \quad (3.20)$$

3.4. El modelo de Hubbard y la transición de Mott

Debido a que el modelo de Hubbard tiene en cuenta la interacción local de Coulomb, se deben utilizar métodos de muchos cuerpos para poder describirlo, como por ejemplo DMFT. Los parámetros de control del modelo son la temperatura T y la fuerza de interacción U/t . Una de las predicciones de este modelo es que presenta en su diagrama de fases una transición de Mott, es decir, una transición metal-aislante generada por la interacción electrón-electrón en un sistema homogéneo. Esta transición se puede observar experimentalmente en óxidos metálicos tridimensionales como V_2O_3 , y puede ser generada variando la presión, temperatura o composición, como se muestra en la Fig. 3.2.

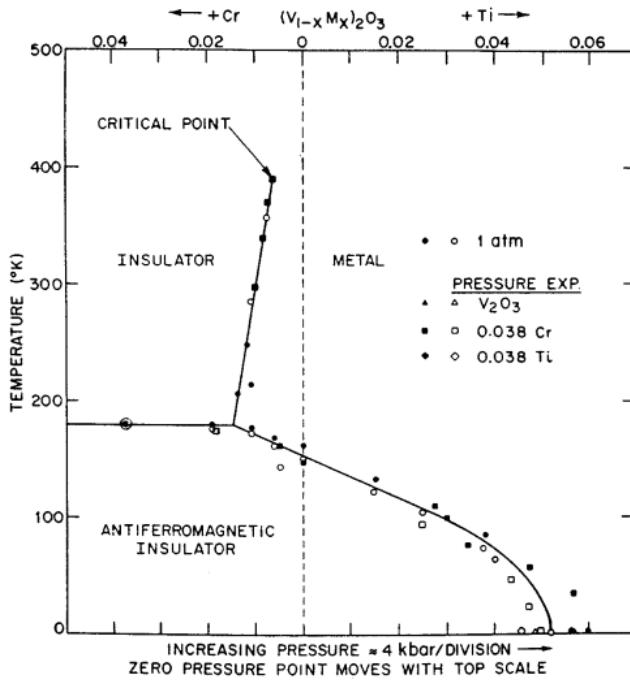


Figura 3.2: Diagrama de fases experimental para la transición metal-aislante en V_2O_3 como función del dopaje de los átomos de Cr o Ti y en función de la presión. Figura tomada de [17]

El modelo de Hubbard de una sola banda a llenado mitad ($\mu = U/2$) se puede definir convenientemente como

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i (n_{i\uparrow} - 1/2)(n_{i\downarrow} - 1/2) \quad (3.21)$$

y se define $\Delta\mu \equiv \mu - U/2$. Si se considera una red de Bethe con hopping a primeros vecinos t_1 y a segundos vecinos t_2 , la condición de auto-consistencia es

$$\mathcal{G}_0^{-1} = iw_n + \Delta\mu - (t_1^2 + t_2^2)G(iw_n), \quad (3.22)$$

y la mitad del ancho de banda de la densidad de estados no interactuante es

$$D = 2\sqrt{t_1^2 + t_2^2}. \quad (3.23)$$

A partir de la utilización de DMFT se puede realizar un análisis cualitativo del comportamiento a $T = 0$ con llenado mitad ($\Delta\mu = 0$). En el límite de U chico, la simetría partícula-agujero implica $\Sigma(i0^+) = U/2$. Debido a esto, utilizando la Ec. (3.20) con $\zeta = 0$ y $t^2 \rightarrow t_1^2 + t_2^2$ se llega a la expresión para la función de Green local. Por lo tanto, mediante la Ec. (3.22) se llega a $\mathcal{G}_0^{-1}(i0^+) = iD/2$. A medida que se incrementa el valor de U , se espera que el comportamiento de la auto-energía para bajas frecuencias sea la de un Líquido de Fermi:

$$\text{Re}\Sigma(w + i0^+) = U/2 + (1 - 1/Z)w + O(w^3), \quad (3.24)$$

$$\text{Im}\Sigma(w + i0^+) = -Bw^2 + O(w^4). \quad (3.25)$$

En donde B es una constante y Z es el residuo de cuasipartícula. Este último produce directamente la masa de las cuasipartículas a partir de la Ec. (2.17), en donde ahora la auto-energía

no depende de k :

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{Z}. \quad (3.26)$$

El gráfico del residuo de cuasipartícula se muestra en función de U en la Fig. 3.3, en donde se observa que para U chicos, Z es 1 y a medida que el primero aumenta, Z tiende a cero, indicando la desaparición de las cuasipartículas y el comienzo de la fase aislante.

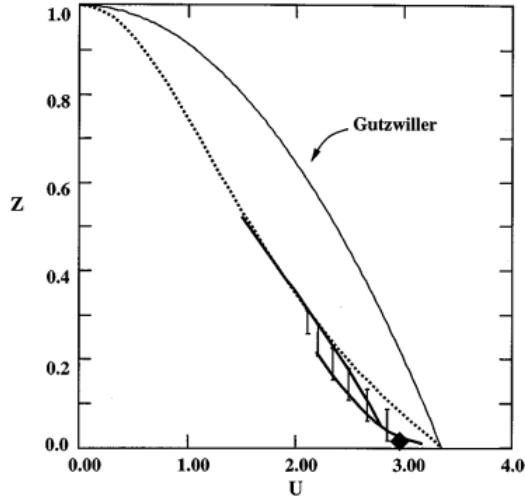


Figura 3.3: Residuo de cuasipartícula en función de U obtenido a partir de distintos métodos. Imagen tomada de [17].

Otro resultado importante es la densidad de estados para distintos valores de U

$$\rho \equiv -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im}G(\mathbf{k}, w + i0^+), \quad (3.27)$$

la cual se puede observar en la Fig. 3.4 para $T = 0$. Para valores pequeños de U es similar a la densidad de estados sin interacción, mientras que a medida que se incrementa, aparece un pico de cuasipartícula en el nivel de Fermi de peso Z . Además aparecen dos características adicionales en $w = \pm U/2$ a las cuales se las llama bandas de Hubbard. Estas bandas se distinguen en una baja (ubicada en $w = -U/2$) correspondiente a los sitios doblemente ocupados, y una banda alta (en $w = +U/2$) que corresponde a los agujeros o espacios vacíos.

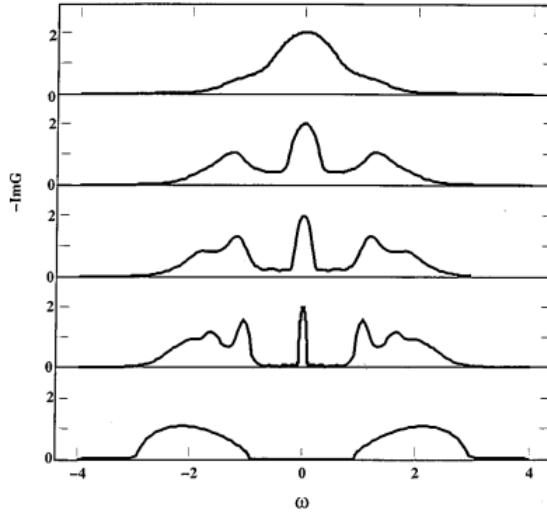


Figura 3.4: Densidad espectral con $T = 0$ para distintos valores de U crecientes. Se observa una redistribución del peso espectral a medida que aumenta U , conformándose un pico en la energía de Fermi ($w = 0$), para finalmente desaparecer indicando que el sistema se volvió aislante. Figura tomada de [17].

3.5. Modelo propuesto

El Hamiltoniano propuesto para este trabajo consiste en el modelo del dímero de Hubbard con solo un sitio correlacionado:

$$H[c^\dagger, c] = \left[-t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha\sigma} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} + t_\perp \sum_{i\sigma} c_{i1\sigma}^\dagger c_{i2\sigma} + H.c \right] + U \sum_i n_{i1\uparrow} n_{i1\downarrow}, \quad (3.28)$$

en donde $\alpha = 1, 2$ indica el sitio y $\sigma = \uparrow, \downarrow$ el espín. En la Fig. 3.5 se puede ver un esquema de este Hamiltoniano en 1D.

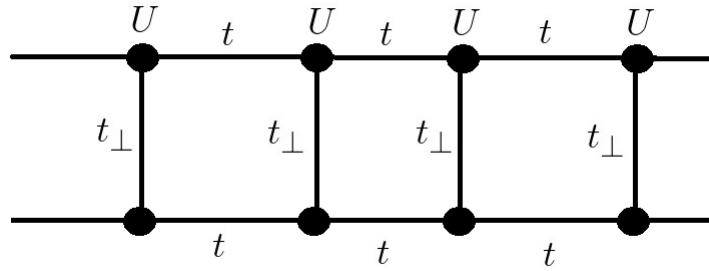


Figura 3.5: Esquema del modelo propuesto, en el caso de una red en 1D. Se observan dos cadenas de las cuales solo una posee correlación U . Ambas cadenas tienen el término de hopping t entre ellas mismas y se conectan mediante un término de hopping t_\perp .

Este modelo fue estudiado en las Refs. [18, 19, 20] con la diferencia de que se agregan energías de sitio al Hamiltoniano para garantizar que exista el caso simétrico en el cual el número de ocupación medio por sitio sea $\langle n_1 \rangle = \langle n_2 \rangle = 1$. En las referencias se analiza tanto el caso de $T = 0$ como $T \neq 0$. Con esto, realizan diagramas de fases en donde encuentran una transición de

Mott para ciertos valores de los parámetros, así como también una región en la cual se encuentra un comportamiento de NFL debido a la dependencia en frecuencia de la parte imaginaria de la auto-energía.

A lo largo de este trabajo se fijaron los valores de los términos de hopping $t = 1/2$ y $t_{\perp} = 0.3$. También se trabajó siempre con la red de Bethe para ambas cadenas, lo que implica una densidad de estados dada por la Ec. (3.17). Una de las ventajas del Hamiltoniano propuesto en la Ec. (3.28) es que mediante el formalismo de integrales de camino, se pueden integrar grados de libertad, esto es debido a que hay una cadena que no presenta interacción, por lo tanto sus términos son cuadráticos.

Con este hamiltoniano, la acción efectiva para DMFT resulta:

$$S_{\text{ef}} = \int_0^{\beta} d\tau \left(\sum_{\sigma} c_{0\sigma}^{\dagger}(\tau) (\partial_{\tau} - \mu_{00}) c_{0\sigma}(\tau) + U n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau) \right) + \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\sigma} c_{0\sigma}^{\dagger}(\tau) c_{0\sigma}(\tau') \sum_{ij,0} t_{i0} t_{j0} G_{ij\sigma}^{(0),c}(\tau, \tau'), \quad (3.29)$$

en donde

$$\mu_{ii} \equiv \mu + t_{\perp}^2 \tilde{G}_{ii},$$

con \tilde{G}_{ii} la función de Green de la cadena no correlacionada. Esto nos permite introducir un propagador efectivo en el espacio de frecuencias de Matsubara:

$$\mathcal{G}_{0\sigma}^{-1}(iw_n) \equiv iw_n + \mu_{00} - \sum_{\langle ij,0 \rangle} t_{i0} t_{j0} G_{ij\sigma}^{(0),c}(iw_n) \quad (3.30)$$

con $G_{ij\sigma}^{(0),c}(iw_n)$ la función de Green conectada del sistema con los grados de libertad integrados.

La integración de los grados de libertad así como la obtención de las ecuaciones de DMFT mediante el método de la cavidad pueden encontrarse en los Apéndices A y B.

3.5.1. Auto-consistencia

Podemos reescribir $\mathcal{G}_0^{-1}(iw_n)$ según

$$\mathcal{G}_0^{-1}(iw_n) = iw_n + \mu - t_{\perp}^2 G_{00}^{(2)}(iw_n) - \Delta(iw_n) \quad (3.31)$$

en donde el superíndice (2) hace referencia a la cadena 2 que corresponde a la cadena no correlacionada y

$$\Delta(iw_n) \equiv \sum_{\langle ij,0 \rangle} t_{i0} t_{j0} G_{ij\sigma}^{(0),c}(iw_n).$$

También vamos a definir Δ_0 de la siguiente manera:

$$\Delta_{0,k} = \frac{1}{iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}} \implies \Delta_0 \equiv \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{0,\mathbf{k}} = G_{00}^{(2)} \quad (3.32)$$

en donde estamos suponiendo que $t_1 = t_2 \equiv t$, ambas cadenas son idénticas, entonces $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(1)} = \epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}}$.

Para la cadena correlacionada (1) la función de Green es

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^{(1)} = \frac{1}{iw_n + \mu - t_{\perp}^2 \Delta_{0,\mathbf{k}}(iw_n) - \Sigma(iw_n)} \implies G_{\text{loc},\sigma}^{(1)} = \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k},\sigma}^{(1)}, \quad (3.33)$$

por lo tanto, la condición de auto-consistencia que se utiliza está dada por

$$\Delta_{\text{Auto-cons}} = iw_n + \mu - \Sigma - \left(G_{\text{loc},\sigma}^{(1)} \right)^{-1} \quad (3.34)$$

3.5.2. Conexión con el problema original

El software brinda como archivos de salida a G_{imp} y Σ_{imp} . A partir de estos datos nos interesa reconstruir las funciones de Green del problema original (sin los grados de libertad integrados). Para ello notemos que, por definición, la función de Green del problema es:

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^{-1} = (iw_n + \mu) \mathbb{1} - \mathbb{H}_{\mathbf{k}} - \Sigma, \quad (3.35)$$

en donde

$$\mathbb{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} & -t_{\perp} \\ -t_{\perp} & \epsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}; \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{\text{imp}} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Tomando la inversa de la matriz 2x2 (notación $\Sigma_{\text{imp}} \equiv \Sigma$):

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(iw_n) = \frac{1}{(iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma)(iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) - t_{\perp}^2} \begin{pmatrix} iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} & t_{\perp} \\ t_{\perp} & iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma \end{pmatrix}, \quad (3.36)$$

entonces, si $G_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{pmatrix} G^{(1)} & G^{(12)} \\ G^{(12)} & G^{(2)} \end{pmatrix}$ tenemos:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(iw_n) = \frac{1}{iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - t_{\perp}^2 \Delta_{0,\mathbf{k}} - \Sigma} \quad (3.37)$$

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)}(iw_n) = -\frac{1}{t_{\perp}^2} \frac{1}{iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{t_{\perp}}{iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma}} \quad (3.38)$$

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^{(12)}(iw_n) = \frac{t_{\perp}}{(iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma)(iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) - t_{\perp}^2} \quad (3.39)$$

Se puede observar que por mas que en la red 2 no hay interacción, su función de Green se ve afectada por la auto-energía Σ . El sistema completo se modifica.

Capítulo 4

Cálculo de la conductividad

La teoría de respuesta lineal establece que la respuesta a una perturbación externa débil es proporcional a la misma. La función de respuesta que caracteriza la corriente de electrones es la conductividad. En el espacio de frecuencias se puede relacionar la densidad de corriente a frecuencia w con el correspondiente campo eléctrico mediante:

$$\mathbf{j}(w) = \sigma(w)\mathbf{E}(w). \quad (4.1)$$

En donde $\sigma(w)$ es la conductividad óptica, \mathbf{j} la densidad de corriente y $\mathbf{E}(w)$ el campo eléctrico. A lo largo de esta sección, en primer lugar se dará cuenta de un modelo para describir la conductividad óptica, mientras que luego nos va a interesar calcular σ a partir de funciones de correlación microscópicas, con la finalidad de poder, a partir de los cálculos de DMFT, analizar la conductividad para distintos parámetros del modelo propuesto.

4.1. Modelo de Drude-Lorentz

4.1.1. Modelo de Drude

El modelo de Drude [21] consiste en un modelo clásico de gas de electrones. Se trata a los electrones del gas como esferas solidas idénticas, las cuales se mueven en linea recta hasta que colisionan con otras. Los núcleos de carga positiva junto con los electrones fuertemente ligados a estos son tomados como estáticos y forman iones metálicos, mientras que los electrones de valencia se pueden mover libremente por el material.

Este modelo realiza ciertas suposiciones:

- Las interacciones de un electrón con otro electrón y con los iones entre colisiones no son tenidas en cuenta. Por lo tanto en ausencia de un campo electromagnético externo, cada electrón se mueve uniformemente en linea recta.
- Las colisiones son tomadas como eventos instantáneos que alteran abruptamente la velocidad de un electrón.
- Se supone que un electrón experimenta una colisión con una probabilidad por unidad de tiempo dada por $1/\tau$. El parámetro τ es conocido como el tiempo de relajación e indica el tiempo medio que viaja un electrón libremente entre dos colisiones sucesivas.
- Los electrones llegan al equilibrio térmico con el entorno únicamente mediante colisiones.

Si n electrones por unidad de volumen se mueven con velocidad \mathbf{v} , la densidad de corriente está dada por

$$\mathbf{j} = -nev\mathbf{v},$$

con $-e$ la carga del electrón. En un tiempo arbitrario t la velocidad media \mathbf{v} está dada simplemente por \mathbf{p}/m , en donde \mathbf{p} es el momento total por electrón. La ecuación de movimiento de \mathbf{p} es:

$$\frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} = -\frac{\mathbf{p}(t)}{\tau} + \mathbf{f}(t), \quad (4.2)$$

con $\mathbf{f}(t)$ la fuerza que actúa sobre los electrones. El término $-\mathbf{p}(t)/\tau$ indica que las colisiones amortiguan el movimiento de los electrones, puesto que en ausencia de fuerzas externas, la ecuación tiene como solución en la componente \hat{x} a la expresión: $p_x(t) = \exp(-t/\tau)$. Esto implica que para tiempos mucho más grandes que el tiempo medio por colisión, el momento por electrón tiende a cero. Esto es debido a que luego de sucesivas colisiones, es equiprobable encontrar a un electrón con momento $p_0\hat{x}$ a encontrarlo con momento $-p_0\hat{x}$. Por lo tanto, al realizar el promedio sobre todos los electrones del sistema, el valor medio es cero.

Si nos interesa calcular la corriente inducida en un metal por un campo eléctrico dependiente del tiempo, tenemos que este último está descrito mediante

$$\mathbf{E}(t) = \operatorname{Re}(\mathbf{E}(w)e^{-iwt}). \quad (4.3)$$

Por lo tanto, la Ec. (4.2) pasa a ser:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\mathbf{p}}{\tau} - e\mathbf{E}. \quad (4.4)$$

Dado que buscamos una solución estable se propone:

$$\mathbf{p}(t) = \operatorname{Re}(\mathbf{p}(w)e^{-iwt}), \quad (4.5)$$

sustituyendo queda:

$$-iw\mathbf{p}(w) = -\frac{\mathbf{p}(w)}{\tau} - e\mathbf{E}(w). \quad (4.6)$$

Como la densidad de corriente está dada por $\mathbf{j} = -nep/m$ entonces:

$$\mathbf{j}(t) = \operatorname{Re}(\mathbf{j}(w)e^{-iwt}), \quad (4.7)$$

$$\mathbf{j}(w) = \frac{(ne^2/m)\mathbf{E}(w)}{(1/\tau) - iw}. \quad (4.8)$$

Utilizando entonces la Ec. (4.1) se llega a la «conductividad de Drude»:

$$\sigma_D(w) = \frac{\sigma_0}{1 - iw\tau}, \quad \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}. \quad (4.9)$$

Si se define la frecuencia del plasma:

$$w_p^2 \equiv \frac{4\pi ne^2}{m},$$

entonces, la conductividad de Drude está dada por la expresión

$$\sigma_D(w) = \frac{w_p^2\tau}{4\pi(1 - iw\tau)}. \quad (4.10)$$

4.1.2. Interbandas

En un sólido, los electrones pueden ser excitados de una banda del sólido a otra mediante transiciones ópticas. El estudio de este fenómeno requiere de aplicar el tratamiento cuántico de la interacción luz-materia a la teoría de bandas de los sólidos [22].

Consideremos el caso de dos bandas separadas en un sólido, como se muestra en la Fig. 4.1.

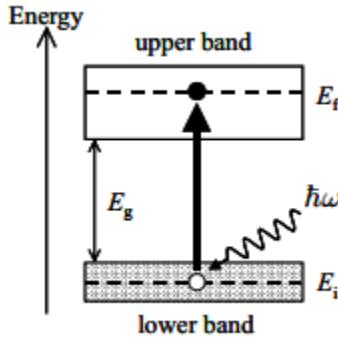


Figura 4.1: Transición óptica entre bandas, el estado inicial posee energía E_i y se sitúa en la banda inferior mientras que el final posee energía E_f y se sitúa en la banda superior. El gap entre ambas bandas es de E_g . Imagen extraída de [22].

