

GTa_4Se_8 : ¿el mejor ejemplo de la física de Mott-Hubbard?



universidad de buenos aires - exactas
departamento de Física

Alberto Camjayi



Colaboradores

- Marcelo Rozenberg
- Carlos Acha
- Ruben Weht (TANDAR, CNEA)
- Laurent Cario (IMN, Université de Nantes)

Plan de la charla

- Introducción
- La Física de Mott
- Teoría de campo medio dinámico
- GTS
- Conclusión

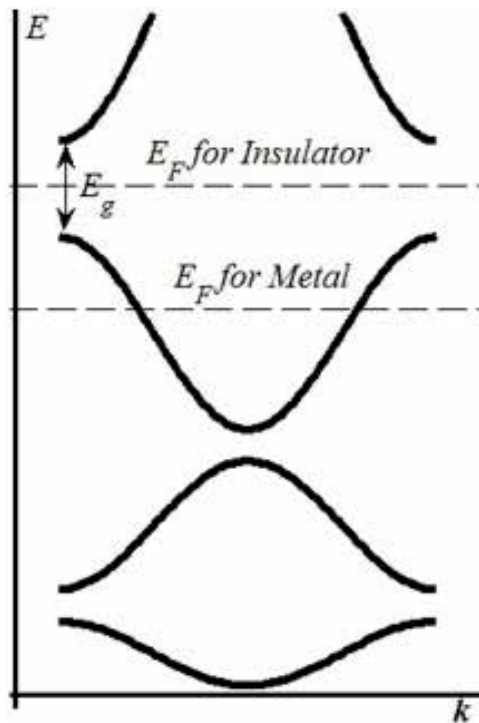
Metales y aisladores

- Se los distingue comúnmente por sus propiedades eléctricas.



- Descripción de Drude (1900):
los electrones de valencia se mueven libremente.
- Descripción de Bloch (1928-1931):
los electrones están confinados en "bandas" de energías.

Metales y aisladores



- Bandas parcialmente llenas son metales.
- Bandas llenas son aisladores.

La Teoría de la funcional densidad (DFT) es la principal herramienta en la descripción teórica de la estructura de bandas.

Introducción

Metales y aisladores

¡DFT ha sido muy exitosa!

Table 1. *Physical Review* Articles with more than 1000 Citations Through June 2003

Publication	# cites	Av. age	Title	Author(s)
<i>PR</i> 140, A1133 (1965)	3227	26.7	Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects	W. Kohn, L. J. Sham
<i>PR</i> 136, B864 (1964)	2460	28.7	Inhomogeneous Electron Gas	P. Hohenberg, W. Kohn
<i>PRB</i> 23, 5048 (1981)	2079	14.4	Self-Interaction Correction to Density-Functional Approximations for Many-Electron Systems	J. P. Perdew, A. Zunger
<i>PRL</i> 45, 566 (1980)	1781	15.4	Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method	D. M. Ceperley, B. J. Alder
<i>PR</i> 108, 1175 (1957)	1364	20.2	Theory of Superconductivity	J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer
<i>PRL</i> 19, 1264 (1967)	1306	15.5	A Model of Leptons	S. Weinberg
<i>PRB</i> 12, 3060 (1975)	1259	18.4	Linear Methods in Band Theory	O. K. Anderson
<i>PR</i> 124, 1866 (1961)	1178	28.0	Effects of Configuration Interaction of Intensities and Phase Shifts	U. Fano
<i>RMP</i> 57, 287 (1985)	1055	9.2	Disordered Electronic Systems	P. A. Lee, T. V. Ramakrishnan
<i>RMP</i> 54, 437 (1982)	1045	10.8	Electronic Properties of Two-Dimensional Systems	T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern
<i>PRB</i> 13, 5188 (1976)	1023	20.8	Special Points for Brillouin-Zone Integrations	H. J. Monkhorst, J. D. Pack

PR, *Physical Review*; *PRB*, *Physical Review B*; *PRL*, *Physical Review Letters*; *RMP*, *Reviews of Modern Physics*.

Extraído de S. Redner, *Phys. Today* **58**, (6) 49 (2005).

Física de Mott

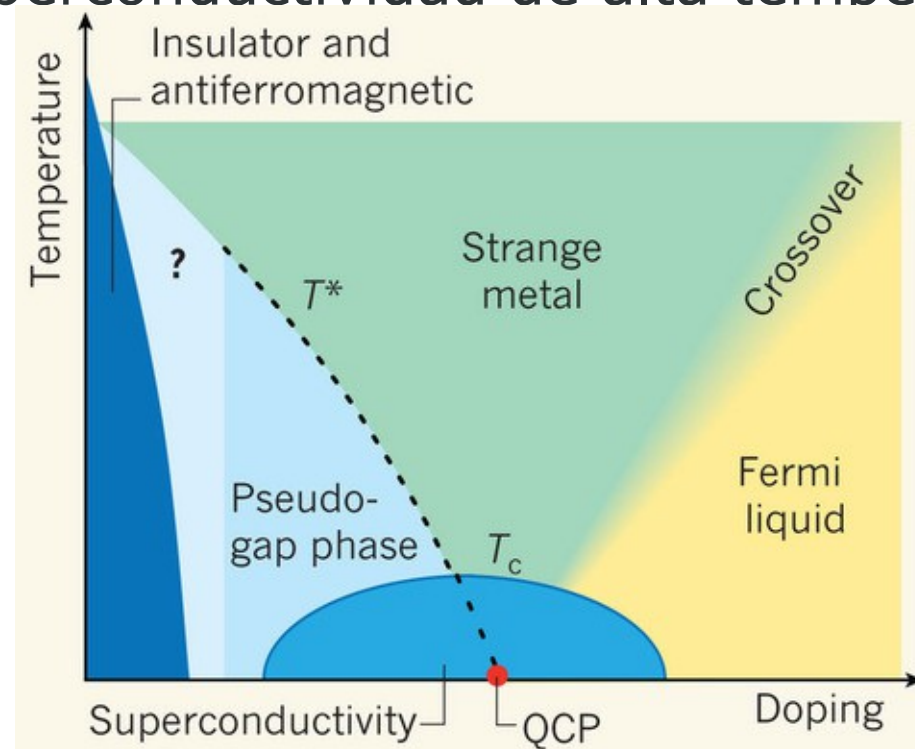
- de Boer y Verwey (1937): el óxido de Níquel es un aislador.
- ¡Pero la teoría de bandas predice que es metálico (llenado mitad)!



