

# Correlações eletrônicas

Ana Claudia Lausmann

Abril de 2012

## Apresentação

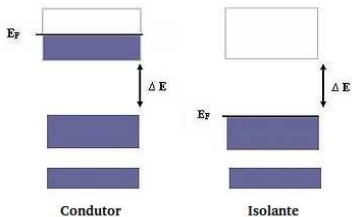
- Objetivo;
- Teoria de Bandas;
- Sistemas Fortemente Correlacionados;
- Modelo de Hubbard;
- Aproximação para desacoplar o sistema de equações;
- Conclusão.

## Objetivo

- Compreender quando e porque devemos levar em consideração as correlações eletrônicas em um sistema.

## Teoria de Bandas

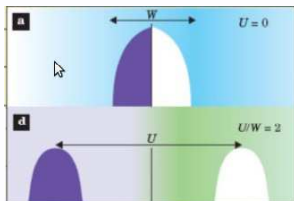
- É do interesse científico e tecnológico classificar os diversos materiais e substâncias conhecidas em metais, isolantes ou semicondutores;
- A teoria de bandas classificou um enorme número de sólidos cristalinos como metais e isolantes;



- Erroneamente a teoria de bandas classificou que certos isolantes poderiam ser metais;
- Peierls (Mott e Peierls) em 1937 destacou a forte repulsão Coulombiana.

## Sistemas de Elétrons Fortemente Correlacionados (SEFC)

- SEFC são classificados por exclusão: a teoria de bandas não consegue prever o comportamento desses sistemas;
- Nesses sistemas  $U \gtrsim t$  (forte interação Colombiana).



Densidade de estados para  $U=0$  e  $U/W=2$ .

- Como podemos pensar nas correlações entre os elétrons?
- A largura das bandas de energia pode nos dizer o quanto importante são as correlações para compreender comportamento do sistema;
- O primeiro modelo que se proposto para descrever os SEFC foi o modelo de Hubbard de uma banda.

## Modelo de Hubbard

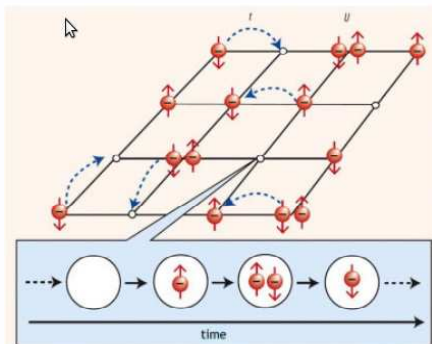
- O hamiltoniano do modelo de Hubbard é descrito por:

$$H = \sum_{ij\sigma'} t_{ij} C_{i\sigma'}^+ C_{j\sigma'} + U \sum_{i\sigma'} n_{i\sigma'} n_{i-\sigma'} \quad (1)$$

onde  $C_{i\sigma'}^+$  ( $C_{i\sigma'}$ ) é o operador de criação (destruição),  $n_{i\sigma'} = C_{i\sigma'}^+ C_{i\sigma'}$ ,  $t_{ij}$  é a amplitude do hopping e  $U$  o termo de interação Coulombiana local.



- Um sítio em particular descrito pelo modelo de Hubbard:



- Utilizamos a técnica das funções de Green (F.G.) para estudar o modelo;
- A equação de movimento das funções de Green é dada por:

$$\omega \langle\langle A; B \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi i} \langle [A, B]_+ \rangle + \langle\langle [A, H]; B \rangle\rangle \quad (2)$$

onde  $A$  e  $B$  são operadores e  $H$  o hamiltoniano que descreve o sistema;

- Ao derivarmos essa equação surgirá uma nova função de Green de ordem superior a anterior;
- Será necessário fazer algum tipo de aproximação para desacoplar as equações e resolver o sistema.

## Aproximação para desacoplar o sistema de equações

- Qual aproximação será melhor utilizar para obter as quantidades físicas de nosso interesse?
- No caso de sistemas correlacionados  $\langle AB \rangle \neq \langle A \rangle \langle B \rangle$ ;
- Função correlação:  $\langle AB \rangle = \frac{1}{2\pi i} \oint f(\omega) \ll A; B \gg d\omega$

## Aproximação de Hartree-Fock

- Calcula-se a equação de movimento do propagador  $\ll d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg$ ;
- Substitui na equação de movimento:

$$[d_{i\sigma}, H]_- = \sum_l t_{il} d_{l\sigma} + U n_{i-\sigma} d_{i\sigma} \quad (3)$$

- Ao derivar a equação de movimento obtém-se uma função de Green de ordem superior e faz-se a seguinte aproximação:

$$\ll n_{i-\sigma} d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg = \langle n_{i-\sigma} \rangle \ll d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg \quad (4)$$

- Essa aproximação equivale a rescrever o segundo termo do hamiltoniano da seguinte forma:

$$U \sum_{i\sigma} \langle n_{i-\sigma} \rangle n_{i-\sigma} \quad (5)$$

## Aproximação de Hubbard I

- Calcula-se a equação de movimento do propagador  $\ll d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg$ ;
- Substitui na equação de movimento:

$$[d_{i\sigma}, H]_- = \sum_l t_{il} d_{l\sigma} + U n_{i-\sigma} d_{i\sigma} \quad (6)$$

- Ao derivar a equação de movimento obtém-se uma função de Green de ordem superior:

$$\ll n_{i-\sigma} d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg \quad (7)$$

- Calcula-se a equação de movimento do novo propagador  $\ll n_{i-\sigma} d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg$ ;

- Então, faz-se a aproximação:

$$\llangle n_{i-\sigma} d_{l\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg\rangle = \langle n_{i-\sigma} \rangle \llangle d_{l\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg\rangle \quad (8)$$

$$\llangle d_{i-\sigma}^\dagger d_{l-\sigma} d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg\rangle - \llangle d_{l-\sigma} d_{i-\sigma} d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg\rangle = (\langle d_{i-\sigma}^\dagger d_{l-\sigma} \rangle - \langle d_{l-\sigma}^\dagger d_{i-\sigma} \rangle) \llangle d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg\rangle \quad (9)$$

- Devido à simetria temos:

$$(\langle d_{i-\sigma}^\dagger d_{l-\sigma} \rangle - \langle d_{l-\sigma}^\dagger d_{i-\sigma} \rangle) \llangle d_{i\sigma}; d_{j\sigma}^\dagger \gg\rangle = 0 \quad (10)$$

- Ou seja,  $\langle d_{i-\sigma}^\dagger d_{l-\sigma} \rangle = \langle d_{l-\sigma}^\dagger d_{i-\sigma} \rangle$ .

## Aproximação proposta por Laura Roth

- A aproximação proposta por Laura Roth consiste em rescrever o comutador  $[A_n, H]$  como uma soma do produto de uma matriz  $K_{nm}$  e um conjunto de operadores  $A_m$  obtendo que:

$$[A_n, H] = \sum_m K_{nm} A_m \quad (11)$$

- Em notação matricial temos que a matriz energia é dada por  $E = KN$ , onde  $E$  é a matriz energia e  $N$  a matriz normalização;
- Substituindo  $[A_n, H] = \sum_m K_{nm} A_m$  na equação de movimento das F.G. podemos obter a matriz das F.G. dada por:

$$G(\omega) = N(\omega N - E)^{-1} N \quad (12)$$

onde considera-se que  $K = NE^{-1}$ .

## Conclusão

- As correlações influenciam as propriedades da matéria;
- Quanto mais estreita for a banda de energia mais fortes e importantes são os efeitos das correlações entre os elétrons.