El gap entre las bandas es llamado E_g . Las transiciones ópticas entre bandas serán posibles si las reglas de selección lo permiten. Durante la transición, un electrón salta de la banda de menor energía a la de mayor energía mediante la absorción de un fotón. El principio de Pauli exige que el estado final en la banda superior esté vacío. De la Fig. 4.1 se observa que $E_f = E_i + \hbar\omega$, en donde E_f es la energía del estado final que se sitúa en la banda superior, E_i la energía del estado inicial que se sitúa en la banda inferior y $\hbar\omega$ la energía del fotón absorbido. Dado que hay un continuo de estados tanto en la banda superior como en la inferior, la transición entre bandas será posible para un rango continuo de frecuencias.

La excitación del electrón deja al estado inicial en la banda inferior desocupado, lo que es sinónimo de la creación de un agujero en el estado inicial. Por lo tanto, el proceso de absorción entre bandas crea un agujero en el estado inicial y un electrón en el estado final, es decir, se crea un par electrón-agujero.

Para la descripción de estas transiciones interbanda en la conductividad, se utiliza el modelo de osciladores de Lorentz según el cual la contribución a la conductividad óptica de una interbanda centrada en w_0 está dada por

$$\sigma_{w_0} = \frac{w}{4\pi i} \frac{S_0^2}{w_0^2 - w^2 - iw\gamma_0}, \quad (4.11)$$

en donde S_0 y γ_0 son el peso y el ancho espectral respectivamente.

Una representación esquemática usual de la conductividad se puede observar en la Fig. 4.2, en donde se presentan ambas contribuciones, la de Drude dada por la Ec. (4.10) y la de la interbanda dada por la Ec. (4.11).

En general, un medio óptico presenta muchas frecuencias características de resonancias, estas se pueden tratar simplemente como una suma de osciladores de Lorentz. Debido a esto, la conductividad óptica puede describirse en términos del modelo de Drude-Lorentz, en donde se

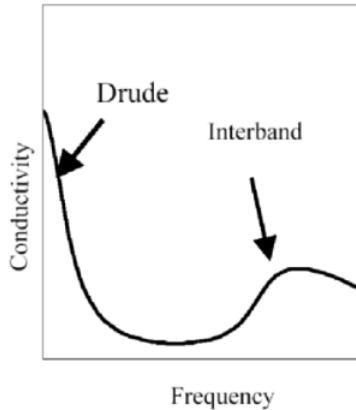


Figura 4.2: Esquema de una conductividad óptica usual. Se observa el pico de Drude junto a una interbanda debida a las transiciones de electrones entre bandas de energía. Figura tomada de [23].

tiene en cuenta la contribución del pico de Drude y las interbandas son descritas en función de osciladores de Lorentz [24]:

$$\sigma(w) = \frac{w_p^2 \tau}{4\pi(1 - iw\tau)} + \frac{w}{4\pi i} \sum_j \frac{S_j^2}{w_j^2 - w^2 - iw\gamma_j}. \quad (4.12)$$

4.2. Teoría de respuesta lineal

En teoría de respuesta lineal, se tiene un Hamiltoniano el cual es perturbado a partir de $t = t_0$,

$$H(t) = H_0 + H'(t)\theta(t - t_0), \quad (4.13)$$

en donde H_0 describe el estado del sistema previo a la aplicación de la perturbación y $H'(t)$ es el término perturbativo. Con este Hamiltoniano, el valor medio de un operador está dado a primer orden por [14]:

$$\langle O(t) \rangle = \langle O \rangle_0 - i \int_{t_0}^t dt' \langle [O(t), H'(t')] \rangle_0, \quad (4.14)$$

en donde $\langle \rangle_0$ hace referencia a que el valor medio es con respecto al Hamiltoniano H_0 . Entonces la respuesta lineal puede escribirse como

$$\delta \langle O(t) \rangle \equiv \langle O(t) \rangle - \langle O \rangle_0 = \int_{t_0}^{\infty} dt' C_{OH'}^R(t, t') e^{-i\eta(t-t')}, \quad (4.15)$$

en donde

$$C_{OH'}^R(t, t') = -i\theta(t - t') \langle [O(t), H'(t')] \rangle_0, \quad (4.16)$$

con η un parámetro positivo infinitesimal que asegura que para $t \gg t'$ la respuesta debida a una perturbación H' a tiempo t' decaiga. En el dominio de las frecuencias se tiene que

$$C_{OH'}^R(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{2\pi} e^{-iwt'} C_{OH'_w}^R(t - t'), \quad (4.17)$$

y se llega a que

$$\delta \langle O_w \rangle = C_{OH'_w}^R(w), \quad (4.18)$$

con

$$C_{OH'_w}^R(w) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iwt} e^{-\eta t} C_{OH'_w}^R(t). \quad (4.19)$$

4.3. Fórmula de Kubo

En la mecánica analítica el potencial vector \mathbf{A} entra en el Lagrangiano mediante

$$L = \frac{1}{2}mv^2 - V + q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}, \quad (4.20)$$

en donde V corresponde a un potencial arbitrario, \mathbf{v} es el vector velocidad, q es la carga del electrón y m es su masa. Notemos que el momento está definido mediante

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}. \quad (4.21)$$

Por lo tanto el Hamiltoniano es:

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + V. \quad (4.22)$$

Si consideramos variaciones infinitesimales $\delta\mathbf{A}$ se obtiene

$$\delta H = H(\mathbf{A} + \delta\mathbf{A}) - H(\mathbf{A}) = -q\mathbf{v} \cdot \delta\mathbf{A} = -q \int d\mathbf{r} \mathbf{J} \cdot \delta\mathbf{A}. \quad (4.23)$$

El operador energía cinética en segunda cuantización se define como:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(\nabla_{\mathbf{r}}^2 \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \right), \quad (4.24)$$

en donde $\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$ y $\Psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ son los operadores cuánticos de campos. Para partículas cargadas se modifica agregando el potencial vector \mathbf{A} :

$$T_{\mathbf{A}} = \frac{1}{2m} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}} - q\mathbf{A} \right)^2 \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (4.25)$$

Si se expande la expresión al cuadrado se observa que hay un término que es de la forma $\Psi_{\sigma}^{\dagger} \nabla \cdot \mathbf{A}$ al cual se lo puede integrar por partes y entonces se llega a

$$H = T + \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{q\hbar}{2mi} \mathbf{A} \left[\left(\nabla \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \right) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) - \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(\nabla \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \right) \right] + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \right\}. \quad (4.26)$$

Ahora utilizando la Ec. (4.23) se puede hallar al operador densidad de corriente el cual se divide en un término diamagnético (\mathbf{J}_D) y uno paramagnético (\mathbf{J}_P):

$$\mathbf{J}_{\sigma}(\mathbf{r}) = \mathbf{J}_{P,\sigma}(\mathbf{r}) + \mathbf{J}_{D,\sigma}(\mathbf{r}), \quad (4.27)$$

$$\mathbf{J}_{P,\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(\nabla \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \right) - \left(\nabla \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \right) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \right], \quad (4.28)$$

$$\mathbf{J}_{D,\sigma}(\mathbf{r}) = -\frac{q}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (4.29)$$

Consideremos ahora que el potencial vector tiene un término relacionado al equilibrio y un término debido a una perturbación externa

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_{\text{ext}}. \quad (4.30)$$

Eligiendo el gauge de manera tal que el potencial eléctrico externo sea cero ($\phi_{\text{ext}} = 0$) se obtiene para el Hamiltoniano externo

$$H_{\text{ext}} = q \int d\mathbf{r} \mathbf{J}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_{\text{ext}}, \quad (4.31)$$

si transformamos mediante Fourier el potencial vector queda $\mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, w) = (1/iw)\mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, w)$, entonces

$$H_{\text{ext}} = \frac{q}{iw} \int d\mathbf{r} \mathbf{J}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, w). \quad (4.32)$$

Si reemplazamos la Ec. (4.30) en la expresión para la corriente dada por la Ec. (4.27) llegamos a

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, w) = \mathbf{J}_0(\mathbf{r}, w) + \frac{q}{m} \mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, w) \rho(\mathbf{r}), \quad (4.33)$$

en donde se definió $\mathbf{J}_0 \equiv \mathbf{J}_{P,\sigma}(\mathbf{r}) + \frac{q}{m} \mathbf{A}_0 \rho(\mathbf{r})$ y $\rho(\mathbf{r}) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r})$. Dado que nos interesa el caso lineal, podemos reemplazar en la Ec. (4.32) a \mathbf{J} por \mathbf{J}_0 y tirar el término que va como $\mathbf{A}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{E}_{\text{ext}}$. El resultado de hacer esto es

$$H_{\text{ext},w} = \frac{q}{iw} \int d\mathbf{r} \mathbf{J}_0(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, w). \quad (4.34)$$

Finalmente estamos en condiciones de tomar el valor medio del operador corriente definido mediante la Ec. (4.33). El segundo término es:

$$\langle \frac{q}{m} \mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, w) \rho(\mathbf{r}) \rangle = \frac{q}{imw} \mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, w) \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle_0. \quad (4.35)$$

Para el primer término, tenemos que utilizar la Ec. (4.14) notando que el estado de equilibrio no tiene corriente $\langle \mathbf{J}_0 \rangle_0 = 0$. Escribiéndolo en el dominio de las frecuencias queda

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J}_0(\mathbf{r}, w) \rangle &= \mathbf{C}_{J_0(\mathbf{r})H_{\text{ext},w}}^R(w), \\ &= \int d\mathbf{r}' \sum_{\beta} \mathbf{C}_{J_0(\mathbf{r})J_0^{\beta}(\mathbf{r}')}^R(w) \frac{q}{iw} E^{\beta}(\mathbf{r}', w), \end{aligned} \quad (4.36)$$

en donde en la segunda igualdad se utilizó la expresión de $H_{\text{ext},w}$ dada por la Ec. (4.34). Por lo tanto, si llamamos $n(\mathbf{r}) = \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle_0$ y juntamos todo, el valor medio del operador corriente queda dado por

$$\langle \mathbf{J}(\mathbf{r}, w) \rangle = \int d\mathbf{r}' \sum_{\beta} \mathbf{C}_{J_0(\mathbf{r})J_0^{\beta}(\mathbf{r}')}^R(w) \frac{q}{iw} E^{\beta}(\mathbf{r}', w) + \frac{qn(\mathbf{r})}{iwm} \mathbf{E}(\mathbf{r}, w), \quad (4.37)$$

el cual si lo expresamos en componentes es:

$$\begin{aligned} \langle J^{\alpha}(\mathbf{r}, w) \rangle &= \int d\mathbf{r}' \sum_{\beta} C_{J_0^{\alpha}(\mathbf{r})J_0^{\beta}(\mathbf{r}')}^R(w) \frac{q}{iw} E^{\beta}(\mathbf{r}', w) + \frac{qn(\mathbf{r})}{iwm} E^{\alpha}(\mathbf{r}, w) \\ &= -\frac{1}{q} \sum_{\beta} \int d\mathbf{r}' \sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', w) E^{\beta}(\mathbf{r}', w), \end{aligned} \quad (4.38)$$

el factor $-1/q$ se agregó puesto que en la definición del tensor conductividad se utiliza que para los electrones se define la corriente como $\mathbf{J}_e = -q\langle \mathbf{J} \rangle$ con q la carga del electrón. Por lo tanto, el tensor conductividad está dado por

$$\sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', w) = \frac{iq^2}{w} \Pi_{\alpha\beta}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', w) + \frac{iq^2 n(\mathbf{r})}{wm} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha\beta}, \quad (4.39)$$

en donde se utilizó el símbolo $\Pi^R = C_{J_0 J_0}^R$ para determinar la función de correlación corriente-corriente retardada. En el dominio temporal resulta ser

$$\Pi_{\alpha\beta}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') = C_{J_0^{\alpha}(\mathbf{r})J_0^{\beta}(\mathbf{r}')}^R(t - t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left[\hat{J}_0^{\alpha}(\mathbf{r}, t), \hat{J}_0^{\beta}(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle_0. \quad (4.40)$$

4.4. Sustitución de Peierls

Dado que estamos considerando un sistema homogéneo con invarianza translacional, el tensor de conductividad es isotrópico y diagonal, es decir, $\sigma^{\alpha\beta} = \sigma\delta^{\alpha\beta}$. Ya que nos interesa poder calcular la conductividad a partir de lo brindado por DMFT, en lo que sigue vamos a obtener una expresión para la corriente con la finalidad de relacionar a Π^R con las funciones de Green del sistema.

Para ello, vamos a trabajar con el Hamiltoniano propuesto en la Ec. (3.28). Con la finalidad de obtener la conductividad óptica del Hamiltoniano, hay que acoplar el campo electromagnético al modelo propuesto, esto se realiza a través de la sustitución de Peierls que implica transformar el término de hopping mediante [23]:

$$t \longrightarrow te^{i \int_i^j \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}} = te^{i\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\delta}}, \quad (4.41)$$

en donde los subíndices \mathbf{i}, \mathbf{j} hacen referencia a las posiciones en la red del sitio i y j respectivamente y $\boldsymbol{\delta} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ es el vector que los une. Se supuso que las funciones de onda están localizadas espacialmente. También se tuvo en cuenta que el potencial vector no varía significativamente de un sitio a otro de la red, por lo que se pudo realizar la integral tomándolo como constante. El Hamiltoniano queda:

$$H[c^\dagger, c] = \left[-t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha\sigma} e^{i\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\delta}} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} + t_\perp \sum_{i\alpha} c_{i1\sigma}^\dagger c_{i2\sigma} + H.c \right] + U \sum_i n_{i1\uparrow} n_{i1\downarrow}. \quad (4.42)$$

Con esta sustitución hecha, veamos el cálculo de la componente x de la corriente suponiendo que $\mathbf{A} = A_x \hat{x}$ con $(\alpha = 1, 2)$:

$$\begin{aligned} j_x &= -\frac{\delta H}{\delta A_x} \\ &= i\delta_x t \sum_{\langle ij \rangle \alpha\sigma} e^{iA_x \delta_x} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} - i\delta_x t \sum_{\langle ij \rangle \alpha\sigma} e^{-iA_x \delta_x} c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \\ &\approx i\delta_x t \sum_{\langle ij \rangle \alpha\sigma} (1 + iA_x \delta_x) c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} - i\delta_x t \sum_{\langle ij \rangle \alpha\sigma} (1 - iA_x \delta_x) c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma}, \end{aligned}$$

en donde en la segunda igualdad se utilizó que A_x es chico y se approximó la exponencial. Acomodando los términos se llega a

$$\begin{aligned} j_x &= i\delta_x t \left\{ \sum_{\langle ij \rangle \alpha\sigma} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} - c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \right\} - \delta_x^2 A_x t \left\{ \sum_{\langle ij \rangle \alpha\sigma} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} + c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} \right\} \\ &= i\delta_x t \left\{ \sum_{j\delta\alpha\sigma} c_{j-\delta\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} - c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{j-\delta\alpha\sigma} \right\} - \delta_x^2 A_x \left\{ \sum_{j\delta\alpha\sigma} c_{j-\delta\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} + c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{j-\delta\alpha\sigma} \right\}, \end{aligned} \quad (4.43)$$

en donde en la segunda igualdad se utilizó que $\mathbf{r}_i + \boldsymbol{\delta} = \mathbf{r}_j$. Pasando al espacio de momentos mediante las identidades

$$c_{j\alpha\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{j}} c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger, \quad \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{N} \sum_j e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{j}}, \quad (4.44)$$

y definiendo la relación de dispersión

$$\epsilon(\mathbf{k}) \equiv \sum_{\boldsymbol{\delta}} 2t \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}), \quad (4.45)$$

se llega a que la corriente está dada por:

$$j_x = \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \frac{\partial\epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x} c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha\sigma} + A_x \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \frac{\partial^2\epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x^2} c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}. \quad (4.46)$$

El primer término de la Ec. (4.46) corresponde al término paramagnético mientras que el segundo corresponde al diamagnético, de esta manera $j_x = j_x^p + j_x^d$. Con la expresión para la corriente, finalmente se puede calcular la función de correlación corriente-corriente retardada Π^R la cual se puede expresar en Matsubara mediante

$$\Pi_{xx}(\mathbf{q}, \tau) = -\frac{1}{V} \langle T_\tau j_x(\mathbf{q}, \tau) j_x(-\mathbf{q}, 0) \rangle, \quad (4.47)$$

en donde T_τ es el operador de ordenamiento temporal. Dado que estamos interesados en un campo eléctrico uniforme tomamos $\mathbf{q} \rightarrow 0$.

En nuestro caso, en el equilibrio, el potencial vector es nulo ($\mathbf{A}_0 = 0$), entonces para el cálculo de Π^R simplemente tenemos en cuenta el término paramagnético. Por lo tanto:

$$\Pi_{xx}(\tau) = \frac{1}{V} \left\langle \left(\sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \frac{\partial\epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x} c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}(\tau) \right) \left(\sum_{\mathbf{k}'\alpha'\sigma'} \frac{\partial\epsilon(\mathbf{k}')}{\partial k'_x} c_{\mathbf{k}'\alpha'\sigma'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}'\alpha'\sigma'}(0) \right) \right\rangle. \quad (4.48)$$

Para el caso de $\alpha = \alpha' = 1$ el término es:

$$\begin{aligned} & \left\langle T_\tau \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial\epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x} c_{\mathbf{k}1\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}1\sigma}(\tau) \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \frac{\partial\epsilon(\mathbf{k}')}{\partial k'_x} c_{\mathbf{k}'1\sigma'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}'1\sigma'}(0) \right\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \frac{\partial\epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x} \frac{\partial\epsilon(\mathbf{k}')}{\partial k'_x} \left\langle T_\tau c_{\mathbf{k}1\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}1\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}'1\sigma'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}'1\sigma'}(0) \right\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \frac{\partial\epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x} \frac{\partial\epsilon(\mathbf{k}')}{\partial k'_x} \left\langle T_\tau c_{\mathbf{k}'1\sigma'}(0) c_{\mathbf{k}1\sigma}^\dagger(\tau) \right\rangle \left\langle T_\tau c_{\mathbf{k}1\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}'1\sigma'}^\dagger(0) \right\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \frac{\partial\epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x} \frac{\partial\epsilon(\mathbf{k}')}{\partial k'_x} G_{11}(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', -\tau) G_{11}(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', \tau) \end{aligned} \quad (4.49)$$

en donde se definieron las funciones de Green del sistema

$$G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', \tau - \tau') = -\left\langle c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}'\alpha'\sigma'}^\dagger(\tau') \right\rangle. \quad (4.50)$$

Al estar trabajando en dimensión infinita, la auto-energía es independiente del momento \mathbf{k} . Por lo tanto, las funciones de Green solo dependen de \mathbf{k} a través de la función par $\epsilon_{\mathbf{k}}$ (ver Ec. (4.45)), cuya derivada es impar, por lo que el producto de una función par por una función impar en la sumatoria se obtiene una delta $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ [25]. Entonces el término finalmente queda:

$$\sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\frac{\partial\epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x} \right)^2 G_{11}(\mathbf{k}\sigma, -\tau) G_{11}(\mathbf{k}\sigma, \tau). \quad (4.51)$$

Realizando lo mismo con los otros términos de la Ec. (4.48) se llega a que

$$\Pi_{xx}(\tau) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\frac{\partial\epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x} \right)^2 \text{Tr}[\mathbb{G}(\mathbf{k}\sigma, -\tau) \mathbb{G}(\mathbf{k}\sigma, \tau)] \quad (4.52)$$

en donde se definió la matriz 2x2 de funciones de Green \mathbb{G} .