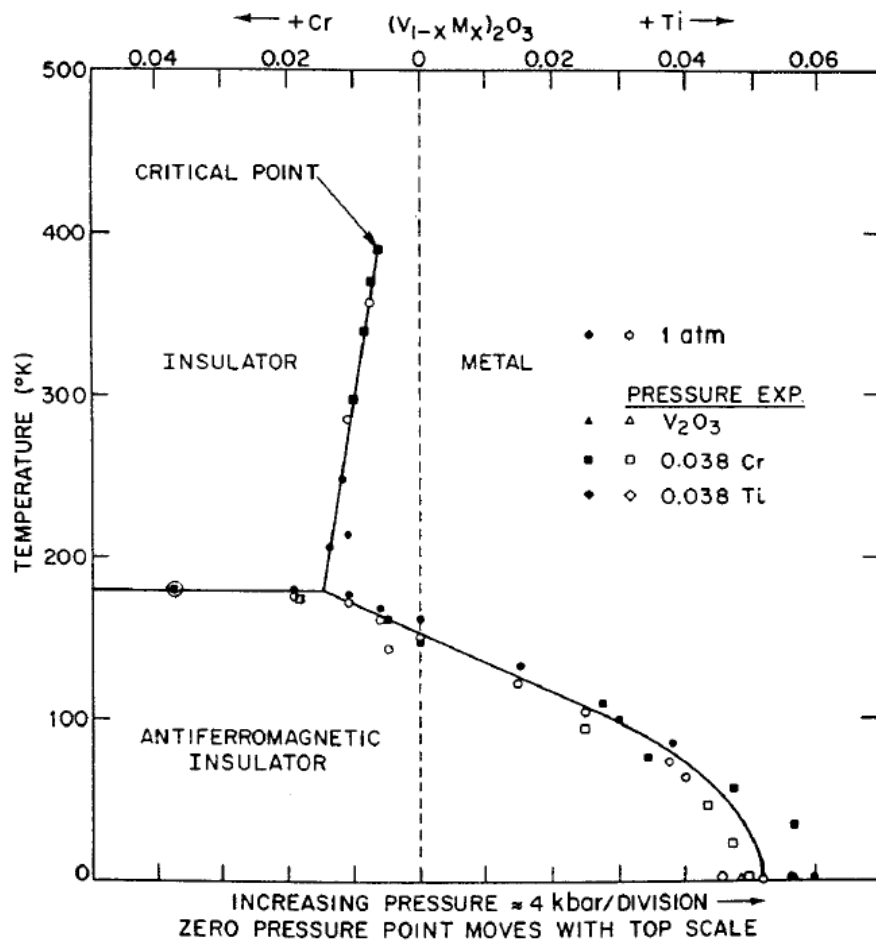
- Mott (1937): hay que considerar las interacciones electrón – electrón.
- La repulsión Coulombiana se opone al “salto” de los electrones entre sitios vecinos.
- Hubbard (1963): la repulsión local (corto alcance) es suficiente.

Física de Mott

- A llenado “entero” la idea de Mott es sencilla de seguir.
- A llenados no enteros, cuando se “dopa” el aislador de Mott, la complejidad aumenta.
- Ejemplo: la superconductividad de alta temperatura.

