



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

TESE DE DOUTORADO

CORRELAÇÃO ELETRÔNICA E MAGNETISMO EM SISTEMAS QUASE-UNIDIMENSIONAIS

por

Renê Rodrigues Montenegro Filho

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Banca Examinadora:

Prof. Mauricio Domingues Coutinho Filho (Orientador-UFPE)
Prof. Raimundo Rocha dos Santos (IF - UFRJ)
Prof. Eduardo Miranda (DF - UNICAMP)
Prof. André Luiz Malvezzi (DF – UNESP/Bauru)
Prof. Antônio Murilo S. Macêdo (DF-UFPE)
Prof. Ernesto Cameiro P. Raposo (DF-UFPE)

Recife - PE, Brasil
Agosto – 2006

Montenegro Filho, Renê Rodrigues

Correlação eletrônica e magnetismo em sistemas quase-unidimensionais / Renê Rodrigues Montenegro Filho. –

Recife : O autor, 2006.

xx 122 folhas : il., fig., tab.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física, 2006.

Inclui bibliografia.

1. Física da matéria condensada. 2. Elétrons fortemente correlacionados. 3. Ferrimagnetismo. 4. Modelo de Hubbard. I. Título.

530.41

CDD (22.ed.)

FQ2006-0010



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física - CCEN
Programa de Pós-Graduação em Física
Cidade Universitária - 50670-901 Recife PE Brasil
Fone (++ 55 81) 2126-8449/2126-8450 - Fax (++ 55 81) 3271-0359
<http://www.df.ufpe.br/pg> e-mail: posgrad@df.ufpe.br

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Tese de Doutorado

Renê Rodrigues Montenegro Filho

CORRELAÇÃO ELETRÔNICA E MAGNETISMO EM SISTEMAS QUASE-UNIDIMENSIONAIS

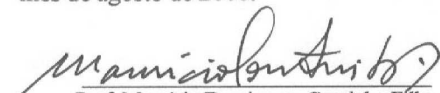
A Banca Examinadora composta pelos Professores Maurício Domingues Coutinho Filho (Presidente e Orientador), Antônio Murilo S. Macêdo, Ernesto Carneiro P. Raposo, todos da Universidade Federal de Pernambuco, Raimundo Rocha dos Santos, do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro, Eduardo Miranda, do Departamento de Física da Universidade Estadual de Campinas e André Luiz Malvezzi, do Departamento de Física da Faculdade de Bauru - UNESP, consideram o candidato:

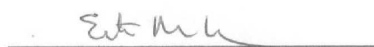
☒ Aprovado com Distinção

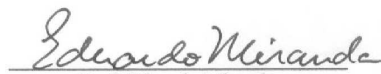
☐ Aprovado

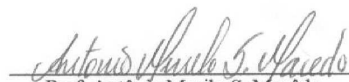
☐ Reprovado

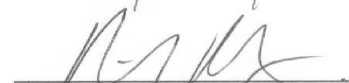
Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco aos onze dias do mês de agosto de 2006.


Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho
Presidente e Orientador


Prof. Ernesto Carneiro P. Raposo


Prof. Eduardo Miranda


Prof. Antônio Murilo S. Macêdo


Prof. Raimundo Rocha dos Santos


Prof. André Luiz Malvezzi

Dedico esta tese ao meu filho João, à minha esposa Sybele,
à minha mãe Dorinha e ao meu pai Renê.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus e a Nossa Senhora pela oportunidade de terminar esta tese, apelei diversas vezes aos dois ao longo deste doutorado.

Ao Prof. Maurício pela dedicação à minha formação acadêmica ao longo de todos esses anos e por ter me ajudado a superar várias das minhas limitações.

Aos meus pais pelo imprescindível apoio ao longo de todo o doutorado.

Aos irmãos Ana e Rony; e aos tios Leta, Titi e Mércio pela inestimável torcida.

À minha esposa Sybele, querida companheira durante toda esta jornada.

Ao meu filho João Gabriel pelas muitas alegrias que me propiciou.

Ao colega Mário Henrique pelas úteis discussões para a tese e pelas agradáveis conversas sobre os mais diversos temas.

A Leonardo Viana pela sua dedicação para que a rede do laboratório funcionasse adequadamente no início do meu doutorado.

À Profa. Sandra (esposa do Prof. Maurício) pela paciência demonstrada nos incontáveis dias em que eu e o Prof. Maurício trabalhávamos além do seu (dela) expediente normal.

Aos colegas de laboratório, Ernesto, Fidelis, Janete, Sérgio Apolinário, Sandoildo, Diego, Artur, Rafael, Ulisses, Eglânio, Diogo e Karlla, por terem formado um ambiente dos mais favoráveis para o meu aprendizado.

Aos colegas de Departamento; em particular, Gustavo, Roberto, Sergio Rodríguez, Ailton, Pedro e Maxwell pelas agradáveis discussões sobre física e outros temas.

Ao Prof. Malvezzi por ter me incentivado a implementar o método DMRG e pelo mini-curso, sobre este método, que ministrou no Departamento.

Aos integrantes dos corpos docente e administrativo do Departamento de Física pelo elevado profissionalismo com que realizam suas atribuições.

À Banca pelo trabalho de revisão.

À CAPES, CNPq, Finep e Facepe pelo apoio financeiro. Em particular, ao CNPq pela sua imprescindível contribuição para o avanço acentuado do processo científico no Brasil.

Resumo

Esta tese consiste no estudo de cadeias quase-unidimensionais ferrimagnéticas relacionadas a compostos inorgânicos tais como os fosfatos $A_3Cu_3(PO_4)_4$ (onde $A=Ca, Sr$ e Pb), bem como ao composto orgânico PNNBNO. A modelagem teórica é realizada através dos hamiltonianos de Hubbard, $t - J$ e Heisenberg nas cadeias AB_2 e ABC , os quais são investigados em vários regimes de acoplamento e preenchimento da banda. Além disso, também consideraremos o diagrama de fases da cadeia AB_2 de Heisenberg frustrada, relacionada ao composto $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$. Calculamos os estados de baixa energia através de diagonalização exata (algoritmo de Lanczos) e do grupo de renormalização da matriz de densidade.

Inicialmente consideramos as propriedades magnéticas das cadeias AB_2 e ABC de Hubbard em banda semi-cheia em função da repulsão coulombiana U . Revelamos numericamente a estrutura ferrimagnética do estado fundamental no limite de Heisenberg do modelo e para U pequeno. Em conexão com esta ordem, ambas as cadeias exibem três modos de onda de spin, os quais foram estudados em detalhe no limite Heisenberg. Um desses modos é antiferromagnético e necessita de uma energia finita para ser excitado. Esta excitação massiva é responsável por um platô na curva de magnetização em função do campo magnético em ambas as cadeias. Os outros modos são ferromagnéticos: um deles é o modo de Goldstone, induzido pela quebra espontânea da invariância de rotação do modelo; enquanto que o outro modo é massivo, com banda razoavelmente estreita no caso da cadeia ABC e banda sem dispersão (modo localizado) no caso da cadeia AB_2 .

Em seguida, apresentamos um amplo estudo do modelo de Hubbard na cadeia AB_2 dopada, nos regimes de fraco e forte acoplamento (hamiltoniano $t - J$), incluindo o limite U -infinito. Devido à topologia especial de sua célula unitária, a cadeia exhibe

uma grande variedade de fases quando o estado ferrimagnético ($n = 1$) é dopado com buracos ($\delta = 1 - n$). Nos regimes de fraco e forte acoplamento ($U \neq \infty$) para $\delta \ll 1$, o estado ferrimagnético ($\delta = 0$) cede lugar a estados espirais de spin; enquanto que no limite U -infinito ($J = 0$), observamos o estado ferromagnético metálico de Nagaoka. Aumentando a dopagem, o sistema exhibe separação de fases antes de atingir um estado RVB (*resonating valence bond*) de curto alcance com *gap* de spin e isolante de Mott em $\delta = 1/3$. Além disso, para $\delta > 1/3$ observamos um *crossover*, que antecipa o comportamento líquido de Luttinger encontrado para $\delta > 2/3$.

Finalmente, tratamos do efeito de frustração magnética pela inclusão de uma interação competitiva J_2 no modelo de Heisenberg. Em particular, observamos que a ordem ferrimagnética é estável para $J_2 \lesssim 0.34$. Para $0.34 \lesssim J_2 \lesssim 0.44$, o sistema exhibe ordem magnética *canted* na sub-rede B enquanto que a ordem magnética dos sítios A não se altera em relação à fase ferrimagnética. Para $J_2 \gtrsim 0.44$ a fase *canted* é suprimida em favor de uma fase espiral em ambas as sub-redes. Além disso, para $J_2 \gtrsim 0.83$ a configuração estável corresponde a três cadeias lineares antiferromagneticamente acopladas.