Con la finalidad de obtener la expresión en función de las frecuencias de Matsubara, transformamos mediante

$$\Pi(i\nu_m) = \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_m \tau} \Pi(\tau), \quad (4.53)$$

y utilizamos que las funciones de Green en Matsubara transforman según

$$\mathbb{G}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{iw_n} e^{-iw_n\tau} \mathbb{G}(iw_n), \quad (4.54)$$

con $w_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$ las frecuencias de Matsubara para fermiones y $0 \leq \tau < \beta$. Entonces (para simplificar la notación nos quedamos con un solo espín σ)

$$\begin{aligned} \Pi(i\nu_n) &= \frac{1}{V} \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n\tau} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta^2} \sum_{iw_n, il_s} \left(\frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x} \right)^2 \text{Tr}[\mathbb{G}(\mathbf{k}, iw_n) \mathbb{G}(\mathbf{k}, il_s) e^{iw_n\tau} e^{-il_s\tau}] \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta^2} \sum_{iw_n, il_s} \int_0^\beta d\tau \left(\frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x} \right)^2 \text{Tr}[\mathbb{G}(\mathbf{k}, iw_n) \mathbb{G}(\mathbf{k}, il_s)] e^{i(w_n + \nu_m - l_s)\tau} \\ &= \frac{1}{V\beta} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{iw_n} \left(\frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x} \right)^2 \text{Tr}[\mathbb{G}(\mathbf{k}, iw_n + i\nu_m) \mathbb{G}(\mathbf{k}, iw_n)]. \end{aligned} \quad (4.55)$$

Ahora queda por ver el término diamagnético de la conductividad, para eso utilizamos las Ecs. (4.39) y (4.46) y entonces análogamente al término paramagnético queda:

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \left\langle \sum_{\mathbf{k}\alpha} \frac{\partial^2 \epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x^2} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}\alpha}(0) \right\rangle \\ &= \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{iw_n} \frac{\partial^2 \epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x^2} \text{Tr}[\mathbb{G}(\mathbf{k}, iw_n)]. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Como la auto-energía no depende del momento, este término se puede integrar por partes reemplazando la sumatoria en \mathbf{k} por una integral, ya que, por ejemplo, para $\alpha = 2$ cuya función de Green está dada por la Ec. (3.38):

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_{22}(\mathbf{k}, iw_n)}{\partial k_x} &= \frac{\partial}{\partial k_x} \left(\frac{1}{iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{t_\perp^2}{iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma}} \right) \\ &= \left(\frac{1}{iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{t_\perp^2}{iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma}} \right)^2 \left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} + \frac{t_\perp^2}{(iw_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma)^2} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right) \\ &= (G_{22}^2 + G_{12}^2) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

en forma matricial esto implica $\partial_{k_x} \mathbb{G}(\mathbf{k}, iw_n) = \mathbb{G}(\mathbf{k}, iw_n) \partial_{k_x} \epsilon_{\mathbf{k}} \mathbb{1} \mathbb{G}(\mathbf{k}, iw_n)$, entonces

$$\langle n \rangle = -\frac{1}{V\beta} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{iw_n} \left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 \text{Tr}[\mathbb{G}^2(\mathbf{k}, iw_n)]. \quad (4.58)$$

Juntando todo y reemplazando en la Ec. (4.39) se llega finalmente a la expresión

$$\sigma^{xx}(i\nu_m) = \frac{q^2 T}{V \nu_m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{iw_n} \left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 \text{Tr} \left[\mathbb{G}(\mathbf{k}, iw_n + i\nu_m) \mathbb{G}(\mathbf{k}, iw_n) - \mathbb{G}^2(\mathbf{k}, iw_n) \right]. \quad (4.59)$$

4.5. Representación espectral

La función de Green se puede expresar en base a la función espectral $\mathbb{A}(\mathbf{k}, w)$ según

$$\mathbb{G}(\mathbf{k}, iw_n) = \int \frac{\mathbb{A}(\mathbf{k}, w)}{iw_n - w} dw. \quad (4.60)$$

Por lo tanto, la conductividad queda expresada como

$$\sigma^{xx}(i\nu_m) = \frac{q^2 T}{V \nu_m} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \sum_{iw_n} \int dw \int dw' \text{Tr} \left[\frac{\mathbb{A}(\mathbf{k}, w)}{iw_n + i\nu_m - w} \frac{\mathbb{A}(\mathbf{k}, w')}{iw_n - w'} - \frac{\mathbb{A}(\mathbf{k}, w)}{iw_n - w} \frac{\mathbb{A}(\mathbf{k}, w')}{iw_n - w'} \right], \quad (4.61)$$

en donde se definió $v_{\mathbf{k}} = \partial_{k_x} \epsilon_{\mathbf{k}}$ como la velocidad de grupo electrónica. Realizando las sumas de Matsubara utilizando que:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{iw_n} g_0(iw_n) = \sum_j \text{Res}_{z=z_j} [g_0(z)] f(z_j), \quad (4.62)$$

con $g_0(iw_n)$ una función que depende de iw_n y $f(z_j)$ la función de Fermi

$$f(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1}, \quad (4.63)$$

se llega a que

$$\sigma^{xx}(i\nu_m) = \frac{q^2}{V \nu_m} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \int dw \int dw' \text{Tr} \left[\mathbb{A}(\mathbf{k}, w) \mathbb{A}(\mathbf{k}, w') \right] \left\{ \frac{f(w) - f(w')}{w - w' + i\nu_m} - \frac{f(w) - f(w')}{w - w'} \right\}. \quad (4.64)$$

Notemos que de la definición de la función espectral $\mathbb{A}(\mathbf{k}, w)$

$$\mathbb{A}(\mathbf{k}, w) = \frac{\mathbb{G}^\dagger(\mathbf{k}, w) - \mathbb{G}(\mathbf{k}, w)}{2\pi i}, \quad (4.65)$$

se observa que $\mathbb{A}(\mathbf{k}, w)$ es hermítica. Dado que la traza del producto de dos matrices hermíticas es real se concluye entonces que

$$\text{Tr} [\mathbb{A}(\mathbf{k}, w) \mathbb{A}(\mathbf{k}, w')] \in \mathbb{R}.$$

Nos interesa expresar a la conductividad en función de las frecuencias reales, para eso es pertinente realizar la continuación analítica, lo que implica reemplazar $i\nu_m \rightarrow \nu + i\eta$, con η infinitesimal. Realizando este procedimiento la conductividad resulta

$$\begin{aligned} \sigma^{xx}(\nu + i\eta) &= \frac{q^2}{V(-i\nu + \eta)} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \int dw \int dw' \text{Tr} \left[\mathbb{A}(\mathbf{k}, w) \mathbb{A}(\mathbf{k}, w') \right] \left\{ \frac{f(w) - f(w')}{w - w' + \nu + i\eta} - \frac{f(w) - f(w')}{w - w'} \right\}, \\ &= \frac{q^2}{V} \frac{\eta + i\nu}{\nu^2 + \eta^2} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \int dw \int dw' \text{Tr} \left[\mathbb{A}(\mathbf{k}, w) \mathbb{A}(\mathbf{k}, w') \right] \\ &\quad \times \left\{ \frac{(f(w) - f(w'))(w - w' + \nu - i\eta)}{(w - w' + \nu)^2 + \eta^2} - \frac{f(w) - f(w')}{w - w'} \right\}. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Ahora tomamos el límite $\eta \rightarrow 0$ y nos quedamos con la parte real de la Ec. (4.66)

$$\begin{aligned} \text{Re}\{\sigma^{xx}(\nu + i0^+)\} &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{q^2}{V} \frac{1}{\nu} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \int dw \int dw' \text{Tr} \left[\mathbb{A}(\mathbf{k}, w) \mathbb{A}(\mathbf{k}, w') \right] \frac{(f(w) - f(w'))\eta}{(w - w' + \nu)^2 + \eta^2} \\ &= \frac{q^2 \pi}{V} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \int dw \text{Tr} \left[\mathbb{A}(\mathbf{k}, w) \mathbb{A}(\mathbf{k}, w + \nu) \right] \frac{f(w) - f(w + \nu)}{\nu}, \end{aligned} \quad (4.67)$$

en donde se utilizó la definición de la delta de Dirac (Ec. (2.21)). Hasta ahora no se especificaron los detalles de la red a utilizar, para incluirlos cambiamos la sumatoria en \mathbf{k} por una integral en energía con la densidad de la red de Bethe dada por la Ec. (3.17). Para la red hipercúbica en dimensión infinita, los vértices $v_{\mathbf{k}}$ son tomados como constantes en la integral en energía, de

manera que $v^2(\epsilon) = 1/2$ [26, 27]. Finalmente, la parte real de la conductividad óptica queda como:

$$\text{Re}\{\sigma^{xx}(\nu+i0^+)\} = \frac{q^2\pi}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} dw \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \text{Tr} \left[\mathbb{A}(\epsilon, w) \mathbb{A}(\epsilon, w+\nu) \right] \frac{f(w) - f(w+\nu)}{\nu}. \quad (4.68)$$

La conductividad DC se define como el límite en el cual $\nu \rightarrow 0$, por lo tanto tomando este límite

$$\sigma_{\text{DC}}^{xx} = \frac{q^2\pi}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} dw \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \text{Tr} \left[\mathbb{A}^2(\epsilon, w) \right] \left(-\frac{\partial f(w)}{\partial w} \right). \quad (4.69)$$

Si vemos la parte imaginaria de la Ec. (4.66):

$$\text{Im}\{\sigma^{xx}(\nu+i0^+)\} = \frac{q^2}{V\nu} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \int dw \int dw' \text{Tr} \left[\mathbb{A}(\mathbf{k}, w) \mathbb{A}(\mathbf{k}, w') \right] \left\{ \frac{f(w) - f(w')}{w - w' + \nu} - \frac{f(w) - f(w')}{w - w'} \right\}, \quad (4.70)$$

vemos que al tomar el límite de la conductividad DC $\nu \rightarrow 0$ la parte imaginaria se hace cero. Esto no ocurre en el caso de un superconductor (que es un diamagneto perfecto), en ese caso el término paramagnético se hace nulo en el límite de DC y solo permanece el término diamagnético, el cual en ese límite diverge.

Capítulo 5

Caracterización del modelo

En un primer lugar, se estudiaron las fases del modelo propuesto para distintos valores de los parámetros U , μ , β , etc. Se realizaron distintos diagramas de fases caracterizando las zonas en las que las soluciones se comportaban de manera aislante o metálica. También se estudiaron las densidades de estados y la influencia de las cuasipartículas.

5.1. Implementación de DMFT

Se utilizó el Hamiltoniano propuesto en la Ec. (3.28) con los valores de los parámetros $t = 1/2$ y $t_{\perp} = 0.3$ fijos. Para la resolución del problema de la impureza se utilizó el software Monte Carlo de Tiempo Continuo (CTQMC) [28, 29]. Este software brinda como archivo de salida la auto-energía de la impureza efectiva Σ_{imp} , a partir de esto se calculó la nueva función de Green local mediante la Ec. (3.33) pasando de la sumatoria en \mathbf{k} a una integral en energía:

$$G_{\text{loc}}^{(1)}(iw_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)}{iw_n + \mu - t_{\perp}^2 \Delta_{0,\epsilon}(iw_n) - \Sigma_{\text{imp}}(iw_n)}, \quad (5.1)$$

en donde $\rho(\epsilon)$ es la densidad de estados de la red de Bethe no interactuante dada por la Ec. (3.17) y

$$\Delta_{0,\epsilon}(iw_n) = \frac{1}{iw_n + \mu - \epsilon}. \quad (5.2)$$

Finalmente, se planteó la auto-consistencia brindando un nuevo Δ al software dado por

$$\Delta_{\text{ctqmc}} = iw_n + \mu - \Sigma_{\text{imp}} - \frac{1}{G_{\text{loc}}^{(1)}(iw_n)}. \quad (5.3)$$

Una vez convergido el problema de la impureza, mediante las Ecs. (3.37), (3.38) y (3.39) se obtuvieron las funciones de Green del problema original sustituyendo la sumatoria en \mathbf{k} por una integral en energía. Otra magnitud importante calculada fue el número de ocupación medio por sitio n_F , para esto se utilizó que, para la función de Green en tiempo imaginario τ dada por la Ec. (4.54) vale la relación [30]

$$G(0^+) + 1 = n_F. \quad (5.4)$$

Por lo tanto, utilizando las funciones de Green de la red 1 y la red 2 para calcular su número de ocupación medio $n_F^{(1)}$ y $n_F^{(2)}$ respectivamente, el número de ocupación medio total resulta ser

$$n_F^{(T)} = 2(n_F^{(1)} + n_F^{(2)}), \quad (5.5)$$

en donde el factor 2 se agregó por el espín.

Los resultados en tiempo y frecuencias reales son cruciales para conectar las simulaciones con los experimentos, para esto es de interés encontrar la función espectral $A(w)$ a través de

$$G(\tau) = - \int dw \frac{A(w)e^{-\tau w}}{1 + e^{-\beta w}}. \quad (5.6)$$

El problema con esto es el integrando $\frac{e^{-\tau w}}{1 + e^{-\beta w}}$, ya que produce que para τ finito y w grande $G(\tau)$ se vuelva insensible a las variaciones de $A(w)$ ya que es exponencialmente chico. Por lo tanto, infinitas funciones $A(w)$ muy distintas entre sí pueden dar origen a una misma $G(\tau)$. Dado este problema, a lo largo de esta tesis se utilizó para realizar la continuación analítica el Método de Máxima Entropía el cual se basa en un algoritmo que, de acuerdo a la lógica bayesiana, devuelve la función espectral mas probable [31]. A partir de esto, se obtuvo la continuación analítica de la auto-energía y mediante esta se calcularon las funciones de Green en frecuencia real. Finalmente, las densidades de estados luego de realizar la integral en energía simplemente son

$$A(w) = -\frac{1}{\pi} \Im G(w). \quad (5.7)$$

5.2. Transición metal-aislante

En primer lugar, se realizó un diagrama de fases para distintas temperaturas y distintos valores de repulsión Coulombiana U . En la Fig. 5.1 se presenta dicho diagrama con llenado mitad en la cadena correlacionada ($n_F^{(1)} = 1$). Se observa que a medida que aumenta el valor de la correlación se produce una transición metal-aislante, por lo tanto se observa la presencia de una transición de Mott. Para temperaturas mas bajas se observa una zona de coexistencia de las soluciones metálicas y aislantes, esta zona de coexistencia indica que la transición que se produce es de primer orden. Para temperaturas mas altas esta zona de coexistencia se desvanece.

En la Fig. 5.2 se observa la transición metal-aislante a partir de la parte imaginaria de la función de Green de la cadena correlacionada para el caso de $T = 0.01$. El valor de la parte imaginaria de la misma en el límite $w_n \rightarrow 0$ es proporcional al valor de la densidad espectral en la energía de Fermi, por lo tanto se observa que al volverse aislante, la parte imaginaria de la función de Green se va a cero.

Luego fue de interés estudiar la transición metal-aislante controlando el llenado total mediante el potencial químico μ . Por lo tanto se fijó la temperatura en $\beta = 50$ y se realizó un diagrama de fases (Ver Fig. (5.3)). Se observa que para U chicos se produce solo una transición metal-aislante a medida que aumenta el potencial químico, mientras que para U mas grandes se observan dos transiciones metal-aislante y una aislante-metal.

Esto está vinculado con la existencia de un plateau en un gráfico del número de ocupación total $n_F^{(T)}$ en función del potencial químico μ .

En la Fig. 5.4 se muestran las distintas curvas para distintos valores de U . Dicho plateau comienza a ocurrir a partir de cierto valor de U y se sitúa en $n_F^{(T)} = 3$, a medida que U se incrementa también lo hace el plateau, coincidiendo con lo observado en la Fig. 5.3 en donde, una vez aparecida las transiciones metal-aislante y aislante-metal, a medida que U aumenta, la fase aislante se hace mas grande. En este caso en donde el número de ocupación medio total es 3, se ubican dos electrones en la cadena no correlacionada, volviéndola aislante, y el restante se ubica en la cadena correlacionada.

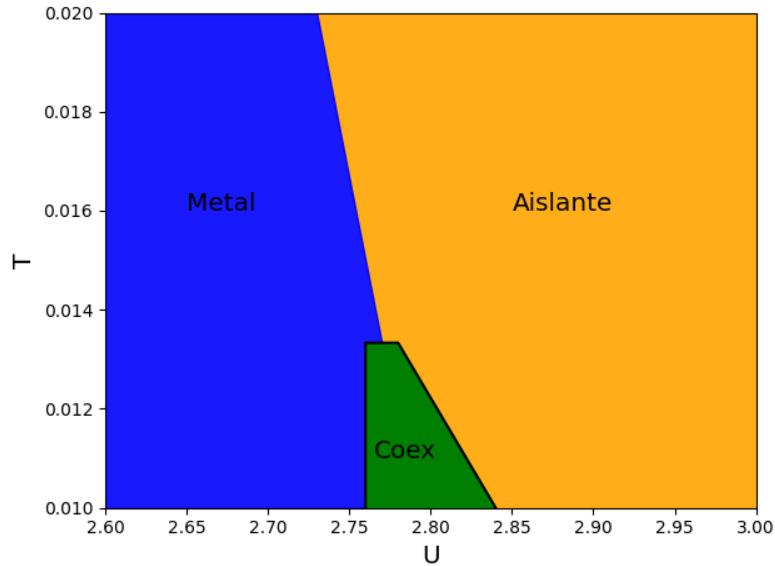


Figura 5.1: Diagrama de fases con repulsión Coulombiana en el eje x y temperatura en el eje y para el caso de llenado mitad en la cadena correlacionada. La zona de color azul indica que la solución de la misma se comporta de manera metálica, mientras que la naranja implica que se comporta de manera aislante. La zona verde indica coexistencia de ambas soluciones.

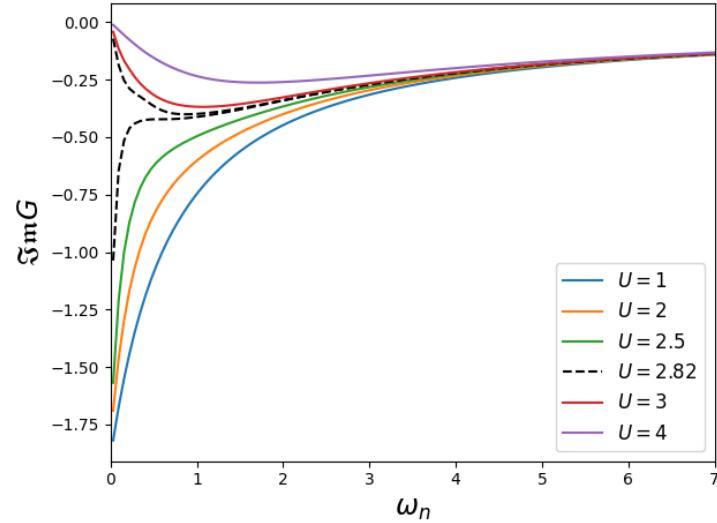


Figura 5.2: Parte imaginaria de la función de Green de la cadena correlacionada en función de las frecuencias de Matsubara ω_n para el caso de llenado mitad de dicha banda $n_F^{(1)} = 1$ y $T = 0.01$. Las curvas de distintos colores representan los distintos valores de U , las curvas con lineas punteadas de color negro muestran la coexistencia en donde el sistema presenta tanto soluciones de tipo metálica como aislante.

A pesar de solo tener un electrón por sitio, debido al valor de U la cadena correlacionada se vuelve aislante, hasta que luego de incrementado el potencial químico logra superar esa fase, produciéndose una transición aislante-metálico. La fase metálica se mantiene hasta que ambas bandas se encuentran llenas, lo que ocurre cuando $n_F^{(T)} = 4$, en donde ocurre otra transición

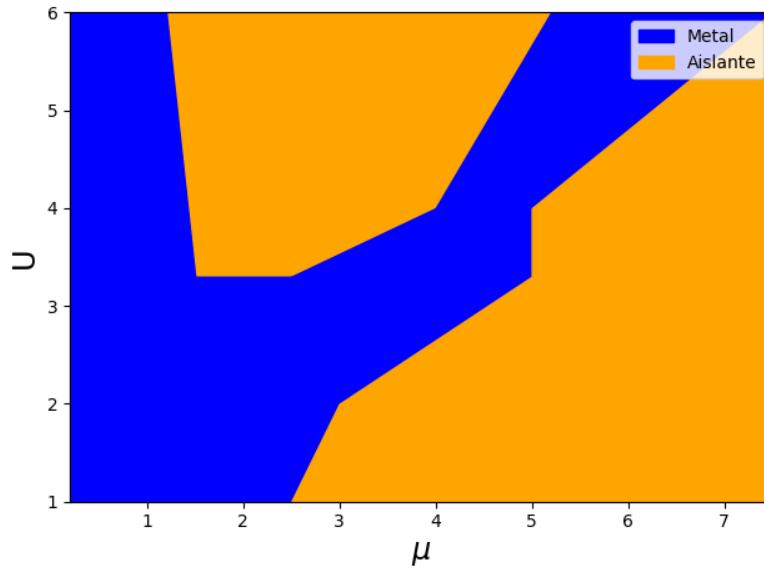


Figura 5.3: Diagrama de fases con el potencial químico μ en el eje x y el parámetro de repulsión Coulombiana U en el eje y para la cadena correlacionada con $\beta = 50$. La zona azul indica soluciones de tipo metálicas mientras que las naranjas soluciones de tipo aislante.

metal-aislante. Sin embargo, ambos aislantes son muy distintos, uno corresponde a un aislante de banda el cual no conduce debido a que posee todos los sitios ocupados (ambas bandas se encuentran llenas), mientras que el otro aislante corresponde a un aislante de Mott.