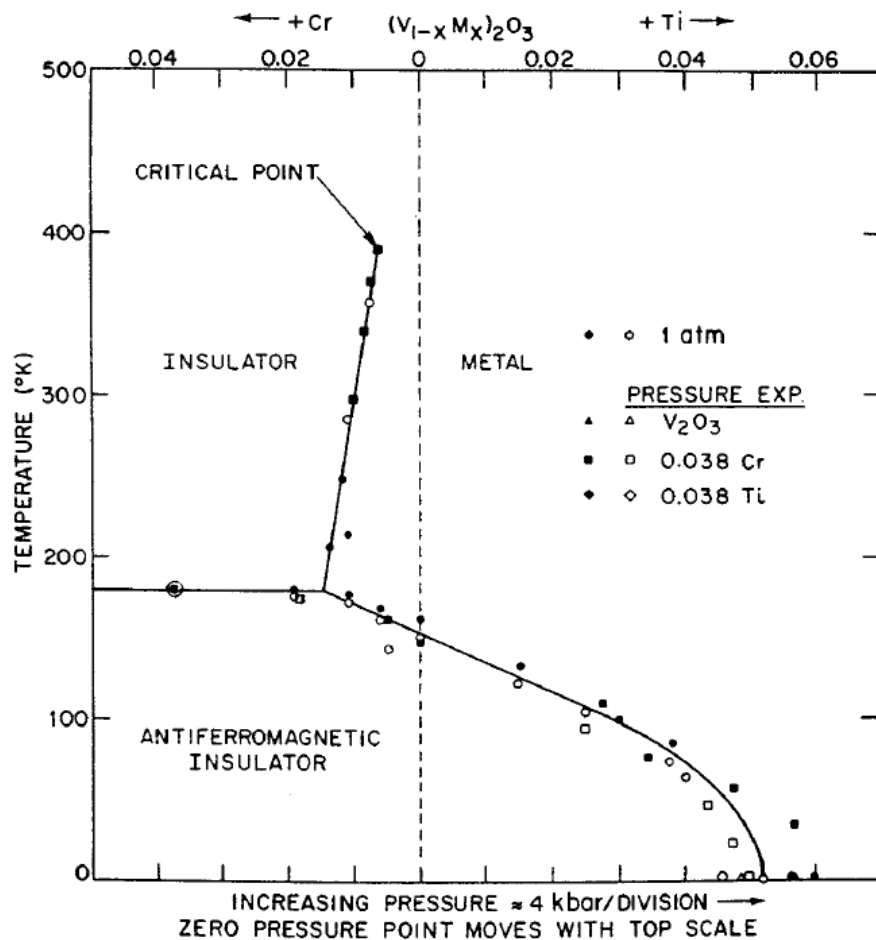


Ejemplo “típico”: V_2O_3



- Transición metal – aislador incrementando presión.
- Estado fundamental antiferro.
- Es necesario dopar el compuesto.
- Multitud de bandas cruzan la energía de Fermi.
- Estados con ordenamiento orbital.

Ejemplo “típico”: V_2O_3



- Transición metal – aislador incrementando presión.
- Estado fundamental antiferro.
- Es necesario dopar el compuesto.
- Multitud de bandas cruzan la energía de Fermi.
- Estados con ordenamiento orbital.

Mott vs. aisladores de banda

- El estado fundamental en los aisladores de banda, incluyendo los semiconductores, ocurren por un sutil efecto de interferencia cuántico proveniente del hecho de ser fermiones (líquidos de Fermi).
- En general los aisladores de ambos tipos ocurren a llenados enteros (número entero de electrones por celda unidad).
- La respuesta al dopado en los aisladores de Mott se comprende solo parcialmente.
- Además de aisladores, el estado de Mott se puede caracterizar por la presencia o no de ruptura espontánea de simetría, orden topológico, carga fraccionaria, etc.

Hamiltoniano de Mott - Hubbard

$$\hat{H} = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. \right) + (\varepsilon - \mu) \sum_{i, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

- ¡Imposible de resolver exactamente!
- Campo medio: para ciertas cantidades desprecia las fluctuaciones de frente a los valores medios.
- Es exacta en alta dimensionalidad.

Versión cuántica del campo medio

- No hay un parámetro de orden o cantidad extensiva: el objeto principal es la función de Green:

$$G_{ij,\sigma}(\tau - \tau') = - \left\langle \hat{T} c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(\tau') \right\rangle$$

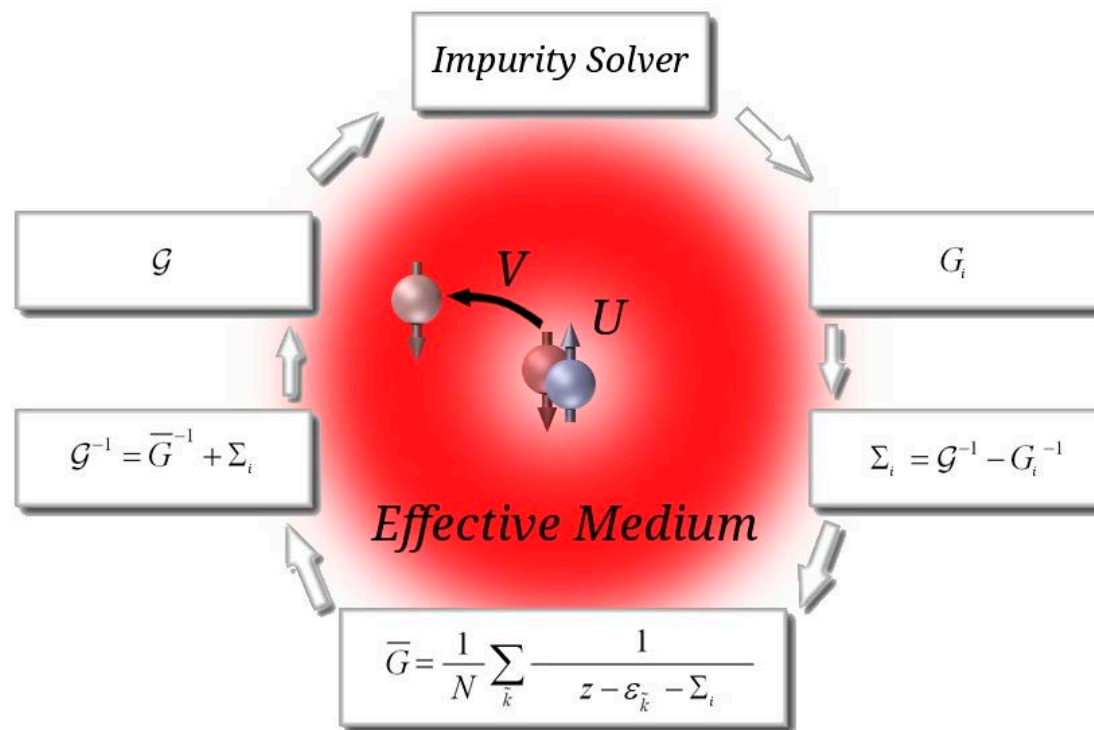
- No se trabaja con un Hamiltoniano de campo medio sino con una acción efectiva:

$$S_{ef} = - \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_{\sigma} c_{0\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{0\sigma}(\tau') \\ + U \int_0^\beta d\tau n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau)$$