Palavras-chave: Física da Matéria Condensada, Elétrons Fortemente Correlacionados, Ferrimagnetismo, Modelo de Hubbard.

Abstract

This work concerns the study of ferrimagnetic quasi-one-dimensional chains related to inorganic compounds, such as the fosfates $A_3Cu_3(PO_4)_4$ (with $A=Ca, Sr$ e Pb), as well as the organic compound PNNBNO. The theoretical modeling is based on Hubbard, $t - J$ and Heisenberg models on the AB_2 and ABC chains, which we investigate in various coupling regimes and band filling. Furthermore, we also consider the phase diagram of the frustrated AB_2 Heisenberg chain, related to the compound $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$. We calculate the low energy states by exact diagonalization (Lanczos algorithm) and the density matrix renormalization group.

Initially we consider the magnetic properties of the half-filled AB_2 and ABC Hubbard models as function of the Coulomb repulsion U , revealing the ferrimagnetic structure of the ground state in weak coupling and in the Heisenberg limit. As a consequence of the ferrimagnetic order, both chains exhibit three spin wave modes. One of them is a massive antiferromagnetic excitation, being responsible by a plateau in the magnetization curve of both chains. The other two modes are ferromagnetic: the Goldstone mode, induced by broken rotation invariance of the model; while the other is massive, with a narrow band in the ABC chain and flat band in the AB_2 chain case.

In the sequence, we study the Hubbard model on the doped AB_2 chain, in weak and strong coupling ($t - J$ model), including the infinite- U limit. Due to the special unit cell topology, the chain displays a rich variety of phases through the hole doping (δ) of the ferrimagnetic ground state. In weak and strong coupling ($U \neq \infty$) for $\delta \ll 1$, spiral states develop, while in the infinite- U limit we observe the Nagaoka metallic ferromagnetic state. For higher doping the system phase separates before reaching a Mott insulating phase of short-range RVB states at $\delta = 1/3$. Moreover,

for $\delta > 1/3$ we observe a crossover, which anticipates the Luttinger liquid behavior for $\delta > 2/3$.

Finally, we treat the effect of magnetic frustration by the inclusion of a competitive interaction, J_2 , into the Heisenberg model. In particular, we observe that the ferrimagnetic order is stable up to $J_2 \sim 0.34$. For $0.34 \lesssim J_2 \lesssim 0.44$, the system exhibits a canted order inside the B sublattice, while the spins of the A sublattice remain ferromagnetically ordered. For $J_2 \gtrsim 0.44$ the canted phase is unstable and a spiral ordering develops. Moreover, for $J_2 > 0.83$ the stable configuration is one with three antiferromagnetic coupled linear chains.

Keywords: Condensed Matter Physics, Strongly Correlated Electron Systems, Ferrimagnetism, Hubbard Model.

Conteúdo

1	Introdução	2
2	Compostos de Metais de Transição	10
2.1	Variáveis Relevantes	11
2.2	Hamiltonianos Efetivos	14
3	Cálculo do Estado Fundamental e Primeiras Excitações do Hamiltoniano de Hubbard	20
3.1	Espaço de Hilbert e Simetrias do Modelo de Hubbard	21
3.2	Algoritmo de Lanczos para Diagonalização Exata	23
3.3	Grupo de Renormalização da Matriz de Densidade	30
4	Cadeias AB_2 e ABC em Banda Semi-Cheia	36
4.1	Limite sem interação: $U = 0$	36
4.2	Simetria local da cadeia AB_2 e sua relação com a cadeia alternada spin-1/2/spin-1	40
4.3	$U \neq 0$: Ferrimagnetismo	44
4.4	Excitações Magnéticas	48

4.5	Platôs de Magnetização e Dependência dos <i>Gaps</i> de Ondas de Spin com U	52
4.6	Conclusões	55
5	Cadeia AB_2 Dopada	57
5.1	Descrição do Modelo	58
5.2	Estados espirais e Ferromagnetismo Saturado	63
5.3	Separação de Fases e Estados RVB	71
5.4	Comportamento do tipo Líquido de Luttinger	77
5.5	Cálculo Variacional para $U = \infty$ e $\delta \leq 1/3$	88
5.6	Sumário e Conclusões	92
6	Cadeia AB_2 com Interações Competitivas	93
6.1	Descrição do Modelo	94
6.2	Aspectos Gerais do Diagrama de Fases	95
6.3	Transição em $J = J_{t1}$: Ferrimagnetismo de Lieb para a Fase <i>Canted</i> .	97
6.4	Transições em J_{t2} e J_{t3}	109
6.5	Sumário e Conclusões	111
7	Resumo das Conclusões	112
	Referências Bibliográficas	114

Lista de Figuras

1.1	(a) Visão geral da curva do produto da susceptibilidade paramagnética χ pela temperatura T em função da temperatura e (b) seu comportamento em baixas temperaturas para o composto orgânico ferrimagnético PNNBNO. (c) Calor específico em função da temperatura para o composto orgânico ferrimagnético PNNBNO. (Figuras reproduzidas da Ref. [6].)	4
1.2	Ilustração das cadeias AB_2 (a) e ABC (b), bem como das ordens ferrimagnéticas de ambas as cadeias. Os círculos representam centros magnéticos de spin $1/2$, enquanto que as linhas ilustram os acoplamentos de <i>superexchange</i> antiferromagnéticos.	5
1.3	(a) Cadeias de trímeros encontradas em compostos do tipo $A_3Cu_3(PO_4)_4$. (b) Interações magnéticas entre íons de cobre: a interação entre-trímeros J_2 é muito menor que as interações intra-trímeros J_1 e J'_1 ; entretanto, ordem ferrimagnética é observada nesses compostos. (Figuras reproduzidas da Ref. [9].)	6

1.4	(a) Estrutura da cadeia em cristais PNNBNO. (b) Ilustração da estrutura da cadeia com os acoplamentos intra-moleculares ferromagnéticos (J_F) e antiferromagnético (J_{AF}), bem como o acoplamento intermolecular antiferromagnético (J'_{AF}). (c) Estrutura ferrimagnética no limite extremo $J_F \rightarrow \infty$. (Figuras reproduzidas da Ref. [6].)	7
1.5	Cadeia AB_2 frustrada.	8
1.6	(a) Padrão de exchanges utilizado no estudo do composto $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$ (azurita), onde os círculos representam spins 1/2. (b) Representação esquemática do estrutura cristalina da azurita. (Figuras reproduzidas da Ref. [37].)	9
2.1	Estrutura cristalina do óxido de manganês (MnO). O tipo de ordenamento dos spins também está indicado na figura. (Reproduzido da Ref. [40].)	12
2.2	(a) Arranjo octaédrico de um íon complexo, o círculo cheio representa o cátion, enquanto que os círculos vazios representam os ânions ligantes. (b) Quebra da degenerescência orbital do metal, devida ao campo cristalino.	14
2.3	Ângulo formado entre os íons metálicos e o ligante intermediador da interação.	15
2.4	Transição metal isolante de Mott para o modelo de Hubbard de uma banda com energia local ϵ_0 e repulsão coulombiana U	16

- 2.5 Ilustração do comportamento das bandas de energia para compostos de metal de transição. Na figura, U_{dd} é a repulsão coulombiana local nos orbitais d, $\Delta = \epsilon_d - \epsilon_p$ e Δ_c é o *gap* de carga. As sigla BSH e BIH denotam a banda superior de Hubbard e a banda inferior de Hubbard, respectivamente, desdobradas da banda d para $U_{dd} = 0$. . . 18
- 3.1 Superbloco: estrutura básica de execução do DMRG: bloco da esquerda B_l de comprimento linear l , bloco da direita B_r de comprimento linear r , sítio da esquerda S_l e sítio da direita S_r 31
- 3.2 Um ciclo completo do DMRG de tamanho finito (uma *sweep*). 34
- 4.1 Ilustração da cadeia SSS. Na figura são apresentados os três sítios da célula unitária, bem como as conexões em que o hopping é $t(\equiv 1)$ ou β . 38
- 4.2 Bandas eletrônicas das cadeias AB₂ (a) e ABC (b) no limite *tight-binding*. Também mostramos o gap Δ entre as bandas dispersivas da cadeia ABC. 40
- 4.3 Mapeamento que gera a cadeia linear efetiva (CLE) a partir da cadeia SSS. Lembramos que para a cadeia AB₂ (ABC), $S_1 \equiv A (\equiv A)$, $S_2 \equiv B_1 (\equiv B)$ e $S_3 \equiv B_2 (\equiv C)$ 45
- 4.4 Fator de estrutura magnético $S(q)$ definido na CLE gerada a partir das cadeias AB₂ (a) e ABC (b) no limite Heisenberg ($U \gg t$). O tamanho do sistema varia de $N_c = 3$ até $N_c = 10$. A figura inserida mostra a dependência com o tamanho dos picos ferromagnético [$S(0)$] e antiferromagnético [$S(\pi)$]. Linhas tracejadas são guias para o olho. 46