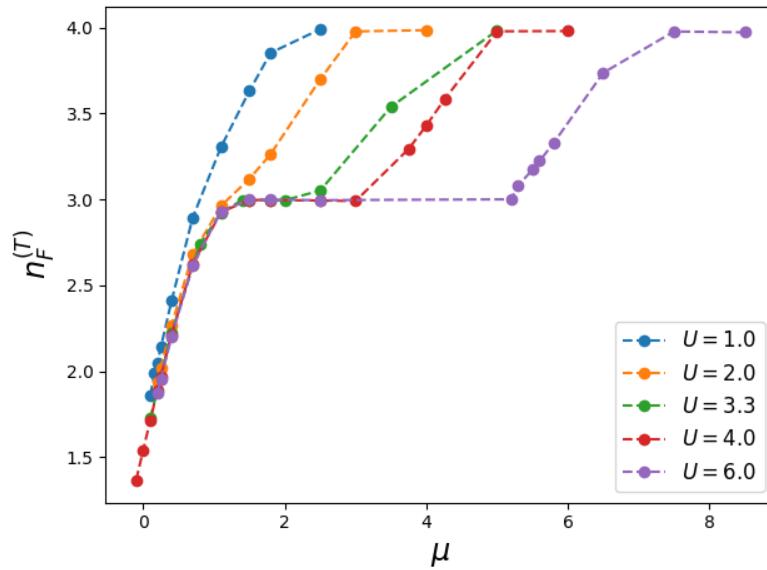


Figura 5.4: Número de ocupación total en función del potencial químico para distintos valores de U con $\beta = 50$. Se observa que a partir de $U = 3.3$ comienza a aparecer un plateau en $n_F^{(T)} = 3$ el cual crece a medida que lo hace U .

Dado que las simulaciones se realizaron para distintas temperaturas, una de las características importantes del modelo era estudiar si el número de ocupación dependía de la temperatura en las

zonas previas al plateau en $n_F^{(T)} = 3$. En la Fig. 5.5 se muestran distintos gráficos del número de ocupación medio total en función de U , para distintos valores del potencial químico y distintas temperaturas.

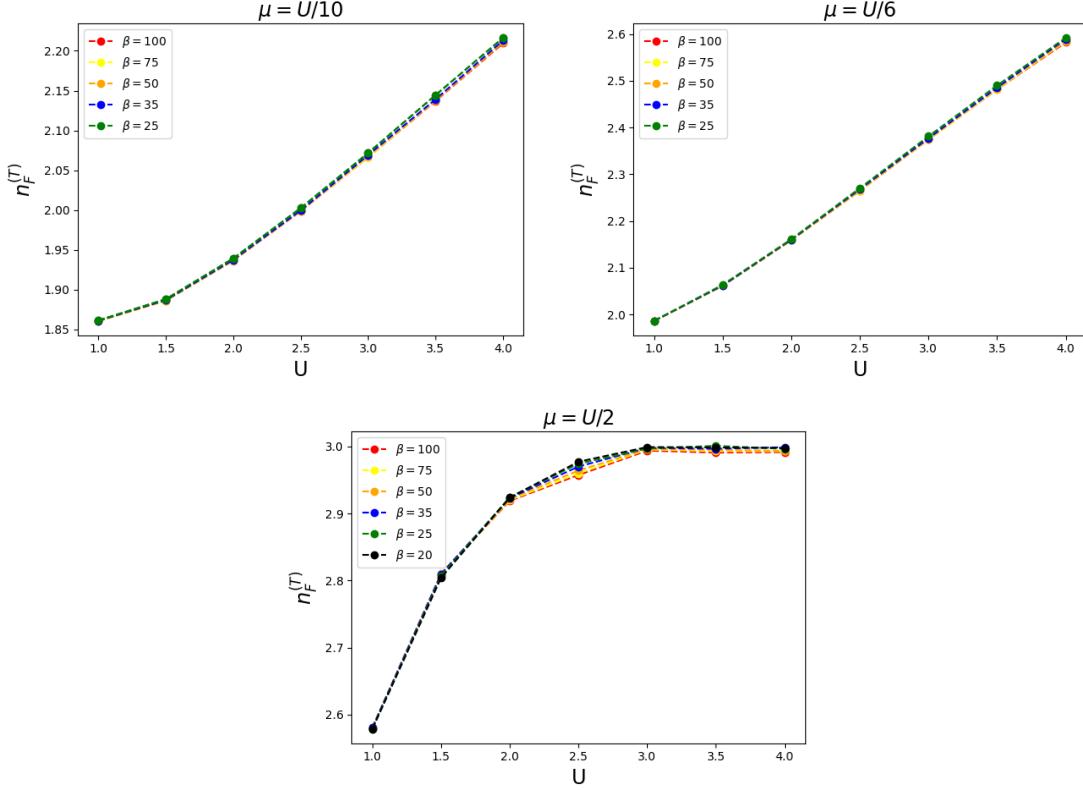


Figura 5.5: Gráficos del número de ocupación total ($n_F^{(T)}$) en función de U para distintas dependencias de μ . Las curvas de distintos colores corresponden a distintas temperaturas.

Se observó que, en el rango de $\beta = 100$ hasta $\beta = 20$, para $n_F^{(T)} < 3$ el número de ocupación total no depende significativamente de la temperatura elegida. Tanto en la Fig. 5.4 como en la Fig. 5.5 se observa que en todos los casos, $n_F^{(T)} = 2$ es metálico, ya que no se observa un plateau, por lo tanto ambas bandas son conductoras.

En este último caso, para todas las temperaturas, la cadena no correlacionada posee mayor número de ocupación medio ($n_F^{(2)} > 1$) que la cadena correlacionada ($n_F^{(1)} < 1$) (Ver Fig. 5.6).

Complementariamente, se realizó el mismo barrido en μ de la Fig. 5.4 pero ahora para distintas temperaturas con $U = 3.3$. En la Fig. 5.7 se puede observar que, efectivamente, el número de ocupación para un mismo U no depende de la temperatura elegida. Para aligerar la notación de ahora en adelante, en dicha figura se definen tres zonas:

$$(I) : 2 \leq n_F^{(T)} < 3; \quad (II) : n_F^{(T)} = 3; \quad (III) : 3 < n_F^{(T)} < 4.$$

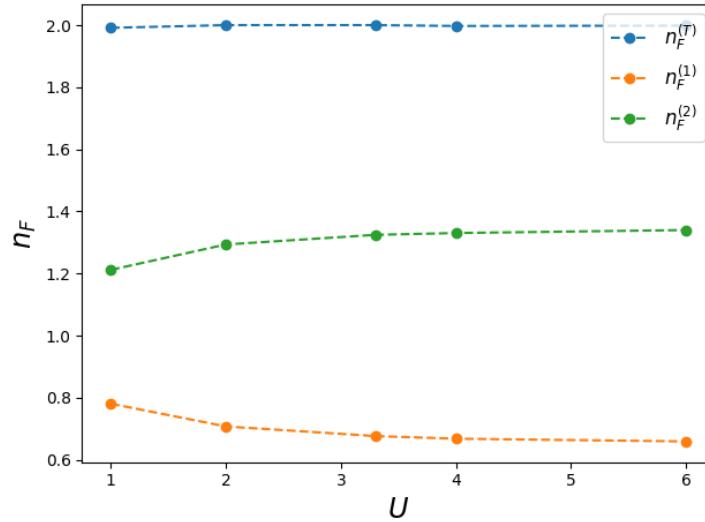


Figura 5.6: Números de ocupación en función de U para $\beta = 50$. La curva de color celeste corresponde al número de ocupación total, el cual se mantiene constante en $n_F^{(T)} = 2$, mientras que la curva verde muestra el número de ocupación de la red no correlacionada y la curva de color naranja el número de la red correlacionada.

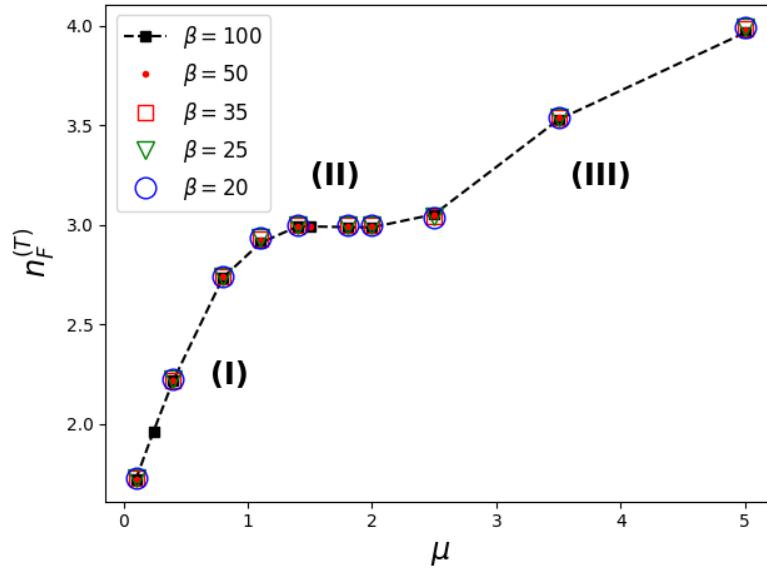


Figura 5.7: Número de ocupación total en función del potencial químico para $U = 3.3$ y distintas temperaturas. Se definen tres zonas en el gráfico con la finalidad de simplificar la notación al realizar el análisis.

5.3. Comparación con el límite atómico

El modelo propuesto en la Ec. (3.28) se puede resolver analíticamente si se considera el caso de dos sitios aislados, es decir sin término de hopping entre sitios de la misma red ($t = 0$) también conocido como límite atómico. Por lo tanto, se realizó esto para poder comparar la solución de este límite con la solución de DMFT del modelo completo.

Se realizó un barrido en μ para el caso de $U = 4.0$, $\beta = 50$ y se calculó el número de ocupación total. También se realizó el mismo barrido para el caso del modelo libre, que corresponde a mantener el término de hopping en ambas cadenas pero ahora sin interacción en ninguna de ellas, es decir, elegir como valor de los parámetros $t = 1/2$ y $U = 0$ en el Hamiltoniano de la Ec. (3.28). En la Fig. 5.8 se muestra la comparación.

En el modelo libre, solo está presente la energía cinética, por lo tanto el sistema se comporta siempre de manera metálica, lo que se refleja en la ausencia de plateaus, con excepción del caso en el que ambos sitios se encuentran completamente ocupados o completamente vacíos.

Por el contrario, en el límite atómico solo se encuentra presente la energía potencial, lo que produce distintos tipos de plateaus y el sistema se comporta de manera aislante.

En el modelo completo, ambas contribuciones se encuentran en competencia. En nuestro caso, el valor de la interacción U es tal que se sostiene el plateau en $n_F^{(T)} = 3$, aunque este es mas reducido que en el límite atómico debido al hopping.

El caso de $n_F^{(T)} = 2$ es distinto ya que el plateau que se observa en el límite atómico no se presenta en el modelo completo para ningún valor de U (ver Fig. 5.4), sino que el sistema siempre se comporta de manera metálica. Esto indica que la ausencia del plateau no está relacionada al valor de U , sino que está relacionada con el llenado de las cadenas. En la Fig. 5.6 se observa que al fijar $n_F^{(T)} = 2$, los electrones evitan completar el llenado mitad en la cadena correlacionada, y por esto mismo es que la solución es metálica.

El aislante en $n_F^{(T)} = 2$ puede obtenerse, por otro lado, modificando las energías de sitio del sistema, como se muestra en el Apéndice C, en donde también se estudia mas en profundidad el límite atómico.

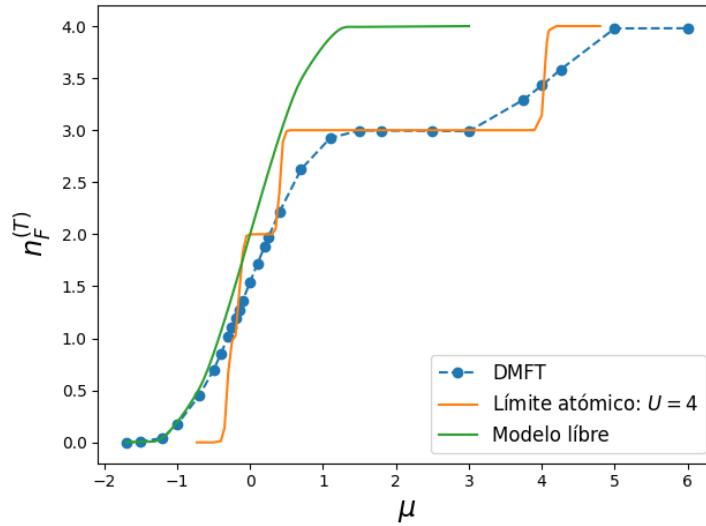


Figura 5.8: Número de ocupación total en función del potencial químico μ para el caso $\beta = 50$. La curva naranja corresponde a la solución analítica para el caso sin hopping $t = 0$ y $U = 4$, la curva azul muestra los datos obtenidos mediante DMFT para el modelo completo y la verde corresponde al caso del modelo libre ($U = 0$, $t = 0.5$).

5.4. Densidades de estados

Una vez obtenidas las funciones de Green se calcularon las densidades de estados a partir de la Ec. (5.7). En primer lugar se calcularon para llenado mitad ($n_F^{(T)} = 2$) y $\beta = 50$, para distintos valores de U . En la Fig. 5.9 se observa que para $U = 1.0$ no se observan bandas de Hubbard, pero a medida que este crece, comienza a formarse una banda de Hubbard que se aleja del pico de cuasipartícula. Al igual que la conclusión extraída a partir de la Fig. 5.4, se observa que para todos los valores de U el sistema se comporta de manera metálica, con el transporte dominado por cuasipartículas.

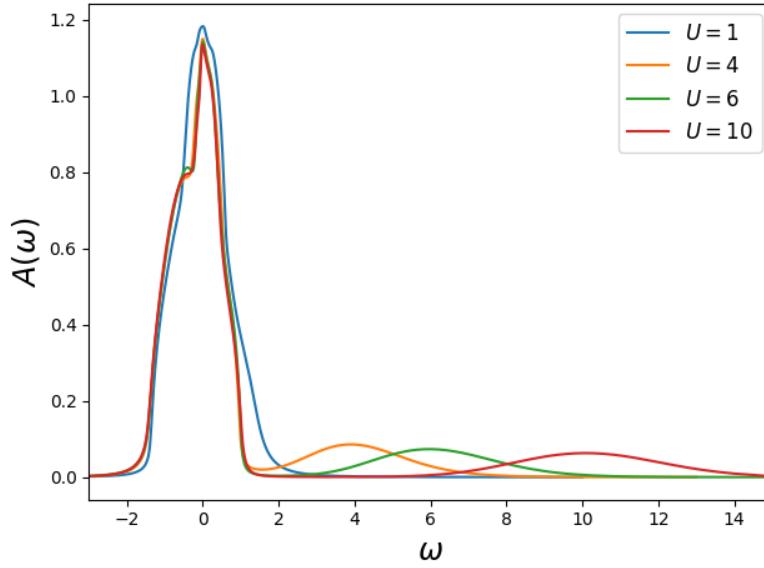


Figura 5.9: Densidades de estados totales para el caso de $\beta = 50$ y llenado total mitad ($n_F^{(T)} = 2$), para distintos valores de U .

En la Fig. 5.10 se pueden ver las densidades de estados con los mismos parámetros pero ahora se muestra el comportamiento de la cadena correlacionada y de la no correlacionada por separado. Se observa que en la cadena no correlacionada se mantiene casi constante la función espectral, mientras que en el caso de la correlacionada se forma el pico de cuasipartícula y se genera la banda de Hubbard.

Se realizaron las mismas simulaciones para distintas temperaturas ($\beta = 100, 35, 25, 20$) y los resultados fueron similares. Debido a esto, se procedió a elegir $\beta = 50$ y se estudiaron las densidades de estados en el régimen de $n_F^{(T)} = 2$ hasta $n_F^{(T)} = 3$ para $U = 4.0$. En la Fig. 5.11 se muestran las densidades de estados para la cadena no correlacionada y para la correlacionada.

Se observa que a medida que se incrementa el número medio de ocupación total, la cadena no correlacionada desplaza su densidad de estados de la energía de Fermi ($\omega = 0$) hacia la izquierda y se forma una pequeña banda que es la responsable de la conducción en $n_F^{(T)} = 2.96$, para finalmente una vez llegado a $n_F^{(T)} = 3$ no presentar estados disponibles en la energía de Fermi. Por otro lado, en la cadena correlacionada se va produciendo un fuerte reordenamiento del peso espectral, con un traspaso de peso del pico a las bandas, hasta que finalmente se vuelve aislante en $n_F^{(T)} = 3$.

Una vez alcanzada la fase aislante con $n_F^{(T)} = 3$ (descrita por el plateau en la Fig. 5.4), se

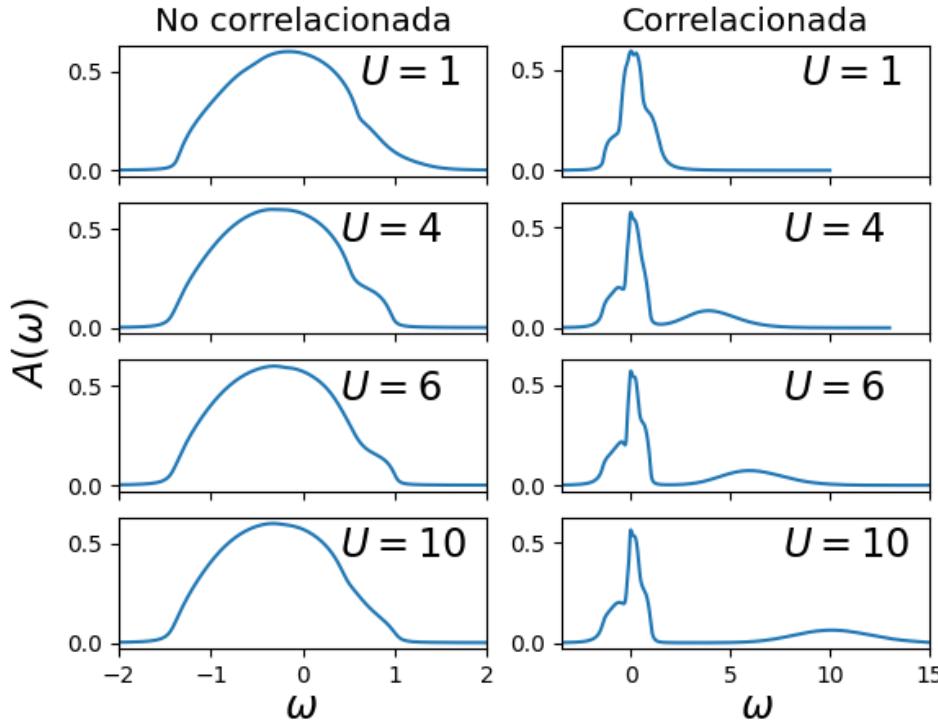


Figura 5.10: Densidades de estados para llenado mitad total ($n_F^{(T)} = 2$) y $\beta = 50$ para distintos valores de U . La columna de la izquierda corresponde a la cadena no correlacionada mientras que la columna de la derecha corresponde a la cadena correlacionada.

procedió a estudiar si la densidad de estados se mantenía constante o si cambiaba su comportamiento a lo largo de la zona **(II)**.

En la Fig. 5.12 se muestran las densidades de estado total para valores de μ crecientes, se observa que el pico ubicado al comienzo del gap desaparece, luego la función espectral se desplaza hacia la izquierda y al final comienza a formarse un pico en la banda de la derecha, la cual al tratarse del final del plateau esta muy cercana a la energía de Fermi.