Teoría de campo medio dinámico

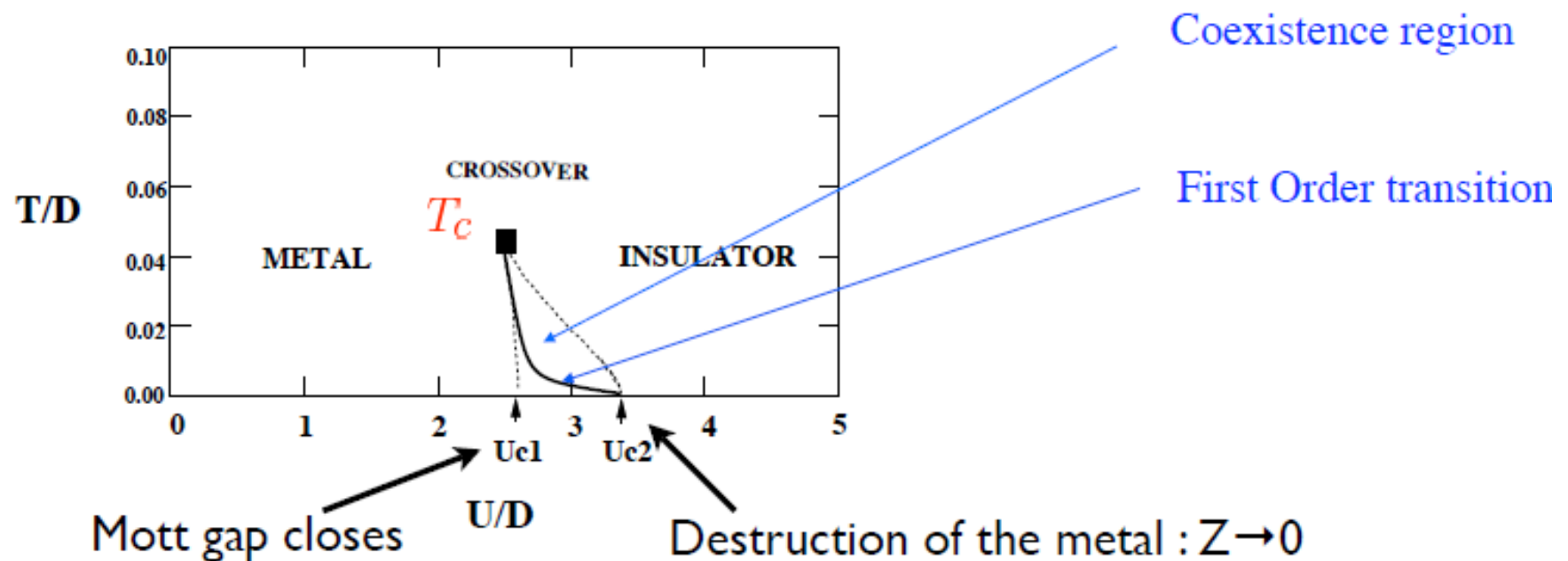
Versión cuántica del campo medio

- \mathcal{G}_0 representa la función de Green del baño efectivo que interactúa con la impureza (modelo de la impureza de Anderson).



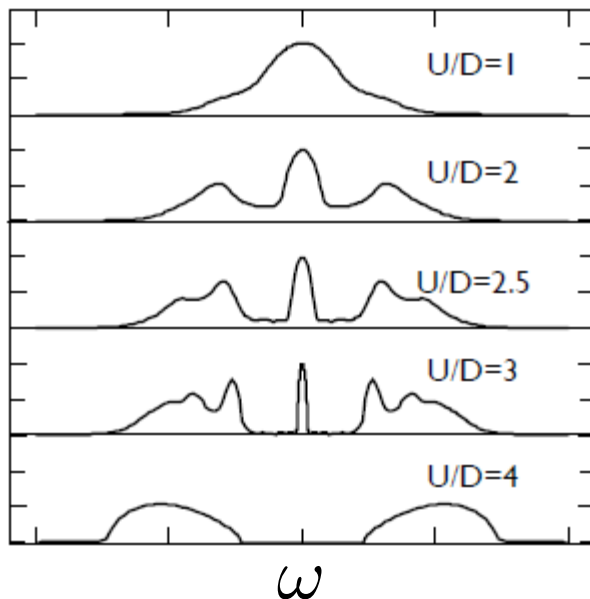
Teoría de campo medio dinámico

DMFT y la transición de Mott - Hubbard



DMFT y la transición de Mott - Hubbard

Función espectral

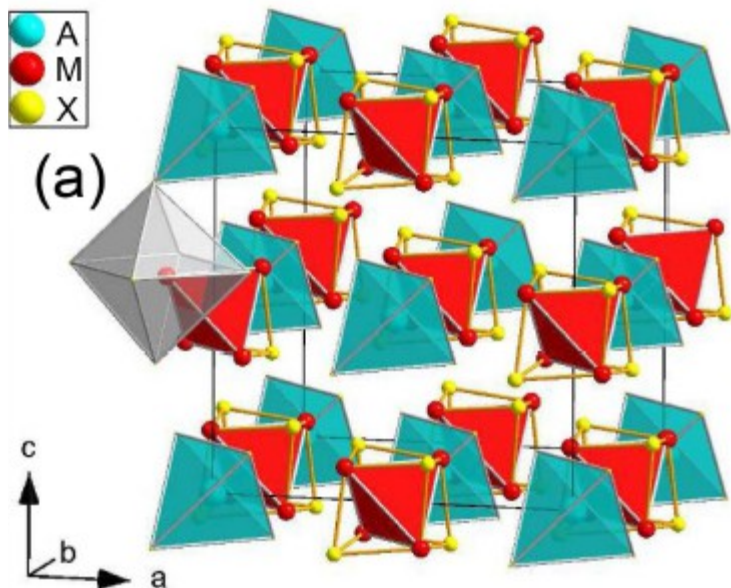


- Líquido de Fermi con escala de coherencia pequeña: $\varepsilon_F^* = ZD$.
- Partes coherente e incoherentes.
- Transferencia de peso espectral de baja a alta frecuencia.