-
- 4.5 Fator de estrutura magnético $S(q)$ para as cadeias AB_2 (a) e ABC (b) usando o modelo de Hubbard para $U = 2$. O tamanho do sistema varia de $N_c = 2$ a $N_c = 5$. A figura inserida apresenta a dependência com o tamanho dos picos ferromagnético $[S(0)]$ e antiferromagnético $[S(\pi)]$. Linhas tracejadas são guias para o olho. 47
- 4.6 Magnetização por sítio $\langle S_i^z \rangle$ e valor médio da dupla ocupação $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$ como função de U para $N_c = 5$ nas cadeias AB_2 e ABC no setor de spin $S^z = S_g$. Linhas tracejadas são guias para o olho. 48
- 4.7 Modos de onda de spin ferromagnéticos (F1 e F2) e antiferromagnéticos (AF) para as cadeias AB_2 (a) e ABC (b) para $N_c = 10$ (círculos), 8 (triângulo para baixo), 6 (triângulo para cima) no modelo de Heisenberg. Linhas sólidas são resultados de TOSL da Ref. [26] (AB_2) e Ref. [67] (ABC); linhas tracejadas são guias para o olho. 49
- 4.8 Ilustração do desacoplamento da cadeia AB_2 induzido pela excitação ferromagnética F2. A elipse está representando que os sítios B_1 e B_2 envolvidos estão em um estado singleto. 50
- 4.9 Magnetização como função do campo magnético aplicado B para o modelo de Heisenberg nas cadeias AB_2 (a) e ABC (b). O detalhe (1) mostra um estudo do comportamento com o tamanho da largura do degrau em $m = 1/3$; o detalhe (2) apresenta a curva traçada através dos pontos médios dos degraus de magnetização de sistemas finitos, exceto em regiões de platô. 54
-

- 4.10 *Gaps* AF (Δ_{S+}) e F2 (Δ_{S-}) de ondas de spin em unidades de t para a cadeia AB_2 (a) e ABC (b) como função de U para o modelo de Hubbard. Linha sólida (tracejada) é o *gap* AF (F2) para o modelo de Heisenberg com $J = 4t^2/U$; linhas pontilhadas são guias para o olho. 56
- 5.1 Resultados de DMRG para a diferença entre a energia mais baixa do setor de simetria $(-)^x(+)^{N_c-x}$ e o estado fundamental para $N = 100$ ($N_c = 33$) para (a) $U = 2$ com $\delta = 0.32$ (triângulo), $\delta = 0.26$ (losango) e $\delta = 0.18$ (triângulo invertido); (b) $U = \infty$ para $\delta = 0.32$ (triângulo), $\delta = 0.28$ (losango) e $\delta = 0.24$ (triângulo invertido), considerando 108 estados por bloco (símbolos vazios) e 216 estados por bloco (símbolos cheios). Média das paridades locais, p , como função de δ para (c) $U = 2$ e (d) $U = \infty$, o termo DE indica que o cálculo foi realizado através de diagonalização exata. (e) Resultados de diagonalização exata para $|z^{(q)}|$. Linhas tracejadas são guias para o olho. 60
- 5.2 Regiões homogêneas ($p = \pm 1$) e não-homogêneas em função da dopagem δ e do acoplamento magnético J para o modelo $t - J$. A linha com círculos e a linha reta em $\delta = 1/3$ limitam a região em que o sistema exhibe separação de fases ($-1 < p < 1$). 63
- 5.3 (a) e (b): Fator de estrutura magnético para $U = 2$ e $N = 100$ na região de baixa dopagem. (c) Spin total por célula, S/N_c , em função de δ para $U = \infty$. O termo DE em (c) indica que o cálculo foi realizado através de diagonalização exata e S_{max}/N_c é a curva para o estado completamente polarizado. 64

- 5.4 Resultados de diagonalização exata para (a) N_c vezes o *gap* de energia Δ_0 entre a energia do estado ferromagnético ($\Phi = \Phi_F$) e a energia mais baixa para um fluxo Aharanov-Bohm Φ como função de $\tilde{\Phi} = |\Phi - \Phi_F|$ para $\delta = 1/6$ e $N_c = 4$ (linha traço-ponto), 6 (linha tracejada) and 8 (linha sólida). Cálculos de diagonalização exata para o comportamento com $\tilde{\Phi}$ da função de correlação de spin $\langle \mathbf{S}_{\text{cell}}(l_0) \cdot \mathbf{S}_{\text{cell}}(l_0 + l) \rangle$ entre os spins celulares como função de l (b) e o fator de estrutura magnético como função do vetor de onda da rede q para $\delta = 1/6$. (d) Fator de estrutura de carga calculado no estado de energia mais baixa para qualquer $\tilde{\Phi}$ e $\delta = 1/6$ com $N_c = 4$ ($\bullet$), 6 ($\blacktriangle$) e 8 (∇). 66
- 5.5 (a) e (b): Cálculo de DMRG para o fator de estrutura magnético para uma cadeia com $N = 98$ e $J = 0.3$ para as dopagens indicadas. (c) Pico do fator de estrutura magnético para uma cadeia com $N = 98$ e $J = 0.3$ em função da dopagem. (d) Resultados de diagonalização exata para a linha de transição $J_c(\delta)$. Cálculos realizados no modelo $t - J$ 69
- 5.6 Cálculo de DMRG para algumas propriedades do estado fundamental para $\delta = 0.18$ ($U = 2$) e $\delta = 0.28$ ($U = \infty$) em uma cadeia com $N = 100$. (a) Função de correlação $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_i \rangle$ para $U = 2$. (b) Valor esperado de S_i^z para $U = \infty$ no setor $S^z = S_g$. Função de correlação de spin $\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle_i$ para (c) $U = 2$ e (d) $U = \infty$. Notação da cadeia efetiva linear (Fig. 4.3): ($\bullet$) identifica sítios A enquanto ($\circ$) identifica $B_1 + B_2$ da mesma célula. $-(+)$ indica paridades locais ímpares (pares). Linhas tracejadas são guias para o olho. 70

- 5.7 Cálculo de DMRG para algumas propriedades locais do estado fundamental para $\delta = 0.18$ ($U = 2$) e $\delta = 0.28$ ($U = \infty$) em uma cadeia com $N = 100$. Valor esperado da densidade de buracos $n_{h,i}$ para (a) $U = 2$ e (b) $U = \infty$. Notação da cadeia efetiva linear (Fig. 4.3): $(\bullet)$ identifica sítios A enquanto $(\circ)$ identifica $B_1 + B_2$ da mesma célula. (c) Ilustração do estado fundamental para $U = \infty$ no regime de separação de fases: ligações singleto são representados por elipses e buracos por círculos. $-(+)$ indica paridades locais ímpares (pares). Linhas tracejadas são guias para o olho. 72
- 5.8 Cálculos de DMRG para o modelo $t - J$ com $J = 0.3$ e $\delta = 76/98$ em uma cadeia com $N = 98$. (a) Fator de estrutura magnético $S(q)$ e (b) Função de correlação de spin $\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle_i$. $-(+)$ indica paridades locais ímpares (pares). A linha tracejada serve de guia para o olho. . . 74
- 5.9 Resultados de DMRG para (a) a dependência com o tamanho da cadeia do gap de carga (Δ_c) e do gap de spin (Δ_s) em função de $1/N_c$ para $\delta = 1/3$: linhas sólidas são ajustes polinomiais. Resultados de diagonalização exata para (b) o valor esperado de $S_A^z(l)$, $S_B^z(l)$ e da função de correlação $\langle \mathbf{S}_{B_1}(l) \cdot \mathbf{S}_{B_2}(l) \rangle$ no setor de spin $S^z = 1$ em função do rótulo l da célula. Os sinais $\pm$ abaixo do eixo horizontal em (b) indicam a paridade da célula. 74
- 5.10 Extrapolações para o limite termodinâmico ($N_c \rightarrow \infty$) do gap de spin Δ_s utilizando-se seus valores calculados através de DMRG para sistemas com $N_c = 9, 17, 25, 33$ para o modelo de Hubbard (a) e $t - J$ (b) em $\delta = 1/3$. (c) Cálculo de DMRG para o gap de carga do modelo $t - J$ 76