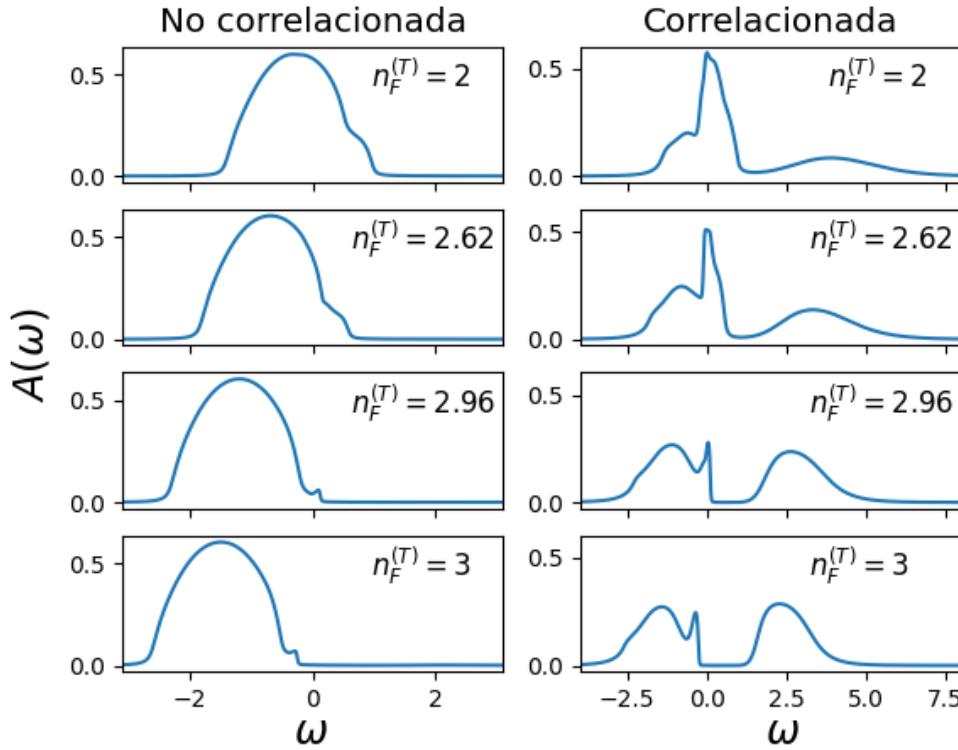


Figura 5.11: Densidades de estados para la cadena no correlacionada (izquierda) y para la cadena correlacionada (derecha) para distintos valores del número de ocupación medio total, con los parámetros $\beta = 50$ y $U = 4.0$.

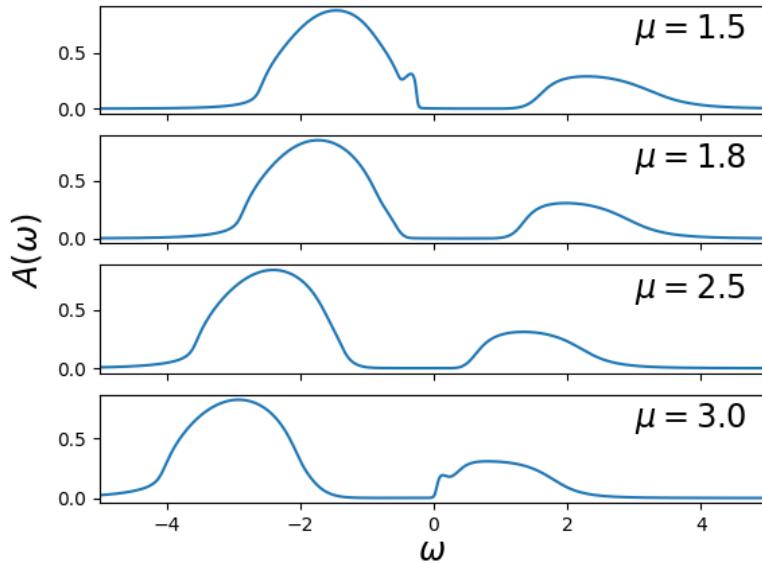


Figura 5.12: Densidad de estados total para el caso de $\beta = 50$, $U = 4.0$ y $n_F^{(T)} = 3$. Se muestra la evolución de la función espectral para valores de μ crecientes.

5.5. Peso de las cuasipartículas

Una característica importante del modelo, que se ve a lo largo del análisis de las densidades de estados, es la presencia de picos asociados a las cuasipartículas, dando a entender que el transporte esta gobernado por ellas. Con la finalidad de obtener una medida de la influencia de estas en la dinámica del modelo para los distintos parámetros, se calculó el parámetro Z dado por la Ec. (2.13). En la Fig. 5.13 se muestra el gráfico de Z en función del parámetro U para distintas temperaturas. Se observa en todos los casos que el peso de las cuasipartículas disminuye a medida que aumenta U , pero nunca se hace nulo.

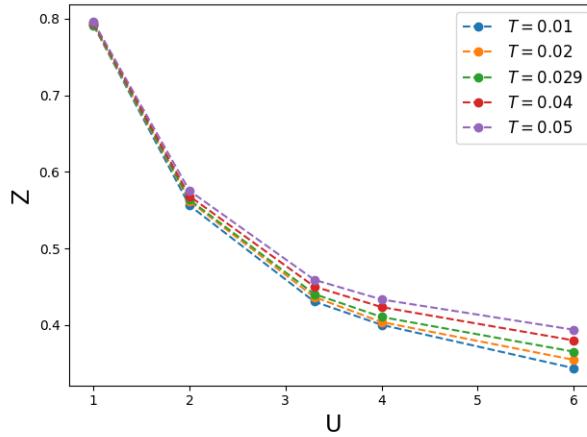


Figura 5.13: Peso de las cuasipartículas en función de U para distintas temperaturas y llenado mitad total ($n_F^{(T)} = 2$).

A medida que aumenta la temperatura, este peso se hace cada vez mas grande para U grandes. Esto se corresponde con lo observado en la Fig. 5.9 para el caso de $\beta = 50$, en donde se observa la disminución del ancho del pico de cuasipartícula a medida que aumenta U .

Por otro lado, fue de interés estudiar como se modificaba el peso de la cuasipartícula a lo largo de la zona (I) (ver Fig. 5.14).

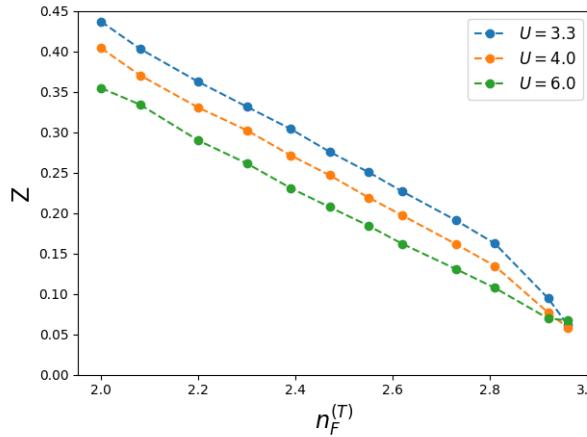


Figura 5.14: Peso de las cuasipartículas en función del número de ocupación medio total para distintos valores de U y $\beta = 50$. La curva celeste corresponde a $U = 3.3$ mientras que la naranja corresponde a $U = 4.0$ y la verde a $U = 6.0$.

En dicha figura se observa que, dado que el sistema va desde una fase metálica hacia una aislante, el peso de la cuasipartícula va disminuyendo a medida que aumenta el número de ocupación, coincidiendo con la disminución del pico de cuasipartícula visto en la cadena correlacionada en la Fig. 5.11. Esto ocurre para los distintos valores de U con el parámetro de $\beta = 50$, coincidiendo el mínimo valor de Z con el inicio del plateau en la Fig. 5.4.

Por último, al igual que lo realizado durante el estudio de la densidad de estados (ver Fig. 5.12), se estudió que ocurría con el peso de las cuasipartículas a lo largo del plateau en $n_F^{(T)} = 3$. Para ello se seleccionaron los mismos parámetros que en el caso de las densidades de estados. En la Fig. 5.15 se muestran los resultados obtenidos, se observa que a medida que aumenta el potencial químico, en un principio el peso de la cuasipartícula llega a cero, para luego volver a comenzar a subir, coincidiendo con la aparición de un nuevo pico para $\mu = 3$ en la Fig. 5.12.

El cero del peso de cuasipartícula se corresponde con el cero de la función de Green (ver Ec. (2.19)). Esto implica que la auto-energía diverge, como se observa en la Fig. 5.16. Así como los polos de la función de Green determinan la superficie de Fermi en el metal, en el aislante es posible definir la superficie de Luttinger con los ceros de la misma [32].

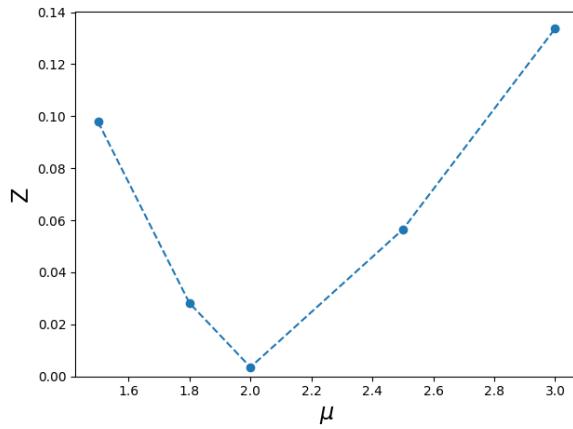


Figura 5.15: Peso de las cuasipartículas en función del potencial químico μ para $\beta = 50$, $U = 4.0$ y número de ocupación total $n_F^{(T)} = 3$.

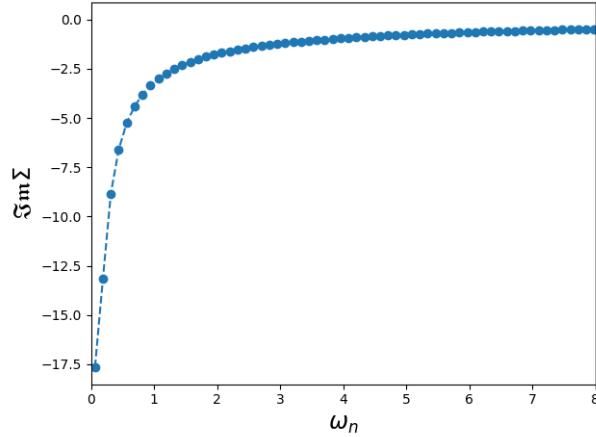


Figura 5.16: Parte imaginaria de la auto-energía para el caso en que $U = 4.0$, $\beta = 50$, $\mu = 2$. Este caso es el correspondiente al cero del peso de cuasipartícula Z .

Capítulo 6

Estudio de la conductividad óptica

6.1. Conductividad en la zona (I)

Una vez obtenidas mediante DMFT las auto-energías del problema de la impureza, y continuadas analíticamente mediante el Método de Máxima Entropía, se pudo proceder a calcular tanto la conductividad óptica total como la DC mediante las Ecs. (4.68) y (4.69) respectivamente. Finalmente, la resistividad DC es simplemente

$$\rho_{\text{DC}} = \frac{1}{\sigma_{\text{DC}}}.$$

En primer lugar, se estudió como se modifica la conductividad en función del número de ocupación total, a lo largo de la zona (I) definida en la Fig. 5.7. En la Fig. 6.1 se muestra la conductividad óptica para el caso en el que $\beta = 50$ y $U = 4.0$. Se observa que a medida que aumenta el número de ocupación, la interbanda se vuelve más pronunciada, y finalmente para $n_F^{(T)} = 3$, el pico de Drude tiende a cero, por lo que el sistema se vuelve aislante.

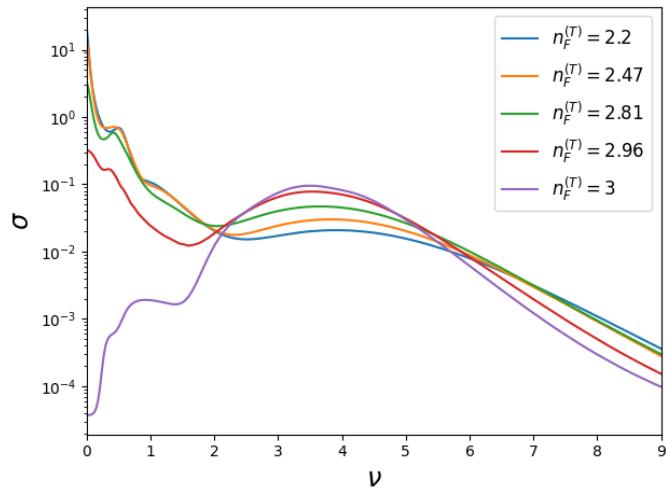


Figura 6.1: Conductividad óptica con los parámetros $U = 4.0$ y $\beta = 50$ para distintos números de ocupación total.

Luego, se analizó el caso de llenado total mitad $n_F^{(T)} = 2$ para distintas temperaturas. En la Fig. 6.2 se muestran por un lado, las conductividades ópticas para las diferentes temperaturas y distintos valores de U . Por el otro, se muestran las resistividades DC en función de la temperatura.

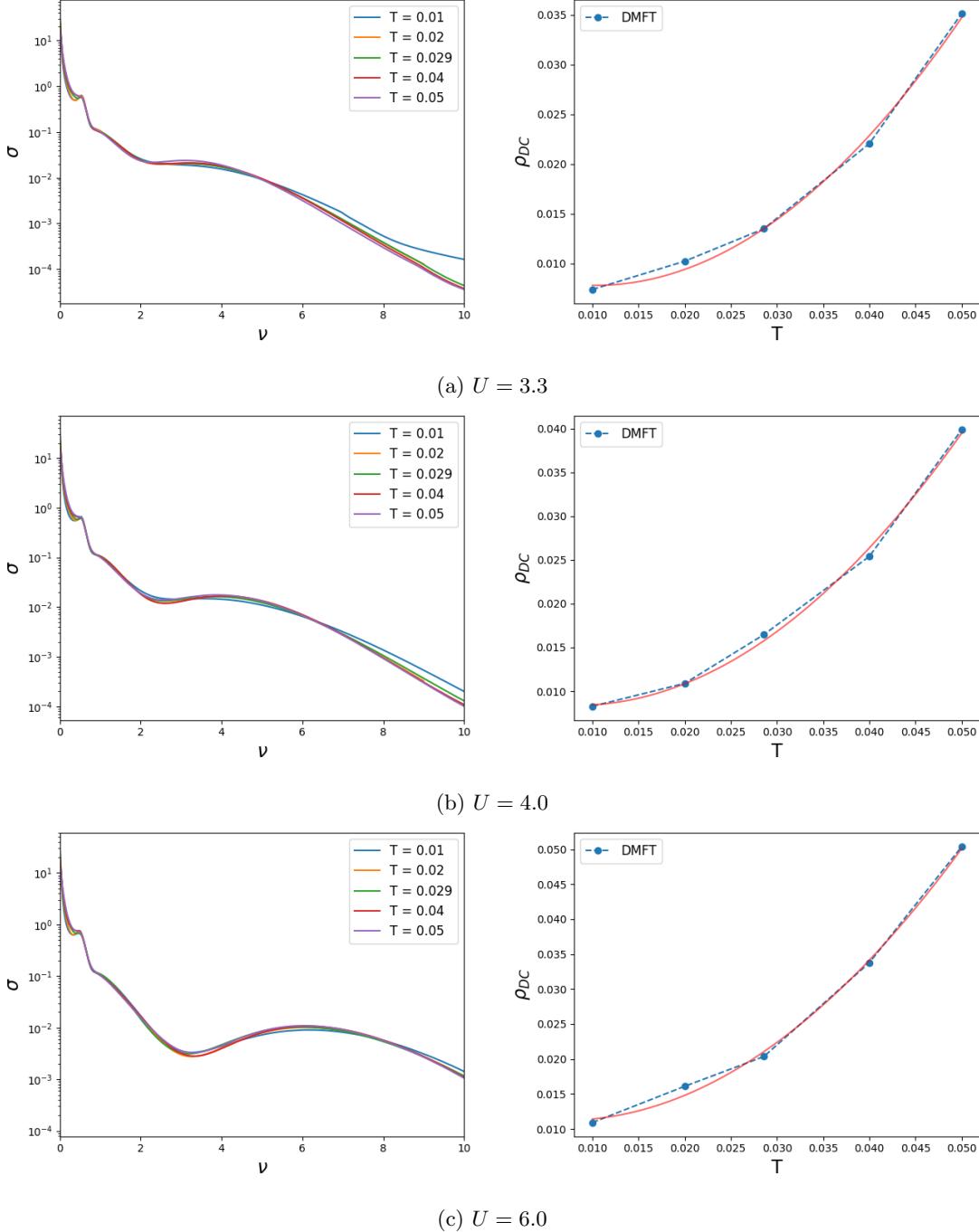


Figura 6.2: En la columna de la izquierda se muestran las conductividades ópticas para distintos valores de U y distintas temperaturas. En la columna de la derecha se muestran las resistividades DC en función de la temperatura, también se muestra la dependencia cuadrática (curva de color rojo). Todos los cálculos corresponden a llenado total mitad ($n_F^{(T)} = 2$).

En las conductividades se puede apreciar la presencia de dos interbandas, una mas cercana al pico de Drude, y la segunda centrada en frecuencias mas grandes. También se observa que a medida que se aumenta el valor de U , el pico de la segunda interbanda, que da los saltos de la banda de conducción a la de valencia, al aumentar U se corre y se hace mas definido. Por otro lado, las resistividades DC en función de la temperatura presentan un comportamiento cuadrático, lo que implica que se trata de un Líquido de Fermi (Ec. (2.9)). Este análisis coincide con lo dicho en la sección previa, en donde siempre para $n_F^{(T)} = 2$ se observó que el sistema era conductor y que el transporte estaba mediado por cuasipartículas.

6.2. Conductividad en la zona (III)

Por ultimo, se decidió estudiar la zona cercana a la transición aislante-metal dada una vez que se supera el plateau en $n_F^{(T)} = 3$. Para ello, se estudiaron los estados con $n_F^{(T)} = 3.1, 3.2, 3.3$, a estos estados se les calculó la conductividad óptica y la resistividad DC en función de la temperatura. En las Figs. 6.3 y 6.4 se muestran estos resultados para $U = 3.3$ y $U = 6.0$ respectivamente. Para el caso de $U = 3.3$ se observa que en $n_F^{(T)} = 3.1$ y 3.2 la resistividad no es cuadrática, sino que es compatible con una lineal dentro del error numérico. Esto indicaría que el sistema no se comporta como un líquido de Fermi, puesto que pierde una característica fundamental de estos que es la dependencia cuadrática con la temperatura de la resistividad DC. Además se observa en la conductividad, al igual que para el caso de llenado total mitad, la presencia de un pico de Drude y de dos interbandas. Por otro lado, para $n_F^{(T)} = 3.3$ ya se recupera la dependencia cuadrática en la resistividad. En el caso de $U = 6.0$, se observan conclusiones similares, en donde para los primeros dos niveles de ocupación se observa una resistividad DC que no tiene dependencia cuadrática con la temperatura, sino que es lineal, mientras que para $n_F^{(T)} = 3.3$ se presenta una dependencia cuadrática, indicando que el sistema es un Líquido de Fermi.

De las conductividades obtenidas en la Fig. 6.4 se eligió el caso de $\beta = 50$ y se realizaron los ajustes basados en la parte real de la Ec. (4.12). En la Fig. 6.5 se observan los resultados. Dado que las conductividades presentaban un comportamiento similar, se escogió la de $n_F^{(T)} = 3.3$. También se muestran las densidades de estados. Dado que la temperatura es chica, la función de Fermi se comporta aproximadamente como una función escalón, lo que quiere decir que los estados ocupados corresponden a los estados por debajo de la energía de Fermi ($w = 0$) y los disponibles por encima. La primer interbanda (curva de color rojo) consiste en los saltos de los electrones presentes en los niveles ocupados cercanos a la energía de Fermi a los desocupados ubicados alrededor de $w = 1$ (flecha roja en las densidades de estados). Estos electrones se encuentran en la cadena correlacionada y al estar cercanos a la energía de Fermi esto hace que este salto sea mas probable que cualquier otro, y por esto es que esta interbanda es la que presenta mayores valores de conductividad.

La segunda interbanda (curva de color verde) representa los saltos de los electrones en los estados ocupados alrededor de $w = -5$ a los cercanos a $w = 1$ (flecha verde en las densidades de estados). Dado que la distancia entre ambas densidades espectrales es de $w = 6$, el pico de la segunda interbanda se ubica justamente alrededor de este número. Estos electrones pertenecen a la cadena no correlacionada, que se encuentra completamente llena. Este proceso tiene menos probabilidades de ocurrir que los saltos de la primer interbanda y por ello es que esta interbanda posee valores de conductividad menores a los de la primer interbanda.