DFT + DMFT: descripción “realista” de materiales

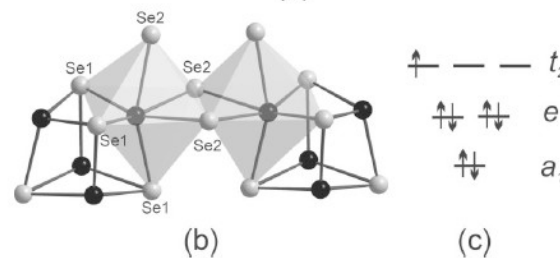
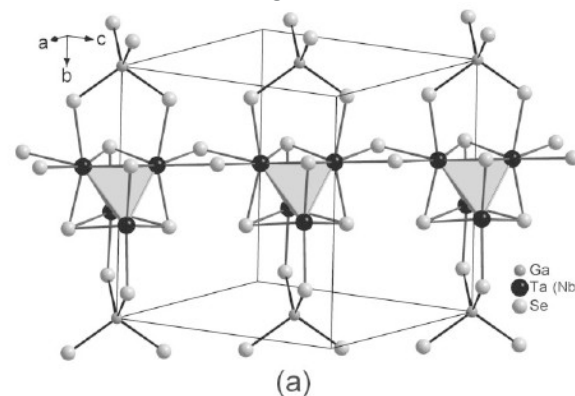
- Estructura de bandas y la física de muchas partículas se unen.
- Importantes desarrollos en los códigos para resolver el problema de la impureza: Monte Carlo cuántico.
- Puesta a punto de la interfaz entre ambas metodologías: orbitales moleculares.
- Resultados en acuerdo cuantitativo con experimentos.

Los chalcogenidos AM_4X_8

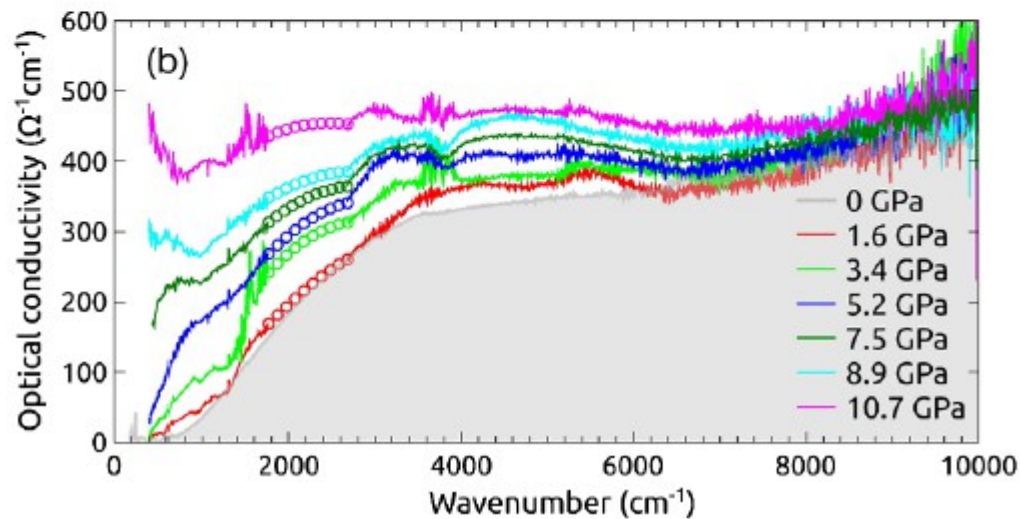
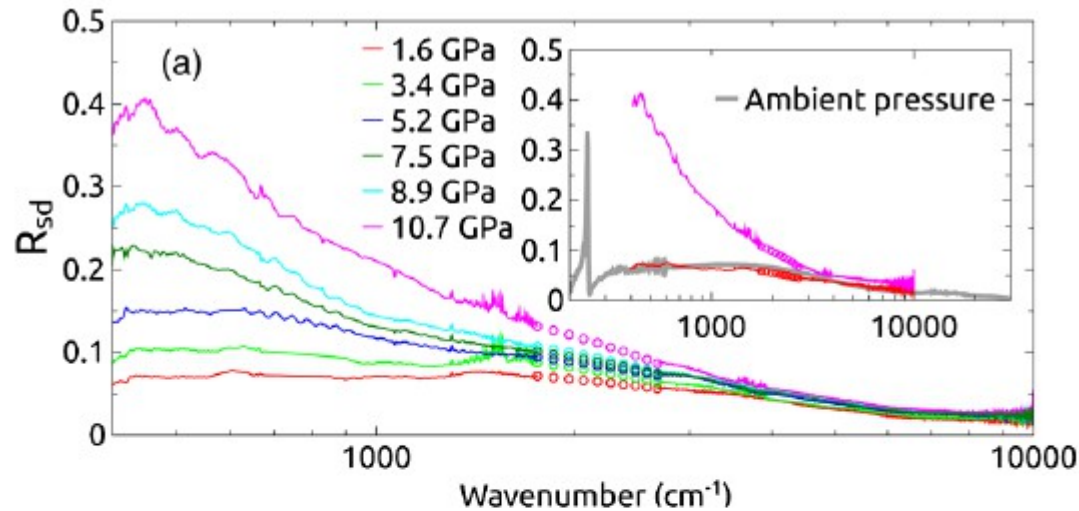


A = Ga, Ge
 M = Ti, V, Nb, Ta, Mo
 X = S, Se

Estructura cristalográfica de los compuestos AM_4X_8 remarcando: los tetraedros M_4 y AX_4 y el octaedro MX_6 .