- 5.11 Funções de correlação de spin (a) $\langle \mathbf{S}_A(l_c) \cdot \mathbf{S}_A(l) \rangle$, (b) $\langle \mathbf{S}_A(l_c) \cdot \mathbf{S}_B(l) \rangle$ e (c) $\langle \mathbf{S}_B(l_c) \cdot \mathbf{S}_B(l) \rangle$ como função de $l - l_c$ na CLE (Fig. 4.3) com $\delta = 1/3$ e $N_c = 33$ usando DMRG; nestas expressões, l_c denota a célula central; ($\diamond$) se refere ao acoplamento $U = 2$ e ($\blacklozenge$) a $U = \infty$. Linhas tracejadas são guias para o olho. (d) Ilustração do estado fundamental para $\delta = 1/3$, ligações do tipo singleto são representadas por elipses e buracos por círculos. 78
- 5.12 (a) Resultados de diagonalização exata para as funções de correlação entre spins mais próximos em função do rótulo l das células, com $\mathbf{S}_B \equiv \mathbf{S}_{B_1} + \mathbf{S}_{B_2}$. (b) Ilustração do estado fundamental para o isolante em $\delta = 1/3$ dopado com dois buracos: ligações do tipo singleto são representadas por elipses e buracos por círculos. (c) Resultados de diagonalização exata para as funções de correlação de spin entre os sítios B de uma mesma célula, $\langle \mathbf{S}_{B_1}(l_0) \cdot \mathbf{S}_{B_2}(l_0) \rangle$, densidades de elétrons nos sítios A, $\langle n_A(l_0) \rangle$, e nos sítios $B \equiv B_1 + B_2$, $\langle n_B(l_0) \rangle \equiv \langle n_{B_1}(l_0) + n_{B_2}(l_0) \rangle$. (d) Resultados de diagonalização exata para as funções de correlação de spin entre vizinhos mais próximos como função de δ , com $\mathbf{S}_B \equiv \mathbf{S}_{B_1} + \mathbf{S}_{B_2}$. Em (a), (c) e (d) l_0 denota uma célula arbitrária. 80
- 5.13 Resultados de diagonalização exata para a susceptibilidade de carga χ , a velocidade das excitações de carga u_ρ e o peso de Drude D , para $U = 2$ [(a),(b) e (c)] e $U = \infty$ [(d), (e) e (f)], com $N_c = 4$ ($\bullet$), 6 ($\triangle$) e 8 ($\blacktriangledown$). 82

- 5.14 Resultados de DMRG para o (a) gap de carga Δ_c como função de $1/N_c$ para $\delta = 2/3$ usando DMRG; o destaque apresenta os valores extrapolados para o limite termodinâmico do gap de carga como função de U . Cálculos de DMRG para o (b) gap de spin Δ_S como função de $1/N_c$ para $U = 2$ (●) e $U = \infty$ (◆). Linhas sólidas são ajustes polinomiais, exceto para o destaque de (a), onde foi usada uma forma com singularidade essencial para $U \rightarrow 0$ explicada no texto. 83
- 5.15 (a) Resultados de diagonalização exata para a razão $R=u_\rho/\sqrt{D\chi/\pi}$.
 (b) Resultados de diagonalização exata para K_ρ em função de δ 86
- 5.16 Funções de correlação de spin $C(l)$ para $U = 2$ (d) e $U = \infty$ (e) para $\delta = 88/106$ e $N = 106$ usando DMRG; linhas sólidas são ajustes à Eq. (5.27). 86
- 5.17 (a) Resultados de diagonalização exata para a razão $R=u_\rho/\sqrt{D\chi/\pi}$ em função de δ para vários valores de J [legenda em (b)] no modelo $t - J$. (b) Resultados de diagonalização exata para K_ρ em função de δ para o modelo $t - J$ com os valores de J indicados. 87
- 5.18 Energia por célula unitária, ϵ , em função da fração $x = L_-/N_c$ para $\delta = 0.28$. A região física também está identificada na figura. 90
- 6.1 Spin total versus frustração J . Nesta figura estão indicados os pontos de transição $J_{t1} \approx 0.34$ e $J_{t2} \approx 0.44$. O rótulo DE indica que o cálculo foi realizado através de diagonalização exata 95

- 6.2 Fator de estrutura magnético nas sub-redes A (a) e B_1 (b) para diversos valores de J em um sistema com $N_c = 10$ calculados com diagonalização exata. A legenda de (b) é a mesma de (a). (c) Função de correlação $C_{B_1 B_2}$ calculada com DMRG para um sistema de 25 células. (d) Orientação dos spins na fase *canted*. 98
- 6.3 (a) e (b): Fator de estrutura magnético $S(q)$ [Eq. (5.6)] definido na CLE para os valores de J indicados. (c) Função de correlação $C(l)$ [Eq. (5.26)] definida na CLE com os valores de J indicados à direita de cada gráfico. 101
- 6.4 (a) Cálculo de DMRG para o número total de células N_S em que os sítios B_1 e B_2 se encontram em um estado singleto para uma cadeia com $N_c = 25$ em função de J ; também está indicado o valor do spin total S_g . (b) Número médio de singletos em função da posição para os valores J indicados nos gráficos. 103
- 6.5 (a) Comportamento do modo ferromagnético F2 com o acoplamento J calculado através de diagonalização exata em um sistema de 10 células ($\bullet$) e da aproximação discutida no texto (linha sólida); de cima para baixo encontramos as curvas para $J = 0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30, 0.31, 0.32, 0.33, 0.34, 0.341, 0.342, 0.343$ e 0.344 . (b) Variação com J do *gap* $\Delta(J)$ entre o estado fundamental e o modo ferromagnético, bem como a largura de banda δ do modo F2. 108

6.6	(a) Cálculo de DMRG do fator de estrutura magnético $S(q)$ em uma cadeia com $N_c = 25$ para os valores de J indicados. (b) Picos em $S(q)$ em função de J ; na legenda, o termo DE indica que o cálculo foi realizado através de diagonalização exata. (c) Cálculo de diagonalização exata para as quantidades indicadas em um sistema com $N_c = 8$ e $J = 0.9$. (d) Ilustração do estado fundamental na fase com três cadeias antiferromagnéticas acopladas.	110
-----	--	-----

Lista de Tabelas

4.1	Auto-estados do operador de troca dos sítios B_{1l} e B_{2l} da célula l . Também estão expressos a paridade do estado ($p_l = \pm 1$), o valor do spin total S , a denominação e a quantidade de sítios duplamente ocupados $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$ de cada estado.	42
-----	---	----

Capítulo 1

Introdução

As últimas duas décadas têm observado um grande esforço da comunidade científica no estudo de sistemas de elétrons fortemente correlacionados em materiais de baixa dimensionalidade, tipicamente compostos de metais de transição em estruturas bidimensionais e unidimensionais. Na maioria dos casos, cadeias e planos de íons magnéticos são encontrados em sólidos tridimensionais, dispostos espacialmente de forma tal que podemos desprezar o acoplamento entre planos ou cadeias. Um dos casos mais relevantes de sistemas dessa natureza são os supercondutores de alta temperatura crítica (e. g., $\text{La}_{2-\delta}\text{Sr}_\delta\text{CuO}_4$) nos quais acreditam-se que suas fases não-triviais estão intrinsecamente relacionadas a planos de óxido de cobre (CuO_2) presentes nesses compostos [1, 2]. No material-pai (composto precursor) isolante os planos exibem ordem antiferromagnética de longo alcance, a qual evolui através de dopagem (δ) para o estado supercondutor. Outros fenômenos quânticos expressivos são observados em sistemas unidimensionais e quase-unidimensionais. Entre eles, mencionamos a verificação de líquidos quânticos de spin com *gap* para excitações

magnéticas em compostos do tipo escada tais como o $(VO)_2P_2O_7$, bem como os cuprados de fórmulas químicas $SrCu_2O_3$ e $Sr_{14}Cu_{24}O_{41}$ [3]. Devido ao curto alcance das correlações de spin nesses sistemas, o seu estado fundamental é um ótimo exemplo de estados do tipo *resonating valence bond* (RVB) [4]. Além disso, foi observado que o composto $Sr_{14}Cu_{24}O_{41}$ dopado com Ca exibe supercondutividade quando submetido a altas pressões [5].