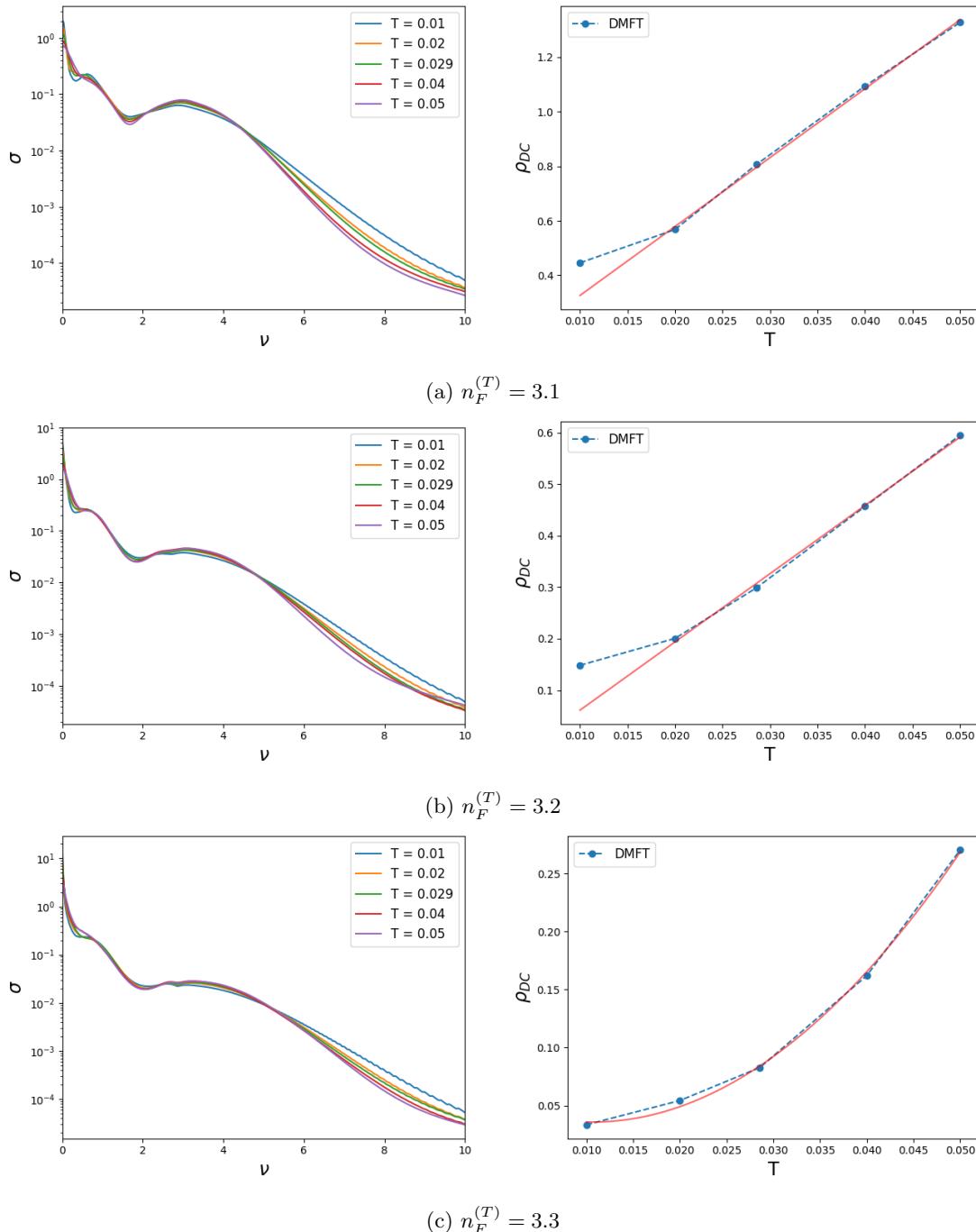


Figura 6.3: En la columna de la izquierda se muestran las conductividades ópticas para distintos valores del número de ocupación total y distintas temperaturas. En la columna de la derecha se muestran las resistividades DC en función de la temperatura y la curva roja corresponde a la dependencia cuadrática o lineal observada. Todos los cálculos corresponden a $U = 3.3$.

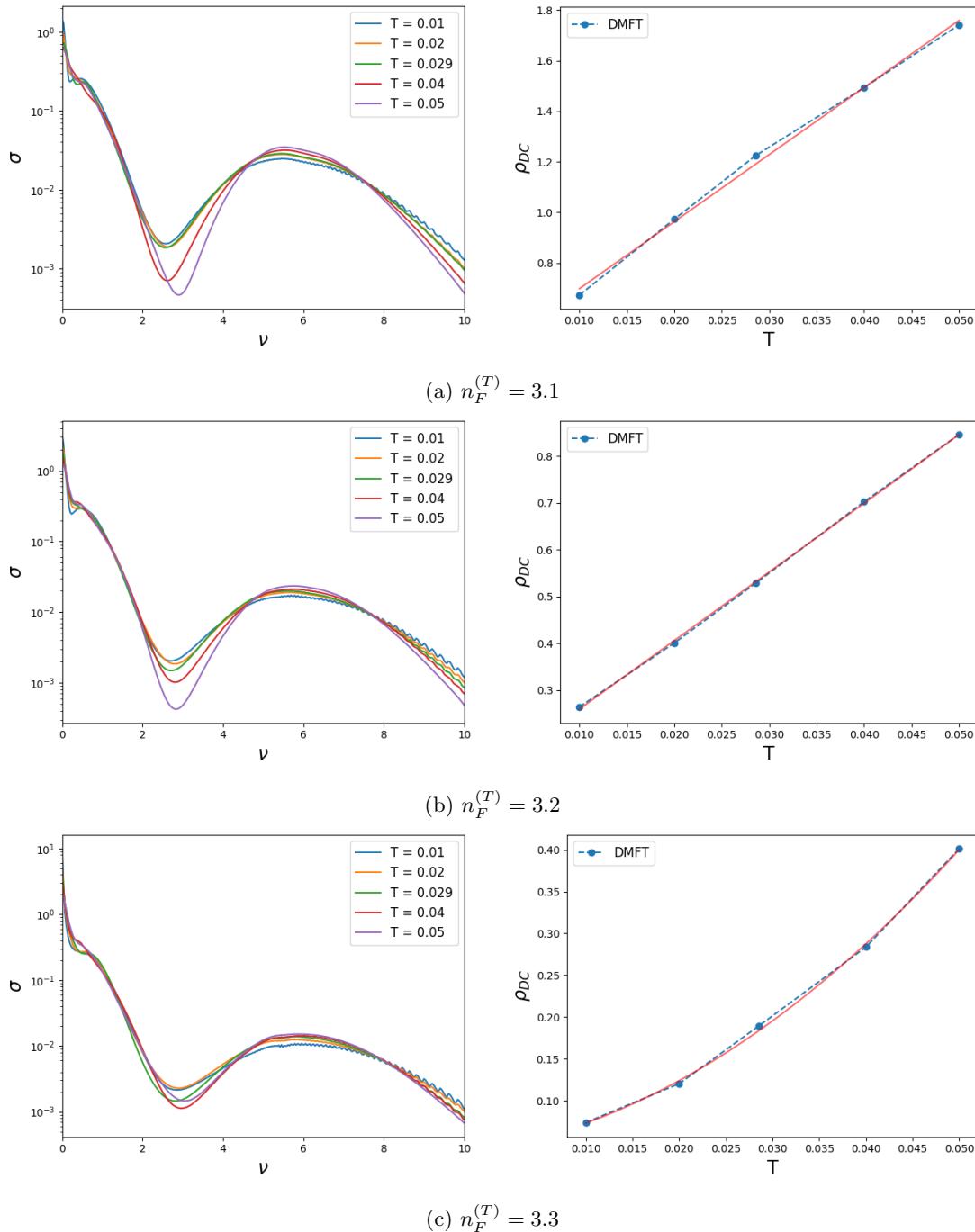


Figura 6.4: En la columna de la izquierda se muestran las conductividades ópticas para distintos valores del número de ocupación total y distintas temperaturas. En la columna de la derecha se muestran las resistividades DC en función de la temperatura y la curva roja es la dependencia lineal o cuadrática observada. Todos los cálculos corresponden a $U = 6.0$.

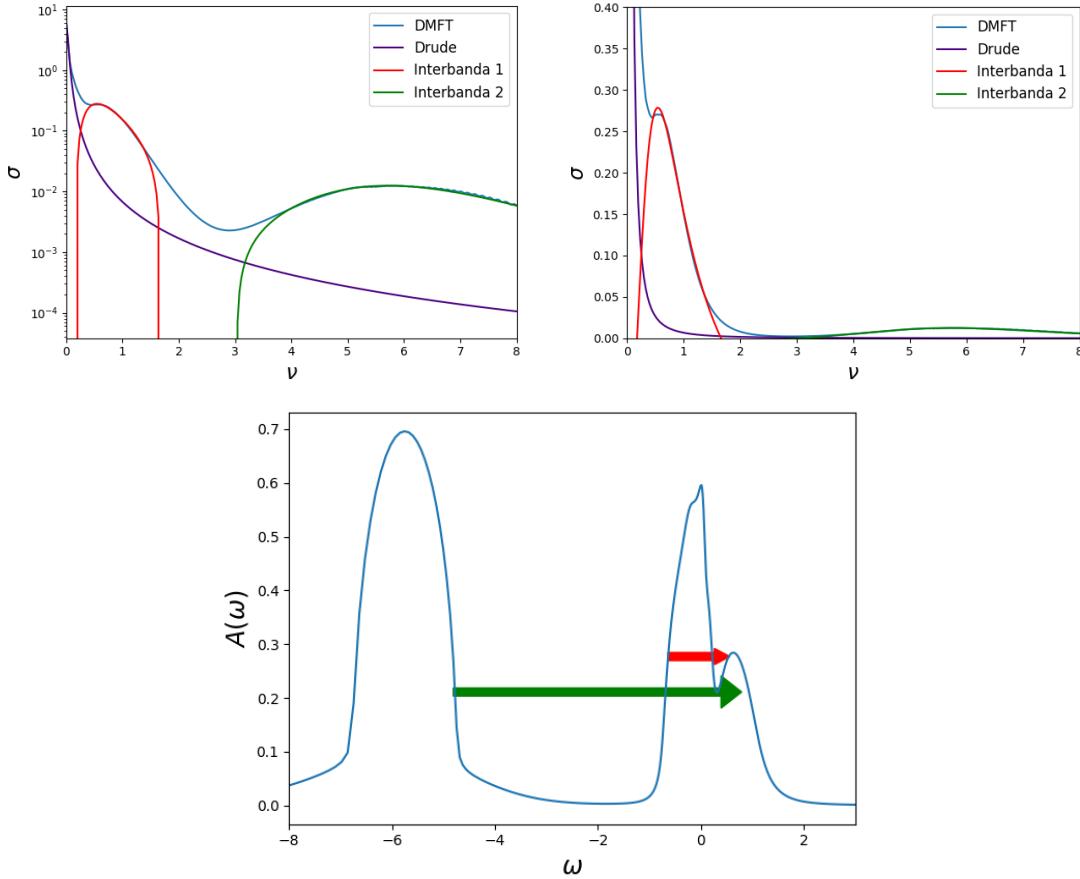


Figura 6.5: En la parte superior se muestran las conductividades, a la izquierda en escala logarítmica y a la derecha en escala lineal con sus respectivos ajustes, mientras que en la parte inferior se presentan la densidad de estados con flechas (de igual color que el ajuste de la interbanda correspondiente) indicando los saltos de los electrones de los estados ocupados a los desocupados. Estos gráficos corresponden a valores de los parámetros de $n_F^{(T)} = 3.3$, $\beta = 50$ y $U = 6.0$.

Capítulo 7

Conclusiones

A lo largo de esta tesis se estudiaron las soluciones de un modelo básico de electrones fuertemente correlacionados, que corresponde a una modificación del modelo de Hubbard del dímero, en donde ahora solo hay correlación en una sola de las cadenas. Estas soluciones fueron obtenidas mediante la Teoría Dinámica de Cámpo Medio (DMFT por sus siglas en inglés), utilizando el software Monte Carlo de Tiempo Continuo (CTQMC) y utilizando para la continuación analítica el Método de Máxima Entropía. Gracias a que este modelo posee solo una cadena con interacción, se pudieron integrar los grados de libertad de la cadena sin interacción, lo que facilitó las simulaciones numéricas.

En primer lugar se buscó caracterizar el modelo, por lo tanto se realizó un diagrama de fases para el caso de llenado mitad de la cadena correlacionada. En este caso se encontró una transición de Mott de primer orden. Luego se procedió a realizar otro diagrama en función del potencial químico, en donde se encontró el rango de valores de U a partir de los cuales se producía dicha transición. Las soluciones del modelo que son aislantes de Mott están asociadas a un plateau en el número de ocupación medio total $n_F^{(T)} = 3$ en un gráfico de $n_F^{(T)}$ en función de μ . Se observó que a medida que se aumentaba el valor de U , el plateau se volvía más extenso. El barrido en μ fue realizado para distintas temperaturas y se mostró que el número de ocupación no cambia significativamente con la temperatura.

Independientemente del valor de U , se concluyó que el estado de $n_F^{(T)} = 2$ es siempre metálico, debido a que el llenado en ese número de ocupación no se produce simétricamente en ambas cadenas, sino que los electrones evitan completar el llenado mitad en la cadena correlacionada.

Luego se procedió a realizar la comparación del modelo completo con el caso del límite atómico, el cual consiste en dos sitios aislados ($t = 0$) y también se comparó con el caso libre ($U = 0$). Este último tiene únicamente energía cinética, por lo tanto su solución es siempre metálica, mientras que el límite atómico tiene solo potencial, lo que genera plateaus en el gráfico del número de ocupación total indicando soluciones aislantes. De la comparación se concluyó que ambas contribuciones están en competencia y con el valor de U elegido, se mantuvo el plateau en $n_F^{(T)} = 3$, aunque más reducido debido al hopping. Sin embargo, el plateau que se observó en el límite atómico para $n_F^{(T)} = 2$ no se produjo en el modelo completo, debido a lo explicado previamente sobre el llenado de las cadenas.

Una vez analizada la comparación con los casos límite, se pasó al estudio de las densidades de estados. Para el caso de llenado mitad total se encontró un pico definido de cuasipartícula junto con una banda de Hubbard que se desplaza en frecuencia a medida que se aumenta el valor de U . Para este mismo caso la densidad de estados en la cadena no correlacionada se mantuvo invariante frente al aumento de U mientras que la de la correlacionada fue la que presentó la banda de Hubbard junto con el pico de cuasipartícula. Luego se estudiaron las densidades de estados a medida que se aumentaba el número de ocupación total desde $n_F^{(T)} = 2$ hasta $n_F^{(T)} = 3$, se concluyó que para la cadena no correlacionada la densidad de estados no se modificaba significativamente, mas allá de un desplazamiento de la energía de Fermi al llegar a $n_F^{(T)} = 3$, mientras que en la cadena correlacionada se producía un fuerte reordenamiento del peso espectral, con un traspaso del peso del pico a las bandas, seguido del desplazamiento de la energía de Fermi, volviendo al sistema un aislante. Por último, se estudió la evolución de las densidades de estados totales a lo largo del plateau en $n_F^{(T)} = 3$ en donde se observó la desaparición de uno de los picos, seguida de una traslación hacia la energía de Fermi.

También fue de interés el estudio del peso de las cuasipartículas, caracterizado por el parámetro Z . Se analizó el caso de llenado mitad total para distintas temperaturas, en donde se obtuvo una disminución de Z a medida que se aumentaba U para todas las temperaturas, pero sin que el peso llegue a cero. Seguido de esto se observó como se modificaba Z , para distintos valores de U , en función del número de ocupación. Se obtuvo que a medida que este último aumentaba, Z disminuía, coincidiendo con el resultado de la disminución del pico de cuasipartícula en la densidad de estados analizada previamente.

Una vez concluida la caracterización del modelo, se procedió al estudio de sus propiedades de transporte, en particular al estudio de la conductividad óptica. Se brindó el desarrollo formal para obtener una expresión de la conductividad en función de funciones microscópicas del sistema como lo es la función de Green. En primer lugar se estudió como evolucionaba la conductividad en la zona de $n_F^{(T)} = 2$ a $n_F^{(T)} = 3$. Los resultados fueron que se presentaban dos interbandas, una muy cercana al pico de Drude y una mas alejada y se observó la desaparición de dicho pico para $n_F^{(T)} = 3$. Luego se prestó atención al caso de llenado mitad total, y se calculó la conductividad para distintas temperaturas y distintos valores de U . A partir de esto, se realizaron gráficos de resistividad DC en función de la temperatura. Se concluyó que para todos los valores de U el sistema es un Líquido de Fermi debido a la dependencia cuadrática de la resistividad DC.

Este último procedimiento se realizó para los números de ocupación total $n_F^{(T)} = 3.1, 3.2, 3.3$ y $U = 3.3, 6.0$. Se encontró que para ambos valores de U las soluciones del modelo con los primeros dos números de ocupación sugieren que se trata de una zona NFL (Non Fermi Liquid) debido a su dependencia lineal de la resistividad con la temperatura. Mientras que para el caso de $n_F^{(T)} = 3.3$ se recupera la dependencia cuadrática propia del Líquido de Fermi. Por último se realizaron ajustes del pico de Drude y de las interbandas para uno de los casos y se explicó mediante la densidad de estados cuales son las transiciones que corresponden a cada interbanda observada.

Como perspectivas de trabajo futuro, se puede proseguir el estudio del modelo presentado

agregando energías de sitio, con la finalidad de lograr el llenado simétrico de ambas cadenas para el caso de llenado mitad total. Otra ventaja de este modelo es que se pueden comparar los resultados con los grados de libertad integrados y los obtenidos mediante una aproximación usual al lidiar con este tipo de Hamiltonianos, la cual consiste en descartar los términos extra-diagonales de la función de Green.

Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer a mi director Alberto, por su paciencia y dedicación a lo largo de esta tesis. Gracias a su ayuda pude aprender un montón sobre esta rama de la física, además de transmitirme la pasión que siente por su trabajo.

Quiero agradecerle a mis amigos, tanto a los de toda la vida como a los que fui haciendo durante la carrera, cuyo apoyo y acompañamiento fue invaluable durante el transcurso de la misma.

A mi familia en su conjunto, con especial mención a mi madre y padre, ya que gracias a ellos pude cursar mis estudios y llegar hasta acá. A mi abuela Marta y mi abuelo Ruben, por estar siempre pendientes en las fechas importantes brindando su apoyo.

Finalmente, un agradecimiento especial a mi abuelo Luis, por inculcarme desde chico esa pasión por el conocimiento que sentía, la curiosidad por el mundo que nos rodea y el espíritu científico de investigar en búsqueda de respuestas, cualidades que estuvieron siempre presentes a lo largo de mi trayectoria universitaria.

Apéndice A

Grados de libertad integrados

A.1. Integral de camino y modelo

En el caso de los fermiones, la función de partición está dada por:

$$Z = \int D[c^\dagger, c] e^{-S}, \quad (\text{A.1})$$

en donde

$$D[c^\dagger, c] = \prod_{\tau_l, \lambda} dc_\lambda^\dagger(\tau_l) dc_\lambda(\tau_l), \quad (\text{A.2})$$

con c^\dagger y c variables de Grassman. La acción es

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i, \alpha, \sigma} c_{i\alpha\sigma}^\dagger (\partial_\tau - \mu) c_{i\alpha\sigma} + H[c^\dagger, c] \right], \quad (\text{A.3})$$

en donde i corresponde al sitio, $\alpha = \{1, 2\}$ al orbital y σ a la proyección de espín.

En nuestro caso vamos a estar utilizando el Hamiltoniano del dímero con solo repulsión Coulombiana en el orbital 1.

$$H[c^\dagger, c] = \left[-t \sum_{\langle ij \rangle \alpha\sigma} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} + t_\perp \sum_{i\alpha} c_{i1\sigma}^\dagger c_{i2\sigma} + H.c \right] + U \sum_i n_{i1\uparrow} n_{i1\downarrow},$$

en donde n corresponde al operador número y $\langle ij \rangle$ indica primeros vecinos.