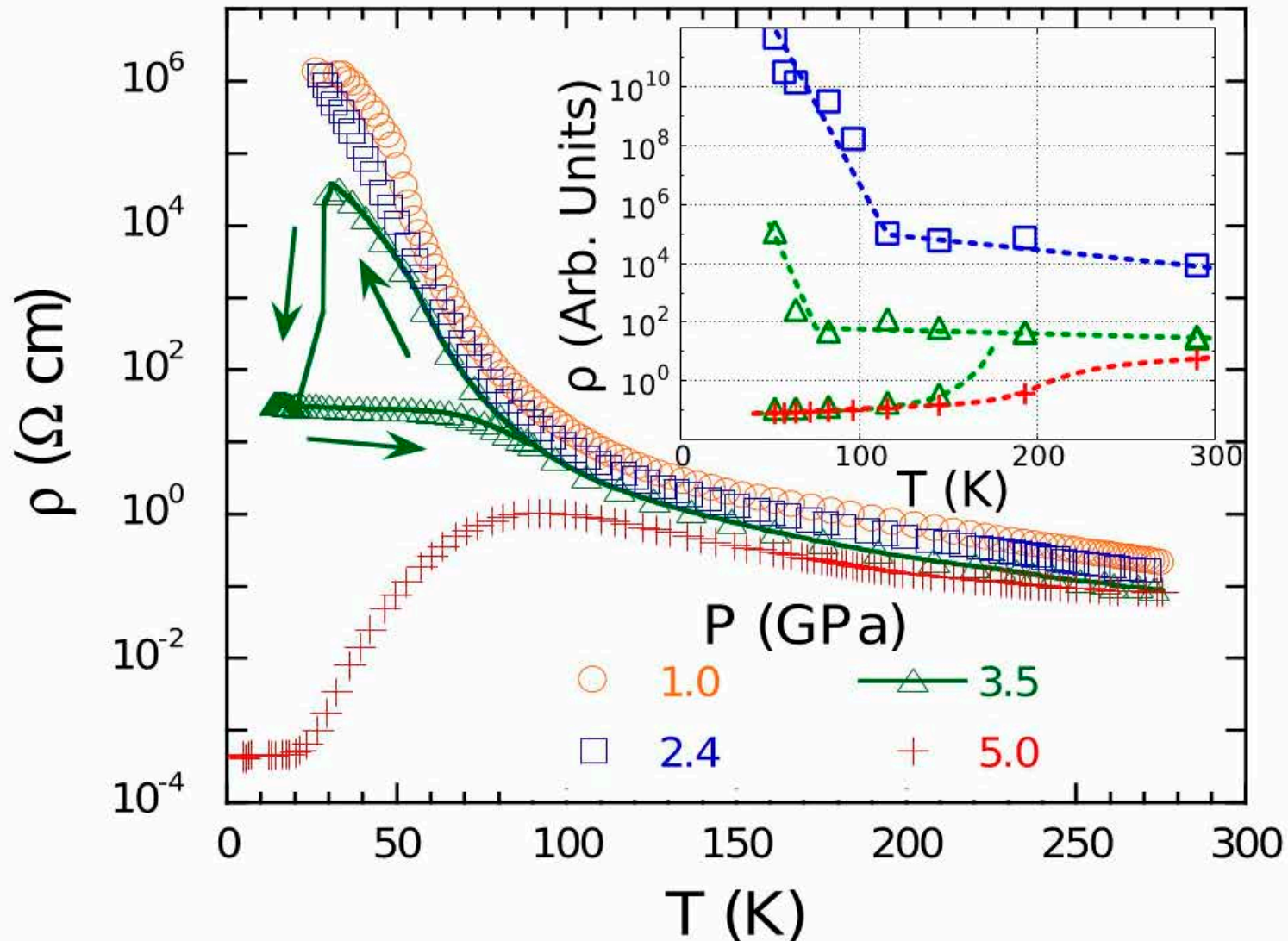


GTS: conductividad óptica

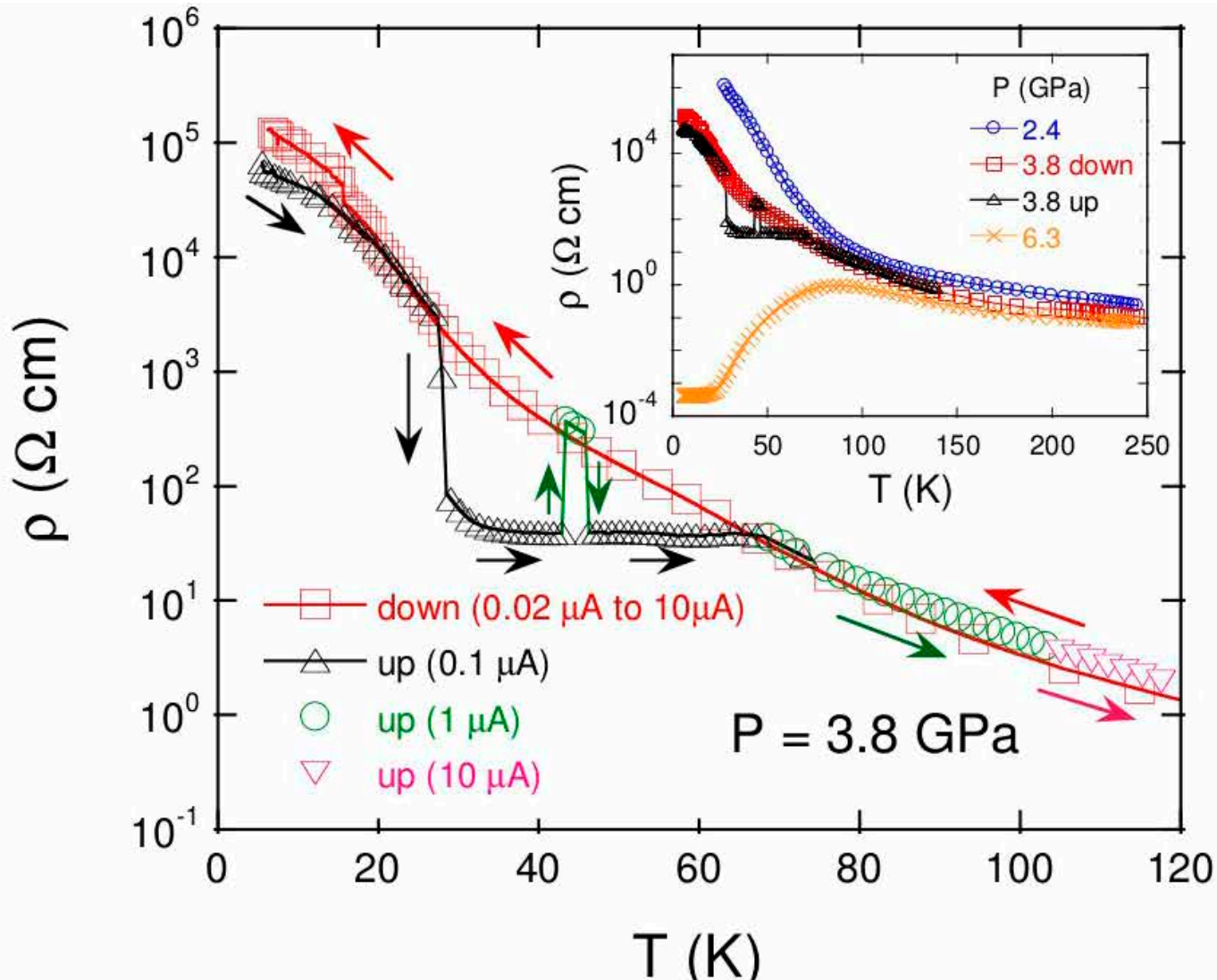


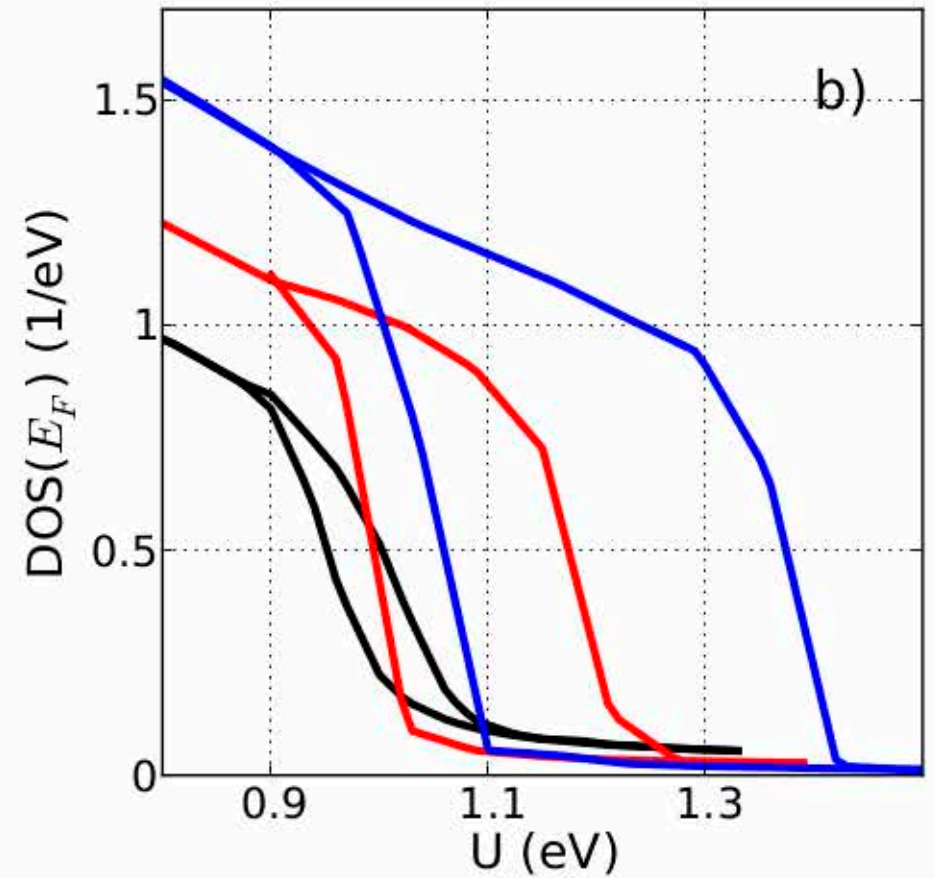
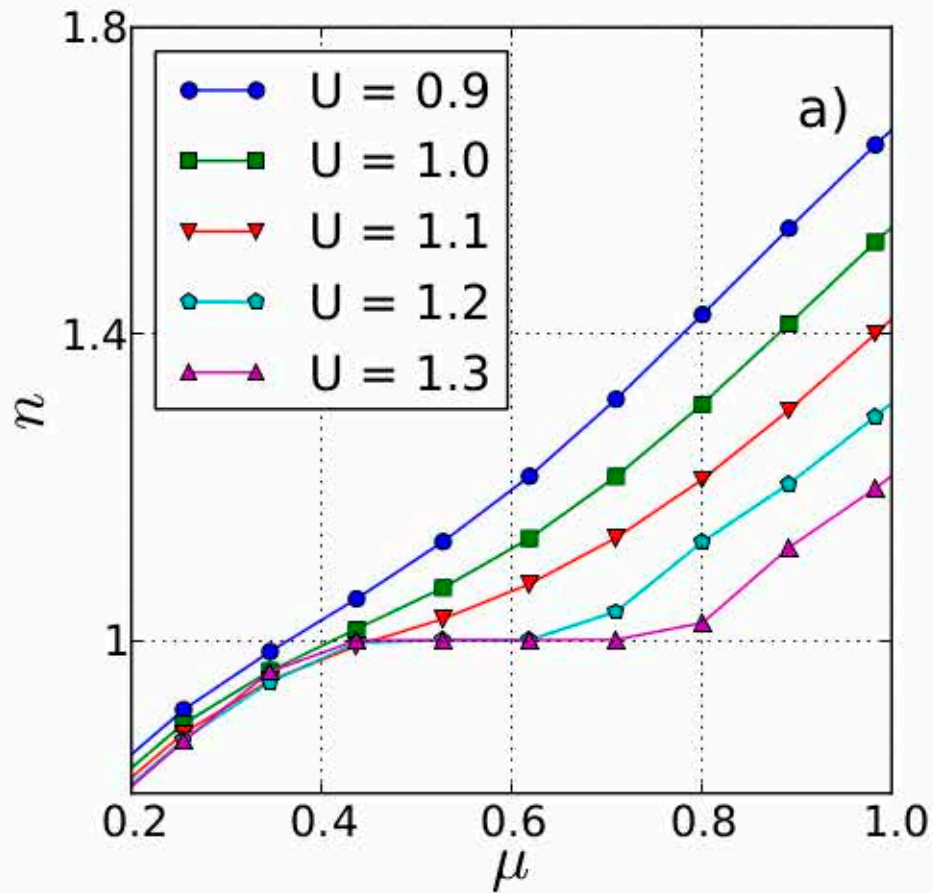
Reflectividad y conductividad óptica bajo presión de 1.6 GPa a 10.7 GPa (subiendo). La zona sombreada corresponde a la conductividad óptica a presión ambiente.