Ao contrário de sistemas escada, que apresentam um estado fundamental singlete rotacionalmente invariante, vários compostos ferrimagnéticos quase-unidimensionais foram sintetizados nos últimos anos. Sistemas ferrimagnéticos tipicamente apresentam redes bipartidas e exibem ferromagnetismo não-saturado devido predominantemente a acoplamentos antiferromagnéticos entre suas sub-redes; expondo, por conseguinte, ambas as ordens ferromagnética e antiferromagnética de longo alcance. A caracterização experimental desses compostos se dá pela identificação de um mínimo na curva χT versus T a uma temperatura $T = T_{\text{mín}}$, como exemplificado na Fig. 1 (a) para o ferrimagneto orgânico PNNBNO. Diminuindo a temperatura a partir de $T_{\text{mín}}$, a curva χT exibe um crescimento acentuado, Fig. 1(b), antes do estabelecimento de ordem magnética tridimensional em baixíssimas temperaturas, tipicamente $T < 3K$, cuja assinatura é um pico- λ na curva do calor específico, como mostrado na Fig. 1(c). Duas classes principais de compostos ferrimagnéticos são conhecidas. Na primeira delas, o número de sítios magnéticos é o mesmo nas duas sub-redes e o momento magnético resultante é devido a spins de magnitude distintas em sub-redes diferentes. Exemplos de cadeias ferrimagnéticas quase-unidimensionais pertencentes a esta classe são as cadeias bimetalicas NiCu e MnCu. No composto $NiCu(pba)(H_2O)_3 \cdot 2H_2O$, íons Cu^{2+} ($S=1/2$) e Ni^{2+} ($S=1$) são dispostos alternadamente em uma linha (cadeia spin-1/2/spin-1); o mesmo ocorrendo no composto

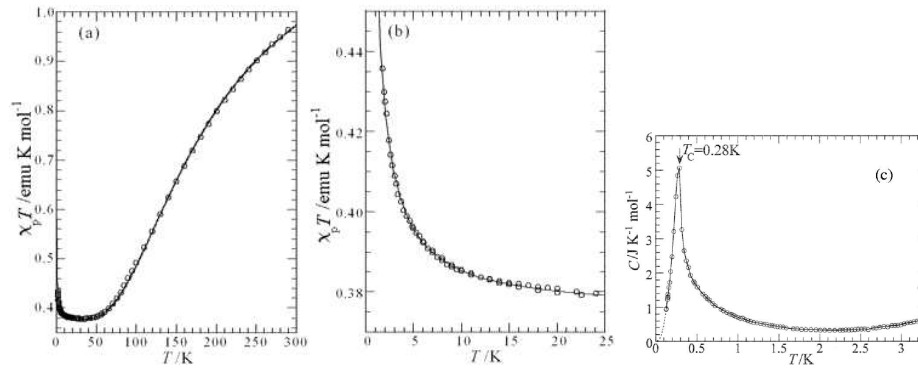


Figura 1.1: (a) Visão geral da curva do produto da susceptibilidade paramagnética χ pela temperatura T em função da temperatura e (b) seu comportamento em baixas temperaturas para o composto orgânico ferrimagnético PNNBNO. (c) Calor específico em função da temperatura para o composto orgânico ferrimagnético PNNBNO. (Figuras reproduzidas da Ref. [6].)

$\text{MnCu}(\text{pba})(\text{H}_2\text{O})_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (cadeia spin-1/2/spin-5/2), considerando-se o íon Mn^{2+} ($S=5/2$) em vez de Ni^{2+} . Na segunda classe de sistemas ferrimagnéticos, os spins dos sítios são os mesmos em ambas as sub-redes, todavia a topologia da célula unitária induz um estado fundamental com magnetização não-nula. Esta classe de sistemas representa o centro da nossa pesquisa. Em particular, estamos interessados em cadeias do tipo AB_2 [7] e ABC [8] ilustradas na Fig. 1.2, as quais apresentam acoplamentos antiferromagnéticos homogêneos e uma célula unitária constituída de três centros paramagnéticos com spin 1/2.

Cadeias ferrimagnéticas desta natureza são observadas em compostos de diversas famílias. Uma dessas famílias inclui fosfatos de fórmula química $\text{A}_3\text{Cu}_3(\text{PO}_4)_4$, onde $\text{A}=\text{Ca}$ [9, 10, 11, 12], Sr [9, 13, 11, 12] e Pb [9, 14, 12]. Esses compostos exibem linhas constituídas de aglomerados de três íons magnéticos (trímeros) interagindo antiferromagneticamente, como ilustrado na Fig. 1.3. Embora o acoplamento entre-trímeros seja muito mais fraco que a interação intra-trímeros, aquele

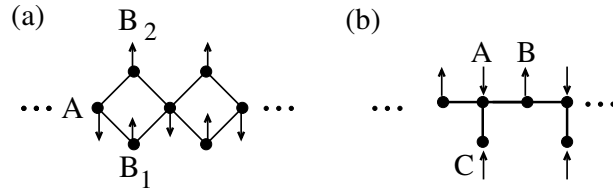


Figura 1.2: Ilustração das cadeias AB₂ (a) e ABC (b), bem como das ordens ferrimagnéticas de ambas as cadeias. Os círculos representam centros magnéticos de spin 1/2, enquanto que as linhas ilustram os acoplamentos de *superexchange* anti-ferromagnéticos.

se mostra suficiente para estabelecer um estado fundamental ferrimagnético. O primeiro composto ferrimagnético orgânico sintetizado, o PNNBNO [6], também está estreitamente relacionado com as cadeias AB₂ e ABC, visto que o PNNBNO também apresenta uma célula unitária constituída de três radicais paramagnéticos de spin 1/2, como mostrado na Fig. 1.4. Além disso, graças a uma simetria local característica [15, 16], uma fração finita do espectro da cadeia AB₂ é idêntica ao espectro da cadeia spin-1/2/spin-1 (NiCu) [17]. Ainda em relação a cadeias AB₂, gostaríamos de mencionar que essas representam uma rota alternativa para a observação de fenômenos quânticos bidimensionais através de sistemas unidimensionais [18, 19]. Por outro lado, desde a descoberta de vários compostos orgânicos ferromagnéticos quase-unidimensionais, e. g., o Poly-BIPO [20] e o p-NPNN [21], vários esforços foram dedicados para a elucidação dos mecanismos físico-químicos responsáveis pela ordem magnética desses polímeros. O Poly-BIPO, em particular, apresenta uma estrutura do tipo ABC, Fig. 1.2 (b), onde os sítios A e B representam átomos de carbono e os sítios C estão relacionados a radicais com um elétron desemparelhado. Ovchinnikov [8] propôs que a magnetização espontânea desses materiais seria de natureza puramente topológica, ou seja, devido à diferença extensiva

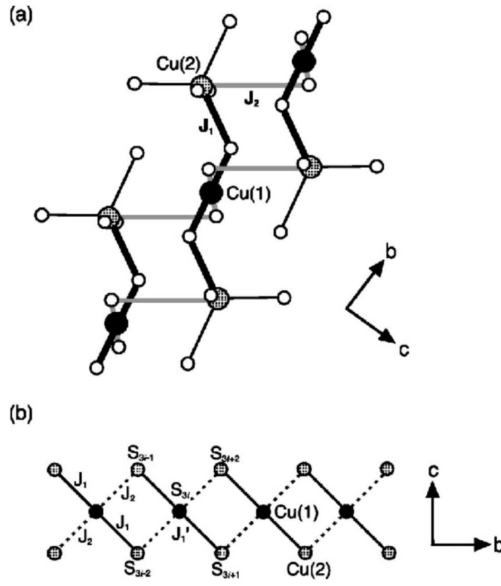


Figura 1.3: (a) Cadeias de trímeros encontradas em compostos do tipo $A_3Cu_3(PO_4)_4$. (b) Interações magnéticas entre íons de cobre: a interação entre-trímeros J_2 é muito menor que as interações intra-trímeros J_1 e J'_1 ; entretanto, ordem ferrimagnética é observada nesses compostos. (Figuras reproduzidas da Ref. [9].)

entre a quantidade de sítios das duas sub-redes. Conseqüentemente, segundo esse modelo, o Poly-BIPO e compostos similares seriam, de fato, ferrimagnetos, ou seja, deveriam exibir as assinaturas termodinâmicas expostas na Fig. 1.4, o que, até onde sabemos, não foi detectado experimentalmente.