Nos va a interesar integrar por un lado todo lo relacionado a $c_{i2\sigma}$ ya que no posee términos de interacción. Vamos a partir el hamiltoniano en $H \equiv H_1 + H_2$ en donde

$$H_1 = \left[-t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i1\sigma}^\dagger c_{j1\sigma} + H.c \right] + U \sum_i n_{i1\uparrow} n_{i1\downarrow}, \quad (\text{A.4})$$

$$H_2 = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i2\sigma}^\dagger c_{j2\sigma} + t_\perp \sum_{i\sigma} c_{i1\sigma}^\dagger c_{i2\sigma} + H.c. \quad (\text{A.5})$$

Haciendo esta distinción y definiendo

$$S_1 \equiv \int_0^\beta d\tau \sum_{i\sigma} c_{i1\sigma}^\dagger (\partial_\tau - \mu) c_{i1\sigma} + H_1, \quad (\text{A.6})$$

$$S_2 \equiv \int_0^\beta d\tau \sum_{i\sigma} c_{i2\sigma}^\dagger (\partial_\tau - \mu) c_{i2\sigma} + H_2, \quad (\text{A.7})$$

se logra que la Ec. (A.1) quede de la forma:

$$Z = \int D_1[c^\dagger, c] e^{-S_1} \int D_2[c^\dagger, c] e^{-S_2}. \quad (\text{A.8})$$

El término de la derecha de la Ec. (A.8) es el que se puede resolver analíticamente, puesto que todos los términos en el exponente son cuadráticos. Estamos interesados en escribir a S_2 como una multiplicación entre matrices y vectores para poder utilizar la formula

$$\int d^2\mathbf{z} \exp(-\mathbf{z}^\dagger G^{-1}\mathbf{z} + \mathbf{z}_a^\dagger \mathbf{z} + \mathbf{z}^\dagger \mathbf{z}_b) = \det |G^{-1}| \exp(\mathbf{z}_a^\dagger G \mathbf{z}_b), \quad (\text{A.9})$$

en donde los \mathbf{z} son vectores de Grassman.

S_2 se puede escribir de la siguiente forma $S_2 = S_{2\uparrow} + S_{2\downarrow}$ con

$$S_{2\sigma} = \eta_{2\sigma}^\dagger G^{-1} \eta_{2\sigma} + t_\perp \eta_{1\sigma}^\dagger \eta_{2\sigma} + t_\perp \eta_{2\sigma}^\dagger \eta_{1\sigma}, \quad (\text{A.10})$$

en donde

$$\eta_{2\sigma} = \begin{bmatrix} c_{12\sigma} \\ c_{22\sigma} \\ \vdots \\ c_{N2\sigma} \end{bmatrix} \quad \eta_{1\sigma} = \begin{bmatrix} c_{11\sigma} \\ c_{21\sigma} \\ \vdots \\ c_{N1\sigma} \end{bmatrix} \quad (\text{A.11})$$

y la matriz tridiagonal de $N \times N$

$$G^{-1} = \begin{bmatrix} (\partial_\tau - \mu) & -t & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -t & (\partial_\tau - \mu) & -t & 0 & \dots & \vdots \\ 0 & -t & (\partial_\tau - \mu) & -t & \dots & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & & -t \\ 0 & \dots & \dots & -t & (\partial_\tau - \mu). \end{bmatrix} \quad (\text{A.12})$$

Por lo tanto utilizando la Ec. (A.9) para resolver la integral:

$$\int D_2[c^\dagger, c] e^{-S_2} = (\det |G^{-1}|)^2 \exp\left(t_\perp^2 [\eta_{1\uparrow}^\dagger G \eta_{1\uparrow} + \eta_{1\downarrow}^\dagger G \eta_{1\downarrow}]\right). \quad (\text{A.13})$$

En donde se observa que finalmente no depende del orbital 2 sino que solo depende del orbital 1.

A.2. La nueva acción

Si reemplazamos lo obtenido en la Ec. (A.13) en la Ec. (A.8) y definimos $N \equiv (\det |G^{-1}|)^2$ entonces queda (notación $\tilde{G} \equiv G$):

$$Z = N \int D_1[c^\dagger, c] \exp\left(-S_1 + \int_0^\beta d\tau t_\perp^2 \sum_\sigma \eta_{1\sigma}^\dagger \tilde{G} \eta_{1\sigma}\right) \equiv N \int D_1[c^\dagger, c] e^{-S_3}. \quad (\text{A.14})$$

Veamos como queda S_3 :

$$\begin{aligned} S_3 = & \int_0^\beta d\tau \sum_{i\sigma} c_{i1\sigma}^\dagger (\partial_\tau - \mu) c_{i1\sigma} - t \left(\sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i1\sigma}^\dagger c_{j1\sigma} + c_{j1\sigma}^\dagger c_{i1\sigma} \right) + U \sum_i n_{i1\uparrow} n_{i1\downarrow} \\ & - t_\perp^2 \sum_{ij\sigma} c_{i1\sigma}^\dagger \tilde{G}_{ij} c_{j1\sigma}, \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

utilizando que $\tilde{G}_{ij} = \tilde{G}_{ji}$ nos queda:

$$S_3 = \int_0^\beta d\tau \sum_{i\sigma} c_{i1\sigma}^\dagger (\partial_\tau - \mu) c_{i1\sigma} - \frac{t}{2} \left(\sum_{i, ppv(i)\sigma} c_{i1\sigma}^\dagger c_{j1\sigma} + c_{j1\sigma}^\dagger c_{i1\sigma} \right) + U \sum_i n_{i1\uparrow} n_{i1\downarrow} - \frac{t_\perp^2}{2} \sum_{ij\sigma} \tilde{G}_{ij} (c_{i1\sigma}^\dagger c_{j1\sigma} + c_{j1\sigma}^\dagger c_{i1\sigma}). \quad (\text{A.16})$$

En donde $ppv(i)$ hace referencia a los primeros vecinos de i . Por lo tanto, si definimos

$$t_{ij} \equiv \frac{1}{2} (t_{\delta j, ppv(i)} + t_\perp^2 \tilde{G}_{ij}), \quad (\text{A.17})$$

nos queda, juntando los términos diagonales con μ por un lado, y por el otro redefiniendo el término de hopping:

$$S_3 = \int_0^\beta d\tau \sum_{i\sigma} c_{i1\sigma}^\dagger (\partial_\tau - \mu - t_\perp^2 \tilde{G}_{ii}) c_{i1\sigma} - \sum_{ij\sigma} (t_{ij} c_{i1\sigma}^\dagger c_{j1\sigma} + H.c) + U \sum_i n_{i1\uparrow} n_{i1\downarrow} \quad (\text{A.18})$$

que es la acción del modelo de Hubbard. Con lo cual vemos que los grados de libertad integrados del orbital 2 influyen en que hay un nuevo término de hopping que depende de su función de Green y también hay un nuevo potencial químico efectivo μ_{ii} definido por:

$$\mu_{ii} \equiv \mu + t_\perp^2 \tilde{G}_{ii}.$$

A.3. Comparación con cambio de base

Al tratar con Hamiltonianos de la forma del modelo propuesto en la Ec. (3.28) se suele realizar un cambio de base de los operadores dado por:

$$c_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_1 + c_2); \quad c_B = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_1 - c_2), \quad (\text{A.19})$$

conocidos como los orbitales «bonding» y «anti-bonding».

Con este cambio de base el Hamiltoniano queda:

$$H[c^\dagger, c] = \left[-t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha\sigma} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} + H.c \right] + t_\perp \sum_{i\sigma} n_{iA\sigma} - n_{iB\sigma} + \frac{U}{4} \sum_i (c_{iA\uparrow}^\dagger + c_{iB\uparrow}^\dagger) (c_{iA\uparrow} + c_{iB\uparrow}) (c_{iA\downarrow}^\dagger + c_{iB\downarrow}^\dagger) (c_{iA\downarrow} + c_{iB\downarrow}), \quad (\text{A.20})$$

en donde ahora $\alpha = A, B$ y $n_{i\alpha\sigma} = c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma}$. Por lo tanto, la ventaja de esta base es que diagonaliza los términos cinéticos, con la desventaja de que la parte con interacción se vuelve mas compleja.

En Hamiltonianos en donde no se pueden integrar grados de libertad (como, por ejemplo, el modelo de Hubbard del dímero [33], que consiste en considerar interacción en ambas cadenas), una aproximación usual es forzar a que la matriz con las funciones de Green, \mathbf{G} , sea diagonal, no teniendo en cuenta los términos extra-diagonales [34, 35, 36]. En casos como el del dímero con igual valor de interacción U en ambas cadenas, esto se vuelve exacto ya que los términos extra-diagonales de la función de Green se anulan.

Sin embargo, en el modelo propuesto en esta tesis, aun realizando el cambio de base, los términos extra-diagonales de la función de Green no se anulan, para ver esto se resolvió el

sistema con el Hamiltoniano dado por la Ec. (A.20) para el límite atómico, que implica $t = 0$. Se resolvió el sistema para los valores de los parámetros $\mu = 0$, $U = 4.0$, $t_{\perp} = 0.3$, $\beta = 50$. En la Fig. A.1 se muestra el resultado de la función de Green extra-diagonal, en donde se observa que no se anula.

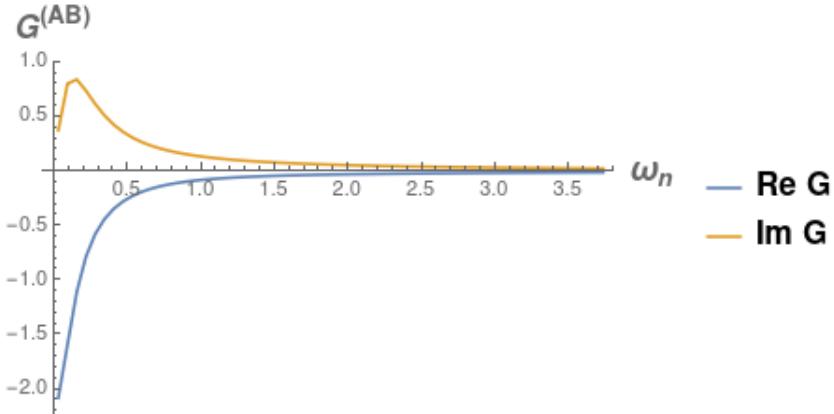


Figura A.1: Función de Green extra-diagonal para el caso de límite atómico ($t = 0$) y valores de los parámetros: $\mu = 0$, $U = 4.0$, $t_{\perp} = 0.3$, $\beta = 50$.

Por lo tanto, esto nos permite realizar una comparación entre los resultados con los grados de libertad integrados y la aproximación de no tener en cuenta los términos extra-diagonales, con la finalidad de observar que tan determinante es el rol de estos últimos a la hora de caracterizar este modelo.

En primer lugar, se realizó un barrido en μ y se calcularon los números de ocupación medios totales con $t = 1/2$, $t_{\perp} = 0.3$, $U = 3.3$ y $\beta = 100$. En la Fig. A.2 se observa que el comportamiento es similar, presentando una fase metálica en $n_F^{(T)} = 2$ al no presentarse un plateau, y en ambos casos se produce el plateau en $n_F^{(T)} = 3$.

Una vez realizado el barrido en μ , se procedió a calcular la resistividad DC en función de la temperatura para el caso de llenado mitad total ($n_F^{(T)} = 2$) y $U = 3.3$.

En la Fig. A.3 se observa la comparación de ambos casos, en donde ahora resultan en un comportamiento de la resistividad significativamente diferente. Esto se debe a que al realizar el cálculo de la conductividad, dada por la Ec. (4.69) hay un término que es proporcional a $\text{Tr}[A_{12}^2]$, por lo tanto, en el cálculo del transporte, los términos extra-diagonales se vuelven relevantes y no pueden ignorarse. Notemos también que el cálculo de la conductividad no depende de la base elegida puesto que la traza es invariante frente al cambio de base.

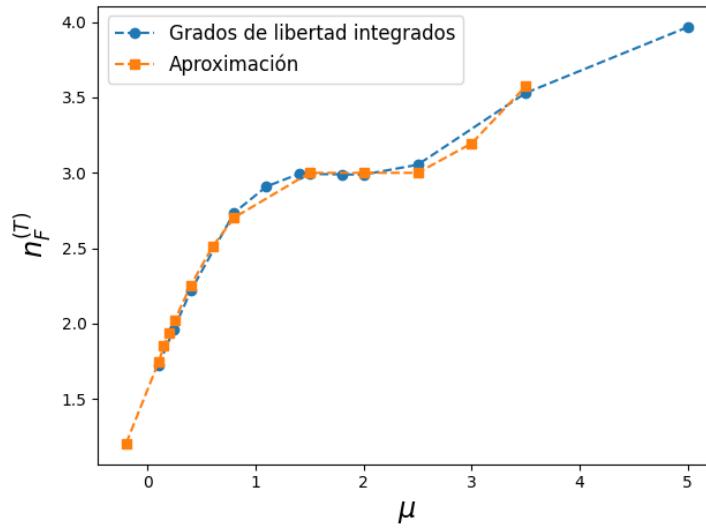


Figura A.2: Número de ocupación total en función del potencial químico para $\beta = 100$, $U = 3.3$. La curva de color azul corresponde a la calculada mediante el procedimiento de integrar los grados de libertad, mientras que la naranja corresponde a la calculada mediante la aproximación realizada al no tener en cuenta los términos extra-diagonales de la función de Green.

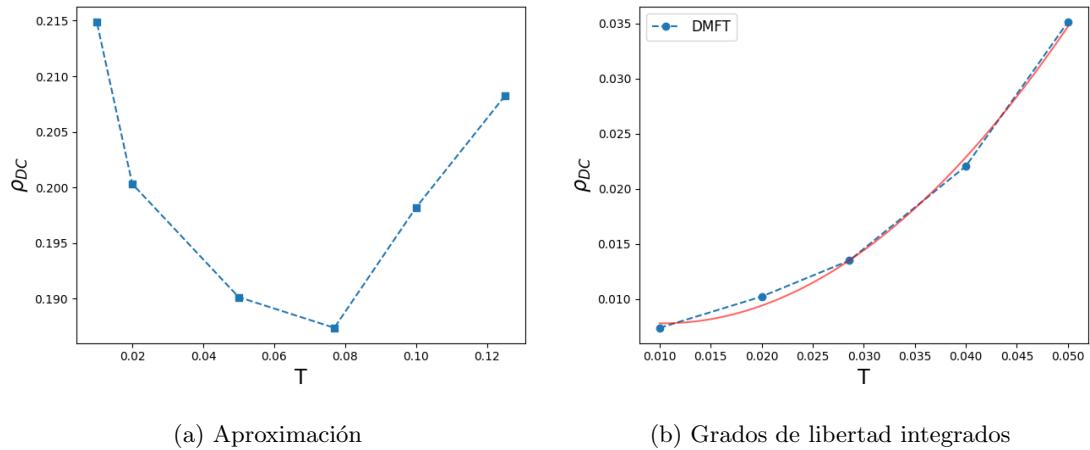


Figura A.3: Resistividades DC en función de la temperatura con valores de los parámetros dados por: $U = 3.3$, $n_F^{(T)} = 2$. La subfigura (a) consiste en la resistividad DC para el caso en el que se ignoran los términos extra-diagonales mientras que (b) consiste en la resistividad calculada mediante los grados de libertad integrados, la curva roja corresponde al ajuste cuadrático realizado.

Apéndice B

El método de la cavidad

En esta sección el objetivo será encontrar las ecuaciones de DMFT para el modelo sin el orbital 2. Para ello utilizaremos el método de la cavidad, el cual consiste en aislar un sitio de la red y estudiar su dinámica, llegando así a mapear el problema al de un problema de impureza de Anderson. Pero antes de obtener las ecuaciones veamos como queda la nueva acción.

La idea es seleccionar un sitio de la red (por ejemplo $i = 0$) e integrar los grados de libertad restantes para obtener una acción efectiva, en la Fig. B.1 se muestra este procedimiento de manera esquemática.

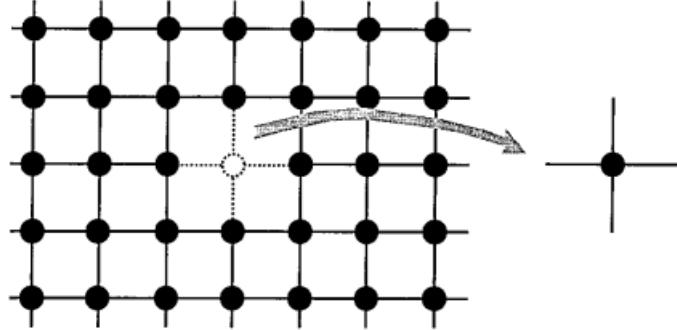


Figura B.1: Cavidad creada en la red completa removiendo uno de los sitios ($i = 0$). Figura tomada de [17].

Comenzamos partiendo a la acción A.18 en 3 partes $S_3 = S_0 + S^{(0)} + \Delta S$ en donde

$$S_0 = \int_0^\beta d\tau \left(\sum_{\sigma} c_{0\sigma}^\dagger(\tau) (\partial_\tau - \mu_{00}) c_{0\sigma}(\tau) + U n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau) \right) \quad (\text{B.1})$$

$$S^{(0)} = \int_0^\beta d\tau \left(\sum_{i \neq 0, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) (\partial_\tau - \mu_{ii}) c_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij\sigma} (t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + H.c) + U \sum_{i \neq 0} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right) \quad (\text{B.2})$$

$$\Delta S = - \int_0^\beta d\tau \sum_{i\sigma} (t_{i0} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{0\sigma}(\tau) + H.c) \quad (\text{B.3})$$

S_0 corresponde a la acción del sitio 0 desacoplado del resto de la red. $S^{(0)}$ es la acción de la red en la cual el sitio 0 y todos sus vínculos con el resto de la red fueron removidos, por lo

tanto queda la red con una cavidad en el sitio 0. Finalmente, ΔS es la acción que describe la hibridización entre el sitio 0 y la red.

Por lo tanto la función de partición queda ($\Delta S = \int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau)$):

$$\begin{aligned} Z &= \int \prod_{i\sigma} Dc_{i\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} e^{-(S_0 + S^{(0)} + \Delta S)} \\ &= \int Dc_{0\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} e^{-S_0} \int \prod_{i \neq 0} e^{-(S^{(0)} + \Delta S)} = \int Dc_{0\sigma}^\dagger Dc_{0\sigma} e^{-S_0} \\ &\quad \times \int \prod_{i \neq 0} Dc_{i\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} e^{-S^{(0)}} \left(1 - \int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau) + \frac{1}{2!} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 (\Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2)) + \dots \right). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Si ahora utilizamos el valor medio con respecto a la acción $S^{(0)}$

$$\langle A \rangle_{(0)} = \frac{1}{Z_{(0)}} \int \prod_{i \neq 0} Dc_{i\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} A e^{-S^{(0)}}, \quad (\text{B.5})$$

en donde $Z_{(0)}$ es la función de partición asociada a la acción $S^{(0)}$. Entonces la función de partición nos queda:

$$Z = \int Dc_{0\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} e^{-S_0} Z_{(0)} \exp(\tilde{S}), \quad (\text{B.6})$$

en donde definimos

$$\exp(\tilde{S}) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle (\Delta S)^n \rangle_{(0)}. \quad (\text{B.7})$$

Veamos los primeros dos términos de la ecuación B.7, en el primero se tiene que

$$\langle S(\tau) \rangle_{(0)} = \sum_{i\sigma} \left[\langle c_{i\sigma}^\dagger \rangle_{(0)} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger \langle c_{i\sigma} \rangle_{(0)} \right] = 0, \quad (\text{B.8})$$

ya que el valor medio no tiene en cuenta a los $c_{0\sigma}$. Veamos el segundo (sacando por simplicidad los t_{i0}):

$$\begin{aligned} \langle \Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2) \rangle_{(0)} &= \sum_{ij\sigma} \langle c_{i\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{0\sigma}(\tau_1) c_{j\sigma}^\dagger(\tau_2) c_{0\sigma}(\tau_2) \rangle_{(0)} \\ &\quad + \langle c_{i\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{0\sigma}(\tau_1) c_{0\sigma}^\dagger(\tau_2) c_{j\sigma}(\tau_2) \rangle_{(0)} + \langle c_{0\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{i\sigma}(\tau_1) c_{j\sigma}^\dagger(\tau_2) c_{0\sigma}(\tau_2) \rangle_{(0)} \\ &\quad + \langle c_{0\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{i\sigma}(\tau_1) c_{0\sigma}^\dagger(\tau_2) c_{j\sigma}(\tau_2) \rangle_{(0)}. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

El primer y el último término de la ecuación B.9 son iguales a cero debido a que no hay igual número de variables de Grassman de creación y de destrucción. Los dos términos restantes son iguales entre si. Si definimos las funciones de Green

$$G_{i_1 \dots i_n, j_1 \dots j_n}^{(0)}(\tau_1, \dots, \tau_n) = \langle c_{i_1}(\tau_1) \dots c_{i_n}^\dagger(\tau_n) \rangle_{(0)} \quad (\text{B.10})$$

Entonces nos queda (restaurando los t_{i0})

$$\langle \Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2) \rangle_{(0)} = 2 \sum_{ij\sigma} t_{i0} t_{0j} G_{ij}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2) c_{0\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{0\sigma}(\tau_2) \quad (\text{B.11})$$

De manera análoga se pueden conseguir los ordenes superiores. Si generalizamos estos resultados, vemos que a la expresión B.7 solo contribuyen las potencias pares de ΔS . Utilizando el

Linked Cluster Theorem se puede re-expresar la expresión, juntando las funciones de Green conectadas de manera que la acción efectiva queda dada por [17]:

$$S_{\text{ef}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma_1 \cdots \sigma'_n} \int d\tau_1 \cdots \int d\tau'_n \sum_{i_1, \dots, j_n} t_{0i_1}(\tau_1) \cdots t_{j_n 0}(\tau'_n) G_{(i_1 \sigma_1), \dots, (j_n \sigma'_n)}^{(0),c}(\tau_1, \dots, \tau'_n) \\ \times c_{\sigma_1}^\dagger(\tau_1) \cdots c_{\sigma'_n}^\dagger(\tau'_n) + S_0 + \text{cte}, \quad (\text{B.12})$$

en donde $G^{(0),c}$ son las funciones de Green del sistema conectadas.