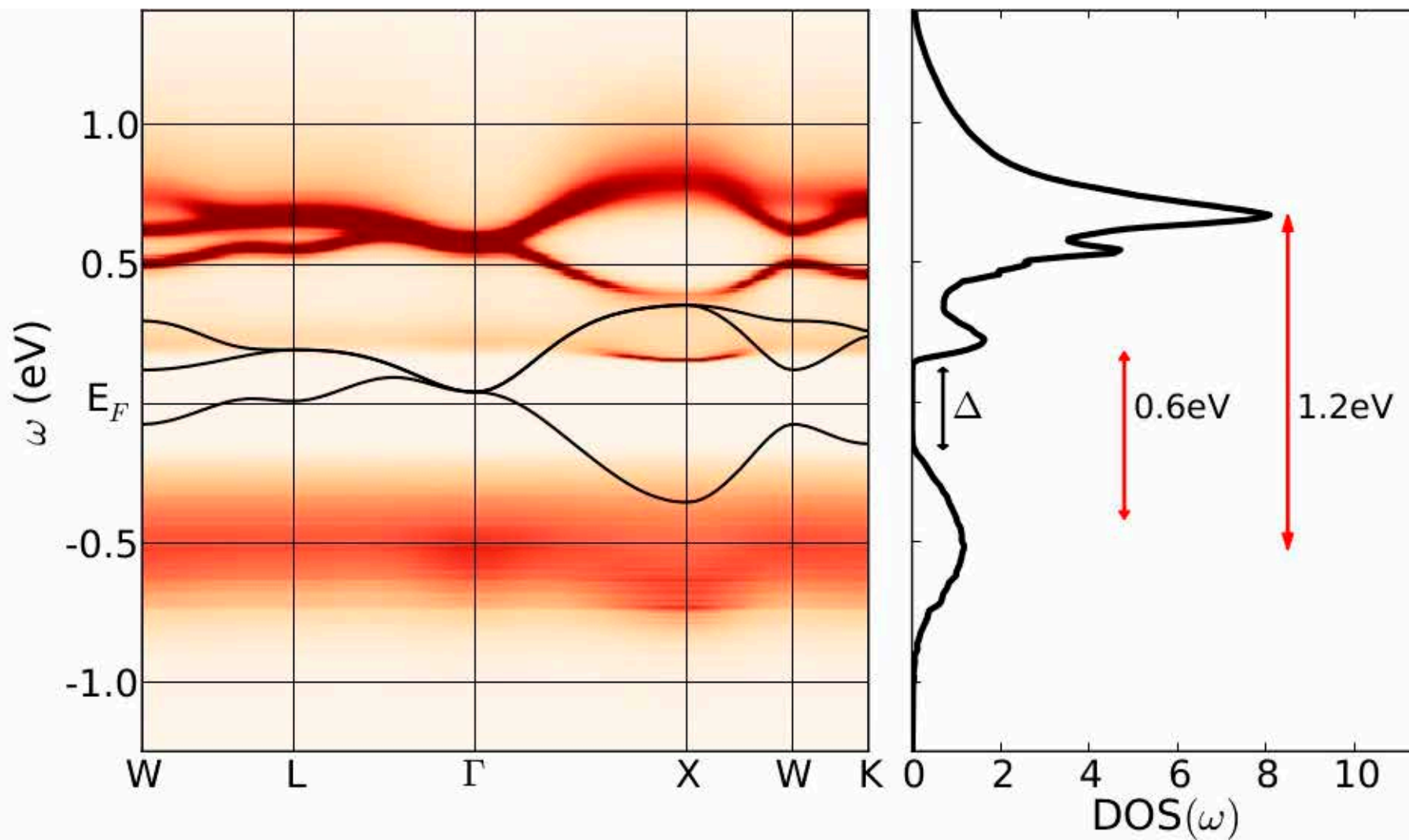
GTS: resistividad y coexistencia



GTS: resistividad y coexistencia



GTS: resultados teóricos

GTS: resultados teóricos

Conclusiones

- 20 años después de la formulación de DMFT, creemos tener el mejor candidato experimental a la transición de Hubbard – Mott.
- Primer trabajo experimental en cristales de GTS bajo presión: prueba el carácter de primer orden de la transición metal - aislador.
- Primera formulación DMFT+DFT hecha en el país.
- Acuerdo cuantitativo con experimentos y nuevos desafíos de física básica.
- Para el futuro: mejorar la descripción incorporando nuevos miembros de la familia y/o detalles (espín-órbita). ¡Más experimentos!

¡Muchas gracias!