A primeira parte dos resultados originais desta tese (Capítulos 4, 5 e 6) [16, 22] consiste no estudo teórico do comportamento quântico de cadeias unidimensionais ferrimagnéticas modeladas pelos hamiltonianos de Hubbard, Heisenberg e $t - J$ através de métodos numéricos. Em particular, consideramos os efeitos de dopagem e de variações da repulsão coulombiana no espectro de baixas energias desses sistemas.

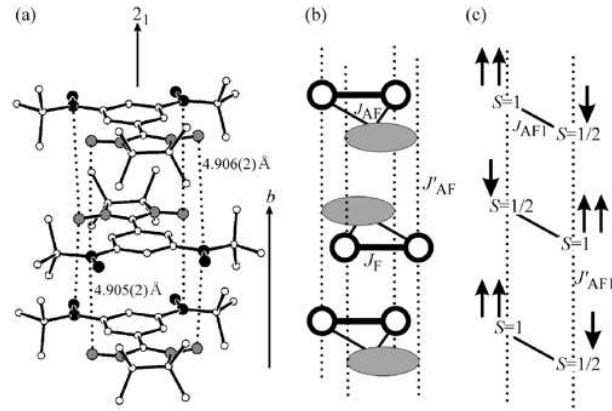


Figura 1.4: (a) Estrutura da cadeia em cristais PNNBNO. (b) Ilustração da estrutura da cadeia com os acoplamentos intra-moleculares ferromagnéticos (J_F) e antiferromagnético (J_{AF}), bem como o acoplamento inter-molecular antiferromagnético (J'_{AF}). (c) Estrutura ferrimagnética no limite extremo $J_F \rightarrow \infty$. (Figuras reproduzidas da Ref. [6].)

Estudos preliminares destes modelos foram realizados através de vários métodos numéricos e analíticos para diversos regimes de acoplamento e ocupação eletrônica. Para semi-preenchimento da banda, o estado fundamental ferrimagnético das cadeias AB_2 [7, 23, 24] e ABC [25, 23] foi explicitado para o modelo de Hubbard e à luz do modelo de Heisenberg quântico na cadeia AB_2 [26, 27]. Além disso, os comportamentos críticos dos modelos de Heisenberg quântico anisotrópico [15] e isotrópico [28, 29] na cadeia AB_2 também foram considerados, incluindo sua versão esférica [30], e a mecânica estatística do modelo clássico [31]. Cadeias AB_2 de Hubbard dopadas foram estudadas através de métodos Hartree-Fock, Monte Carlo quântico e diagonalização exata nos limites de repulsão coulombiana U fraca e forte [7], incluindo também o modelo $t - J$ [19] estudado via grupo de renormalização da matriz de densidade e *ansätze* variacionais recorrentes, bem como o limite de U -infinito [32] usando diagonalização exata. Modelos de Hubbard para semi-preenchimento da

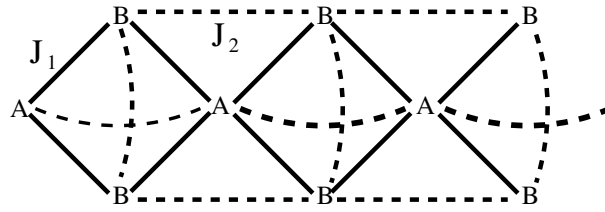


Figura 1.5: Cadeia AB_2 frustrada.

banda com a inclusão de outros acoplamentos também foram caracterizados: efeitos de interação elétron-fônon foram revelados através de métodos Hartree-Fock para as cadeias ABC [33] e AB_2 [34], inclusive na presença de interação entre cadeias [35] para o tipo ABC. Além disso, o modelo de Anderson periódico na cadeia ABC foi estudado recentemente [36] através de diagonalização exata e Hartree-Fock.

A segunda parte desta tese (Capítulo 6) é dedicada ao estudo da cadeia AB_2 de Heisenberg com interações competitivas, ou frustrada, com o padrão de *superexchanges* mostrado na Fig. 1.5. Recentemente, foi verificado que o composto $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$ (azurita) [37, 38], com uma topologia estreitamente relacionada com a cadeia AB_2 , como mostrado na Fig. 1.6, é um sistema frustrado, exibindo um platô na curva de magnetização em função do campo magnético a $1/3$ da magnetização de saturação ($1/2$) [38].

No que segue, apresentamos o roteiro da tese. O Capítulo 2 contém uma breve descrição da fundamentação física dos modelos de Heisenberg, Hubbard e $t - J$, os quais serão estudados nesta tese. No Capítulo 3 expomos o problema matemático e os métodos numéricos utilizados no cálculo dos estados de baixa energia dos hamiltonianos de interesse. No Capítulo 4 apresentamos o espectro de uma partícula nas cadeias AB_2 e ABC, estudamos o estado fundamental ferrimagnético para semi-preenchimento da banda e suas excitações magnéticas em função da repulsão coulom-

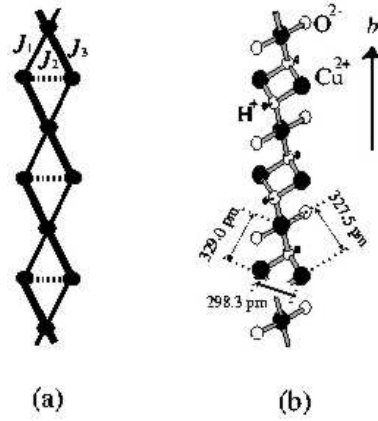


Figura 1.6: (a) Padrão de exchanges utilizado no estudo do composto $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ (azurita), onde os círculos representam spins $1/2$. (b) Representação esquemática da estrutura cristalina da azurita. (Figuras reproduzidas da Ref. [37].)

biana U . A cadeia AB_2 dopada com buracos nos regimes de fraco e forte acoplamento, incluindo o limite $U = \infty$, é considerada no Capítulo 5. Em particular, veremos que a dopagem propicia o aparecimento de fases e estados quânticos não-triviais, tais como: estados espirais, ferromagnetismo metálico, separação de fases, estados RVB e fase líquido de Luttinger, os quais são minuciosamente caracterizados neste capítulo. O Capítulo 5 é dedicado ao modelo $t - J$ na cadeia AB_2 ; enquanto que o Capítulo 6 à cadeia AB_2 frustrada. Finalmente, no Capítulo 7 expomos nossas conclusões.

Capítulo 2

Compostos de Metais de Transição

A física dos compostos de metais de transição apresenta uma riqueza de fases que tem seduzido uma parcela considerável de físicos e químicos a aproximadamente 70 anos. Essa classe de materiais apresenta vários comportamentos físicos não-triviais em função da composição química e de variáveis termodinâmicas e estruturais. Entre essas fases, destacamos: Antiferromagnetismo, Ferromagnetismo, Ferrimagnetismo, Supercondutividade de Alta Temperatura Crítica, entre outras. Os ingredientes microscópicos básicos para toda essa diversidade são a concorrência de vários graus de liberdade, forte repulsão coulombiana, que não pode ser desprezada em várias situações, e a pequena largura da banda de condução. Apesar de grandes esforços dedicados nas últimas décadas pela comunidade científica mundial, alguns desses materiais resistem a uma explicação teórica completa de seus diagramas de fases, notoriamente os supercondutores de alta temperatura crítica [1, 2] e as manganitas [39].

Neste capítulo faremos uma breve introdução à física dos compostos de metais

de transição. Tentamos realizar uma trajetória mínima a fim de apresentar os hamiltonianos que serão estudados nesta tese e sua fundamentação física. Aos leitores que desejem se aprofundar no assunto, indicamos as referências que serão citadas.

2.1 Variáveis Relevantes

Átomos de metais alcalinos, e. g., sódio ($\text{Na}=[\text{Ne}]3s^1$), tendem a formar sólidos pelo compartilhamento dos elétrons da camada de valência. Os elétrons compartilhados podem ser adequadamente descritos como se estivessem quase-livres, sentindo apenas o potencial periódico dos íons resultantes que se arranjam em uma estrutura cristalina. Por outro lado, em metais de transição, e. g., cobre ($\text{Cu}=[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$), o parâmetro de rede do cristal é relativamente grande se comparado com o raio médio da função de onda dos elétrons de valência atômicos. Conseqüentemente, dois átomos adjacentes apresentam uma pequena superposição de seus orbitais d. Desta forma, a largura de banda desses metais é razoavelmente pequena em relação à dos metais alcalinos. Metais de transição, portanto, possuem elétrons de condução que, apesar de itinerantes, guardam características atômicas. Devido a esta característica marcante, a aproximação LCAO (Combinação Linear de Orbitais Atômicos) é particularmente adequada para esses metais.