En el límite de red de dimensión infinita ($d \rightarrow \infty$) ocurren varias simplificaciones. Se realiza el reescalamiento cuántico $t_{ij} \propto d^{-Z_{ij}}$ en donde Z_{ij} corresponde al número de sitios conectados por el hopping t_{ij} . Se puede mostrar mediante potencias de d que solo los términos de primer orden contribuyen a la acción efectiva. Por lo tanto, la acción efectiva queda

$$S_{\text{ef}} = \int_0^\beta d\tau \left(\sum_{\sigma} c_{0\sigma}^\dagger(\tau) (\partial_{\tau} - \mu_{00}) c_{0\sigma}(\tau) + U n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau) \right) \\ + \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\sigma} c_{0\sigma}^\dagger(\tau) c_{0\sigma}(\tau') \sum_{ij,0} t_{i0} t_{j0} G_{ij\sigma}^{(0),c}(\tau, \tau'). \quad (\text{B.13})$$

Esto nos permite introducir un propagador efectivo en el espacio de frecuencias de Matsubara:

$$\mathcal{G}_0^{-1}(iw_n) \equiv iw_n + \mu_{00} - \sum_{\langle ij,0 \rangle} t_{i0} t_{j0} G_{ij\sigma}^{(0),c}(iw_n), \quad (\text{B.14})$$

y finalmente llegar a la acción efectiva dada por la Ec. (3.8) en el espacio de frecuencias de Matsubara.

Apéndice C

Límite atómico

En esta sección se brindan algunos resultados respecto del modelo utilizado dado por el Hamiltoniano de la Ec. (3.28) en el límite atómico, es decir con $t = 0$:

$$H[c^\dagger, c] = \left[t_\perp \sum_\sigma c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^\dagger c_{1\sigma} \right] + U n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} - \mu \sum_{\alpha\sigma} n_{\alpha\sigma}. \quad (\text{C.1})$$

En la Fig. C.1 se muestra un esquema de este modelo en 1D.

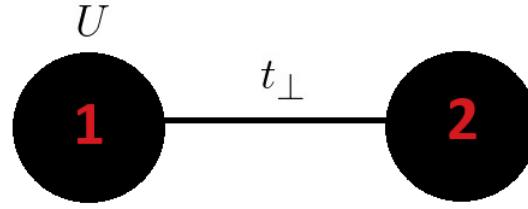


Figura C.1: Esquema del modelo para el caso del límite atómico en 1D. Solo se posee correlación en el sitio 1.

Una de las ventajas de esto es que se puede resolver de manera analítica. Dado que este operador Hamiltoniano H commuta con el operador número de partículas total n_T y con el operador de proyección de espín en la dirección \hat{z} , S_z dados por:

$$n_T = \sum_\sigma c_{1\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + c_{2\sigma}^\dagger c_{2\sigma}$$

$$S_z = \frac{1}{2} \left(\sum_\alpha c_{\alpha\uparrow}^\dagger c_{\alpha\uparrow} - c_{\alpha\downarrow}^\dagger c_{\alpha\downarrow} \right),$$

y a su vez, estos commutan entre sí, se puede diagonalizar al Hamiltoniano por bloques, puesto que la aplicación del Hamiltoniano deja invariante al subespacio con $\{N, s_z\}$ siendo N un autovalor del operador n_T y s_z un autovalor del operador S_z .

Para la diagonalización, se eligió la base dada por las proyecciones de los espines en la dirección \hat{z} , de esta manera el estado completamente ocupado está dado por:

$$|1\uparrow\ 2\uparrow\ 1\downarrow\ 2\downarrow\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle,$$

en donde el $|0\rangle$ corresponde al vacío y los números 1 y 2 indican el sitio en el que se encuentra el fermión.

En esta sección se eligieron los parámetros como $t_{\perp} = 0.3$, $U = 2.3$. Diagonalizando el Hamiltoniano se obtuvieron las energías y los autovectores. Por ejemplo, se encontró que el estado fundamental con $\mu = 0$ está dado por:

$$|GS\rangle = 0.11215|1\uparrow\downarrow\rangle + 0.515544|1\uparrow 2\downarrow\rangle - 0.515544|2\uparrow 1\downarrow\rangle + 0.675167|2\uparrow\downarrow\rangle. \quad (\text{C.2})$$

Una vez obtenidas las energías E_n y los autoestados $|n\rangle$ del sistema, se calculó el número de ocupación medio en función del potencial químico mediante la formula

$$\langle n_{\alpha} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{nn'\sigma} \langle n | c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} | n' \rangle \langle n' | c_{\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma} | n \rangle e^{-\beta E_n}, \quad (\text{C.3})$$

en donde Z es la función de partición del sistema.

En la Fig. C.2 se observa el resultado para $\beta = 100$. Al igual que en la resolución del modelo completo con DMFT (Ver Fig. 5.6), se observa que, cuando el llenado total es 2, los sitios no se llenan simétricamente sino que el sitio correlacionado presenta menor llenado que el sitio sin correlación.

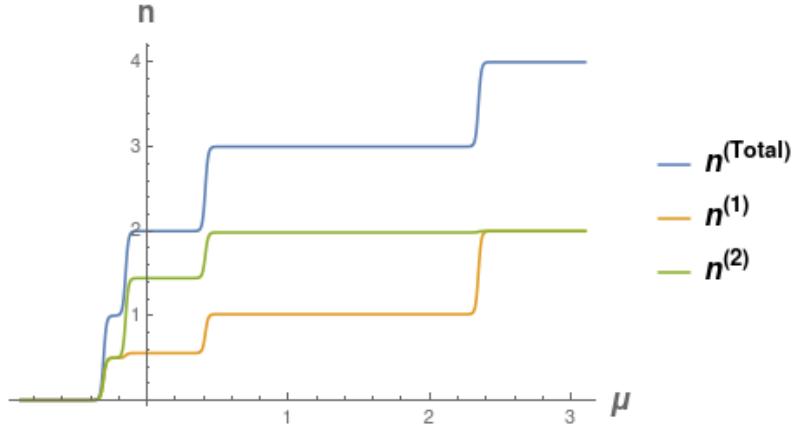


Figura C.2: Números de ocupaciones en función del potencial químico para $\beta = 100$, $U = 2.3$. La curva de color naranja corresponde al número de ocupación medio del sitio 1, la curva de color verde a la del sitio 2 y finalmente la azul corresponde a la total.

Luego se eligió el caso de llenado total mitad con $\mu = 0$ y se calcularon las distintas funciones de Green mediante la representación de Lehmann

$$G_{AB}(iw_n) = \frac{1}{Z} \sum_{nn'} \frac{\langle n | A | n' \rangle \langle n' | B | n \rangle}{iw_n + E_n - E_{n'}} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}). \quad (\text{C.4})$$

En la Fig. C.3 se observan las funciones de Green de los sitios 1 y 2 y la componente extradiagonal.

Una vez obtenidas las funciones de Green, se calculó la densidad de estados total mediante la continuación analítica $iw_n \rightarrow w + i0^+$:

$$A(w) = -\frac{1}{\pi} \Im \{G(w + i0^+)\}. \quad (\text{C.5})$$

En la Fig. C.4 se observa la densidad de estados total en función de la frecuencia y se observa un pico bien definido.

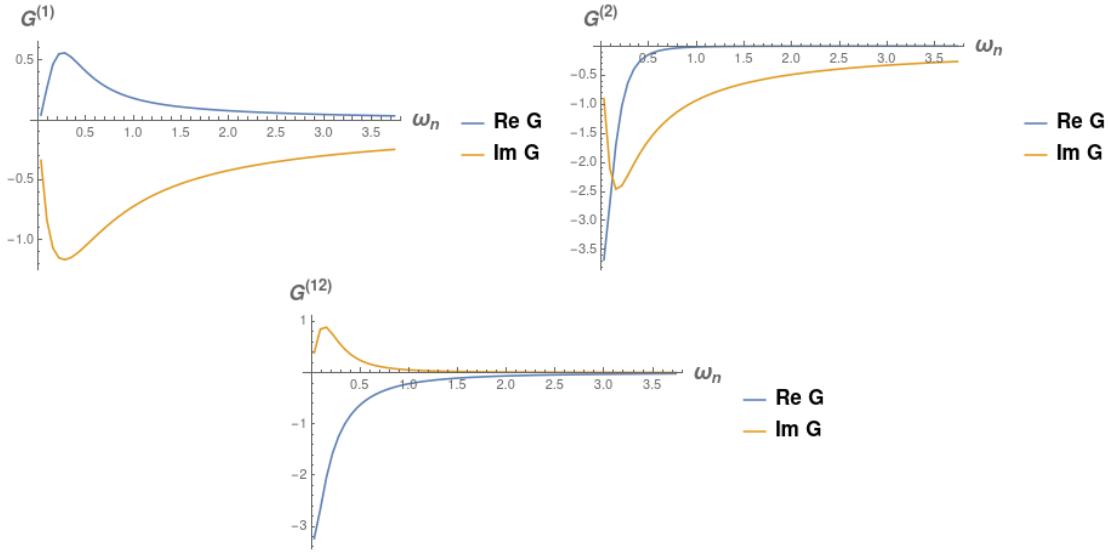


Figura C.3: Funciones de Green del límite atómico para el caso de $\beta = 100$, $U = 2.3$ y llenado mitad total $n_F^{(T)} = 2$. Las curvas celestes corresponden a la parte real de la función de Green mientras que la naranja a la imaginaria.

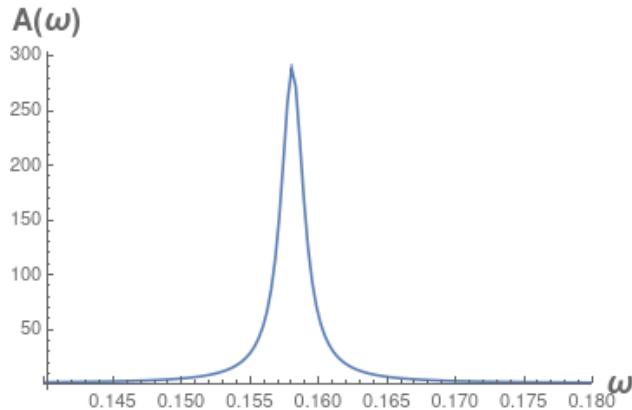


Figura C.4: Densidad de estados total para el caso de $\beta = 100$, $U = 2.3$ y $n_F^{(T)} = 2$.

Finalmente, se observó que se pueden modificar los niveles de llenado agregando una energía de sitio al Hamiltoniano, para que el llenado sea simétrico. Se agrega un parámetro extra α de manera tal que ahora el Hamiltoniano es:

$$H[c^\dagger, c] = \left[t_\perp \sum_\sigma c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^\dagger c_{1\sigma} \right] + U n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} - \mu \sum_{\alpha\sigma} n_{\alpha\sigma} + \alpha \sum_\sigma n_{1\sigma}. \quad (\text{C.6})$$

Si se elige $\alpha = -1.15$ se obtiene que los números de ocupación medios son los que se muestra en la Fig. C.5, en donde se observa que a diferencia de lo ocurrido en la Fig. C.2, ahora cuando se produce el llenado mitad total también vale que $n_F^{(1)} = n_F^{(2)} = 1$.

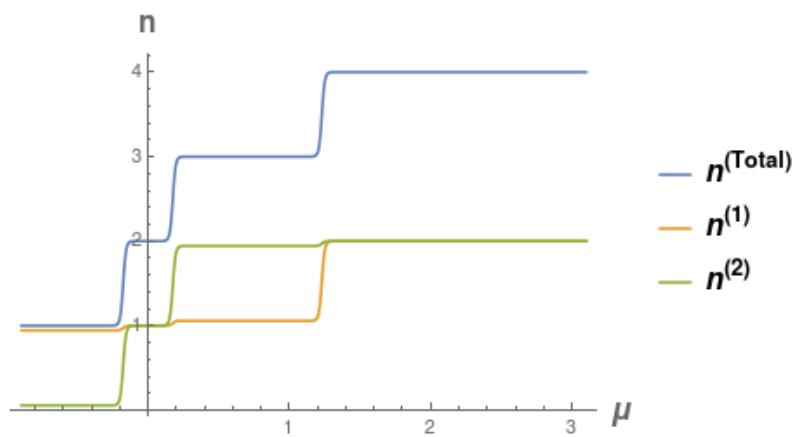


Figura C.5: Números de ocupaciones medios para el caso de $\beta = 100$, $U = 2.3$, $\alpha = -1.15$.

Bibliografía

- [1] Bertram Batlogg. Physical Properties of High-Tc Superconductors. *Physics Today*, 44(6):44–50, 06 1991.
- [2] D.M. Ginsberg. *Physical Properties of High Temperature Superconductors III*. World Scientific, 1992.
- [3] M V Sadovskii. Planckian relaxation delusion in metals. *Physics-Uspekhi*, 64(2):175, may 2021.
- [4] J Bruin, H Sakai, R. Perry, and A Mackenzie. Similarity of scattering rates in metals showing t-linear resistivity. *Science (New York, N.Y.)*, 339:804–7, 02 2013.
- [5] Anaëlle Legros et al. Universal t-linear resistivity and planckian dissipation in overdoped cuprates. *Nature Physics*, 15, 02 2019.
- [6] Sean Hartnoll. Theory of universal incoherent metallic transport. *Nature Physics*, 11, 05 2014.
- [7] Aavishkar A. Patel and Subir Sachdev. Theory of a planckian metal. *Phys. Rev. Lett.*, 123:066601, Aug 2019.
- [8] Debanjan Chowdhury, Antoine Georges, Olivier Parcollet, and Subir Sachdev. Sachdev-ye-kitaev models and beyond: Window into non-fermi liquids. *Rev. Mod. Phys.*, 94:035004, Sep 2022.
- [9] Wéi Wú, Xiang Wang, and André-Marie Tremblay. Non-fermi liquid phase and linear-in-temperature scattering rate in overdoped two-dimensional hubbard model. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 119(13), March 2022.
- [10] Piers Coleman. *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge University Press, 2015.
- [11] E.N. Economou. *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer, 2006.
- [12] N F Mott. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 62(7):416, jul 1949.
- [13] Nevill Mott. On metal-insulator transitions. *Journal of Solid State Chemistry*, 88(1):5–7, 1990.
- [14] Henrik Bruus and Karsten Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics - an introduction*. Oxford University Press, United States, 2004.

- [15] Alexander Cyril Hewson. *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge Studies in Magnetism. Cambridge University Press, 1993.
- [16] A A Abrikosov and I M Khalatnikov. The theory of a fermi liquid (the properties of liquid 3he at low temperatures). *Reports on Progress in Physics*, 22(1):329, jan 1959.
- [17] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, and Marcelo J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.*, 68:13–125, Jan 1996.
- [18] L. de' Medici, A. Georges, G. Kotliar, and S. Biermann. Mott transition and kondo screening in f -electron metals. *Phys. Rev. Lett.*, 95:066402, Aug 2005.
- [19] S. Biermann, L. de' Medici, and A. Georges. Non-fermi-liquid behavior and double-exchange physics in orbital-selective mott systems. *Phys. Rev. Lett.*, 95:206401, Nov 2005.
- [20] A. Amaricci, L. de' Medici, and M. Capone. Mott transitions with partially filled correlated orbitals. *Europhysics Letters*, 118(1):17004, jun 2017.
- [21] Neil W Ashcroft and N David Mermin. *Solid state physics*, pages 1–29. Holt, Rinehart and Winston, New York, NY, 1976.
- [22] M. Fox. *Optical Properties of Solids*. Oxford Master Series in Physics. OUP Oxford, 2010.
- [23] A. J. Millis. *Optical conductivity and correlated electron physics*, pages 195–235. Springer Netherlands, Dordrecht, 2004.
- [24] I. Vecchio, Marta Autore, Fausto D'Apuzzo, Flavio Giorgianni, Andrea Perucchi, U. Schade, V. Andreev, V. Klimov, and S. Lupi. Optical conductivity of v4o7 across its metal-insulator transition. *Physical Review B*, 90, 07 2014.
- [25] Th Pruschke and R Zitzler. From slater to mott–heisenberg physics: the antiferromagnetic phase of the hubbard model. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 15(46):7867, nov 2003.
- [26] Dmitrii L Maslov and Andrey V Chubukov. Optical response of correlated electron systems. *Reports on Progress in Physics*, 80(2):026503, dec 2016.
- [27] Edward Perepelitsky et al. Transport and optical conductivity in the hubbard model: A high-temperature expansion perspective. *Phys. Rev. B*, 94:235115, Dec 2016.
- [28] Kristjan Haule. Quantum monte carlo impurity solver for cluster dynamical mean-field theory and electronic structure calculations with adjustable cluster base. *Phys. Rev. B*, 75:155113, Apr 2007.
- [29] Emanuel Gull, Andrew J. Millis, Alexander I. Lichtenstein, Alexey N. Rubtsov, Matthias Troyer, and Philipp Werner. Continuous-time monte carlo methods for quantum impurity models. *Rev. Mod. Phys.*, 83:349–404, May 2011.
- [30] G.D. Mahan. *Many-Particle Physics*, pages 136–142. Physics of Solids and Liquids. Springer, 2000.
- [31] Mark Jarrell and J.E. Gubernatis. Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum monte carlo data. *Physics Reports*, 269(3):133–195, 1996.

- [32] Tudor D. Stanescu, Philip Phillips, and Ting-Pong Choy. Theory of the luttinger surface in doped mott insulators. *Phys. Rev. B*, 75:104503, Mar 2007.
- [33] Oscar Nájera Ocampo. *Study of the dimer Hubbard Model within Dynamical Mean Field Theory and its application to VO*. Theses, Université Paris Saclay (COmUE), December 2017.
- [34] Turan Birol and Kristjan Haule. $J_{\text{eff}} = 1/2$ mott-insulating state in rh and ir fluorides. *Phys. Rev. Lett.*, 114:096403, Mar 2015.
- [35] Hung T. Dang, Xinyuan Ai, Andrew J. Millis, and Chris A. Marianetti. Density functional plus dynamical mean-field theory of the metal-insulator transition in early transition-metal oxides. *Phys. Rev. B*, 90:125114, Sep 2014.
- [36] Alex Taekyung Lee, Hyowon Park, and Anh T. Ngo. Effect of off-diagonal elements in the wannier hamiltonian on DFT + DMFT for low-symmetry materials: Study of li_2mno_3 . *Phys. Rev. B*, 108:205146, Nov 2023.

Tesis disponible bajo Licencia Creative Commons, Atribución – No Comercial – Compartir Igual (by-nc-sa) 2.5 Argentina Buenos Aires, 2024.