Compostos de metais de transição, substâncias formadas por íons de um metal de transição (e. g., Mn^{3+} , Cu^{2+}) e íons não-metálicos (e. g., O^{2-}), em geral são isolantes. Na Fig. 2.1 apresentamos a estrutura cristalina do óxido de manganês (MnO) [40], um composto de metal de transição de grande importância histórica para a física da matéria condensada e para a mecânica estatística: este foi o primeiro material em que se detectou experimentalmente por difração de neutrons um orde-

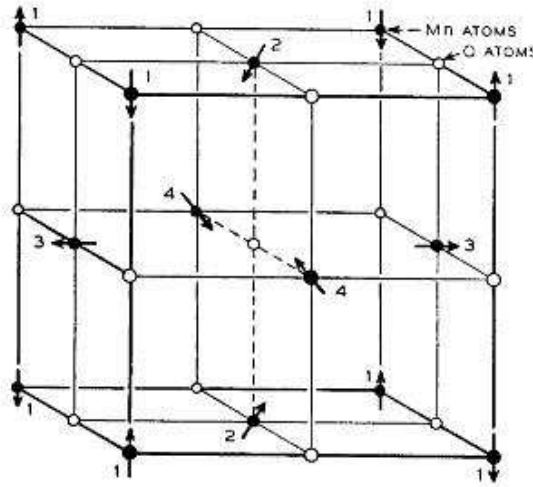


Figura 2.1: Estrutura cristalina do óxido de manganês (MnO). O tipo de ordenamento dos spins também está indicado na figura. (Reproduzido da Ref. [40].)

namento antiferromagnético de spins (veja a Ref. [40]). Além da disposição espacial dos íons, também é representada a ordem magnética inferida do experimento. Notem que cada íon magnético de Mn^{2+} é rodeado por íons *ligantes* não-magnéticos de O^{2-} .

Compostos de metal de transição possuem uma largura da banda de condução ainda mais estreita que a dos metais de transição, devido à presença dos íons de oxigênio. Para todos os efeitos, podemos considerar que não existe superposição entre orbitais d de íons metálicos adjacentes. O transporte de carga ocorre através dos íons não-magnéticos pela hibridização dos orbitais p do ânion ligante e d do cátion metálico. Apesar de existirem bandas de orbitais hibridizados que não estão completamente cheias, em muitos casos a forte repulsão coulombiana U que é sentida por cargas deslocadas entre cátions induz um estado localizado. Compostos com essa característica são chamados *isolantes de Mott* [41]. A abordagem teórica mais simples [42, 43] consiste em se admitir um caráter totalmente iônico para o material

e calcular o efeito do *campo cristalino anisotrópico* nos níveis de energia do metal, levando em consideração apenas a primeira camada de ligantes, veja a Fig. 2.2 (a). Estes íons isolados são chamados compostos de coordenação ou íons complexos [44] e representam uma unidade básica a partir da qual os graus de liberdade e os processos microscópicos do sólido são definidos. Os orbitais relevantes do íon metálico para a física de baixas energias são os cinco orbitais d ($d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{x^2-y^2}, d_{z^2}$). No cátion isolado esses orbitais são degenerados, o campo cristalino quebra esta degenerescência formando dois conjuntos de orbitais de degenerescências 2 (orbitais e_g) e 3 (orbitais t_{2g}). Os orbitais d mais próximos dos orbitais p do ligante possuem uma energia mais elevada. Para um arranjo octaédrico de ligantes, veja a Fig. 2.2 (a), os orbitais e_g ($d_{x^2-y^2}$ e d_{z^2}) possuem uma energia mais elevada que os orbitais t_{2g} (d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}), veja a Fig. 2.2 (b), com um *gap* definido por $10 Dq$. Apesar da teoria do campo cristalino ser qualitativamente correta, a *teoria do campo ligante* [45] é quantitativamente mais precisa. Nesta teoria consideram-se os orbitais moleculares resultantes da hibridização entre os orbitais d do metal e os orbitais p dos ligantes. Além do campo ligante, uma diferenciação interna aos orbitais t_{2g} e e_g resulta de distorções Jahn-Teller (contrações ou alongamentos ao longo dos eixos coordenados [44]).

O spin resultante do íon metálico dependerá do preenchimento dos níveis hibridizados de orbitais d. Dois fatores principais, além do número de elétrons d do íon definem como ocorrerá este preenchimento: a Regra de Hund, que favorece o alinhamento dos spins, e o valor de $10 Dq$. Considere, por exemplo, o íon Mn^{4+} . Neste íon existem três elétrons d. O acoplamento de Hund faz com que esses elétrons ocupem os três orbitais t_{2g} e produzam um spin resultante de $3/2$. No íon de Mn^{3+} , o elétron extra ocuparia um orbital t_{2g} se o valor de $10 Dq$ fosse maior que o ganho

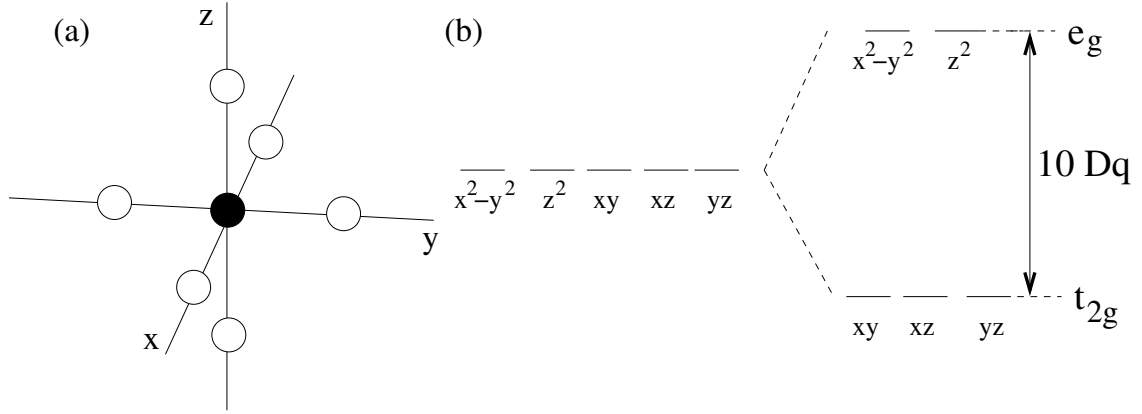


Figura 2.2: (a) Arranjo octaédrico de um íon complexo, o círculo cheio representa o cátion, enquanto que os círculos vazios representam os ânions ligantes. (b) Quebra da degenerescência orbital do metal, devida ao campo cristalino.

de energia pelo acoplamento de Hund e o resultado seria um spin 1. Entretanto, o valor de $10 Dq$ para este íon não é suficientemente grande e, conseqüentemente, o elétron extra ocupa um orbital e_g , o que resulta em um spin 2 para o íon.

2.2 Hamiltonianos Efetivos

O hamiltoniano de Heisenberg:

$$H_{Heisenberg} = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.1)$$

é o mais apropriado para o estudo de magnetismo em sistemas isolantes (veja [45, 43]). O hamiltoniano 2.1 é um *hamiltoniano de rede* onde J_{ij} representa o acoplamento efetivo entre os spins $\mathbf{S}_i$ e $\mathbf{S}_j$ dos íons magnéticos i e j da rede. Se $J_{ij} > 0$, o ordenamento antiferromagnético será favorecido; se $J_{ij} < 0$, a ordem ferromagnética dos spins será privilegiada. Do ponto de vista microscópico as interações

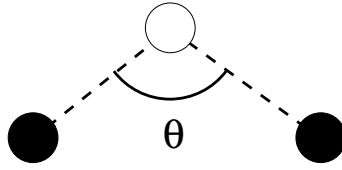


Figura 2.3: Ângulo formado entre os íons metálicos e o ligante intermediador da interação.

efetivas J_{ij} entre os íons metálicos ocorre graças à intermediação dos ligantes e é chamada *superexchange* [46] (veja [40]), diferenciando-a do *exchange* simples em que os orbitais dos íons magnéticos possuem um certo grau de superposição. Um grande desafio teórico é encontrar mecanismos simples que expliquem qualitativamente e quantitativamente os valores dos acoplamentos J_{ij} .

Vários mecanismos microscópicos foram propostos na década de cinquenta para explicar o *superexchange*, uma revisão desses mecanismos é feita por Kanamori [47]. Dependendo da superposição entre os orbitais do cátion e do ânion adjacentes, o acoplamento efetivo entre os cátions pode ser ferromagnético, antiferromagnético ou nulo. As regras de Kanamori-Goodenough-Anderson [40, 48, 47] estabelecem de uma forma aproximada o sinal do acoplamento de acordo com o ângulo θ formado entre os cátions e o ânion intermediário [49], veja a Fig. 2.3. Por exemplo, para $\theta = 180^\circ$, o acoplamento é antiferromagnético; enquanto que para $\theta = 90^\circ$, ferromagnético.

Estamos interessados em compostos isolantes com acoplamentos antiferromagnéticos, que é uma situação bastante comum [50]. Nestes casos, os orbitais do metal e do ligante estão razoavelmente superpostos e com um ângulo $\theta \approx 180^\circ$. Para esses compostos, Anderson sugeriu um mecanismo efetivo básico que é capaz de gerar o acoplamento desejado [50]. Até este ponto da discussão vimos que toda a explicação baseava-se no íon metálico e seus vizinhos não-magnéticos; o sistema é

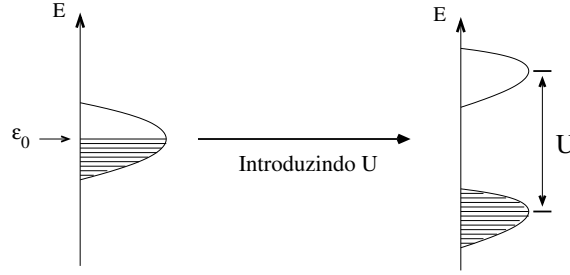


Figura 2.4: Transição metal isolante de Mott para o modelo de Hubbard de uma banda com energia local ϵ_0 e repulsão coulombiana U .

isolante e, portanto, não há a necessidade de descrevê-lo por uma teoria de bandas. Anderson adota uma nova abordagem [50] baseada no mecanismo de localização de Mott: primeiro define uma quasi-partícula que existirá na rede de íons magnéticos; esta quasi-partícula tem uma tendência a se delocalizar, baixando a sua energia. Essa tendência à itinerância é quantificada no parâmetro de *hopping* t , relacionado à largura de banda do metal; todavia, a repulsão coulombiana U frustra essa tendência e induz um estado isolante. A tendência frustrada de delocalização juntamente com o princípio de exclusão de Pauli produz um acoplamento efetivo antiferromagnético J ($= 4t^2/U$) entre cátions vizinhos. Anderson mostra que esse é o processo mais relevante, analisa processos de ordem superior entre as quasi-partículas e sugere maneiras de se medir t e U .

Um passo posterior no entendimento de compostos isolantes antiferromagnéticos foi dado por Hubbard em uma série de três artigos [51]. Hubbard propõe um hamiltoniano de rede, que leva o seu nome, em que os parâmetros competitivos t e U são associados a seus distintos processos microscópicos:

$$H_{Hubbard} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2.2)$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) é o operador de criação de elétrons de spin σ no sítio i , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o número de ocupação de elétrons de spin σ no sítio i e $\langle i, j \rangle$ define que a soma é realizada apenas para i e j primeiros-vizinhos. Neste modelo considera-se apenas um orbital por sítio. Para $U = 0$ e banda semi-preenchida, o sistema é metálico; a repulsão coulombiana U abre um *gap* na banda do metal, produzindo um estado isolante de Mott, veja a Fig. 2.4. No limite de forte acoplamento, $U \gg t$, por teoria de perturbação de segunda ordem podemos mostrar que o hamiltoniano de Heisenberg com $J = 4t^2/U$ é recuperado. Neste mesmo limite, o hamiltoniano de Hubbard pode ser reescrito na forma do hamiltoniano $t - J$ para o isolante dopado por buracos:

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} P_G c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} P_G + \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j), \quad (2.3)$$

onde $P_G = \prod_i (1 - n_{i\uparrow} n_{i\downarrow})$ (operador de Gutzwiller) projeta o hamiltoniano no subespaço de estados simplesmente ocupados. O primeiro termo de (2.3) considera a cinemática dos buracos no ambiente isolante antiferromagnético produzido pelo *superexchange* J ($= 4t^2/U$) do segundo termo.

Compostos de cobre, onde o nível $d_{x^2-y^2}$ está semi-preenchido e todos os outros orbitais d estão cheios (spin 1/2 por cátion), com $\theta \approx 180^\circ$, são bons candidatos ao modelo de Hubbard. Entretanto, veremos em seguida que dependendo do tipo de ânion em compostos de cobre, a dopagem por buracos ativa a banda dos ligantes, e não a dos metais, ou seja, o *gap* de carga não está diretamente relacionado à repulsão coulombiana em alguns compostos [41].

Considere um hamiltoniano em um nível de descrição inferior ao de Hubbard onde levamos em conta os orbitais p dos ânions (com $\theta \approx 180^\circ$) e orbitais $d_{x^2-y^2}$

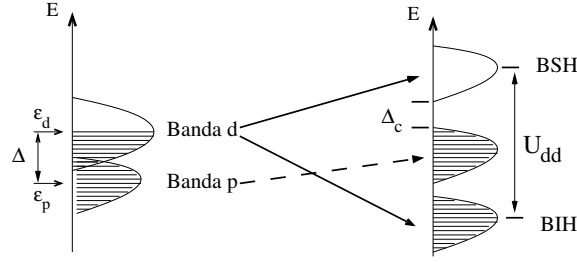


Figura 2.5: Ilustração do comportamento das bandas de energia para compostos de metal de transição. Na figura, U_{dd} é a repulsão coulombiana local nos orbitais d, $\Delta = \epsilon_d - \epsilon_p$ e Δ_c é o *gap* de carga. As sigla BSH e BIH denotam a banda superior de Hubbard e a banda inferior de Hubbard, respectivamente, desdobradas da banda d para $U_{dd} = 0$.

(cobre):

$$H_{pd} = -t_{pd} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} d_{i\sigma}^\dagger p_{j\sigma} - t_{pp} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} p_{i\sigma}^\dagger p_{j\sigma} + \epsilon_d \sum_i n_{di} + \epsilon_p \sum_j n_{pj} + U_{dd} \sum_i n_{di\uparrow} n_{di\downarrow},$$

onde i (j) denota sítios de metais (ligantes), t_{pd} (hibridização entre p e $d_{x^2-y^2}$) é a probabilidade de tunelamento de um buraco (elétron) de $d_{x^2-y^2}$ (p) para um orbital p ($d_{x^2-y^2}$), t_{pp} é a probabilidade de transferência direta de elétrons entre orbitais p, n_{aj} é o número de elétrons no orbital a (com a igual a p ou d) do sítio j , U_{dd} é a repulsão coulombiana local em orbitais $d_{x^2-y^2}$ e ϵ_d (ϵ_p) é a energia local do orbital $d_{x^2-y^2}$ (p) do íon isolado. O hamiltoniano acima é chamado de “pd”[41]. Salientamos, entretanto, que vários termos ainda estão sendo desprezados neste hamiltoniano, por exemplo [49]: repulsão coulombiana intra-ligantes, *hopping* entre metais, repulsão coulombiana entre ligantes e metais, *exchange*, etc.

Dois regimes definidos pela relação entre $\Delta \equiv \epsilon_d - \epsilon_p$ e U_{dd} devem ser considerados, veja a Fig. 2.5. O primeiro deles, $\Delta > U_{dd}$ implica que a banda p está razoavelmente profunda de modo que o *gap* de carga Δ_c está diretamente ligado à repulsão coulombiana U_{dd} , estes são os isolantes de Mott-Hubbard, como já vimos. Usando teoria de perturbação de segunda ordem é possível mapear o hamiltoniano pd no de Hubbard de uma banda. O segundo regime é aquele para o qual $\Delta < U_{dd}$; nestes casos, a excitação de carga com energia mais baixa é a promoção de um elétron da banda p para a banda superior de Hubbard (veja a Fig. 2.5); compostos incluídos neste caso são chamados de isolantes de transferência de carga [52]. Pode-se mostrar por teoria de perturbação de quarta ordem em t_{pd}/Δ ou t_{pd}/U_{dd} que o hamiltoniano é mapeado no de Heisenberg [41].

As experiências mostram que compostos de óxido de cobre são isolantes de transferência de carga [41]. Buracos adicionados ao sistema são encontrados na banda p. Contudo, Zhang e Rice [53] mostraram que graças à formação de um estado singleto entre um buraco em um orbital p e um buraco no orbital $d_{x^2-y^2}$ do cobre adjacente, podemos considerar o modelo $t - J$ com os buracos na rede de metais, o estado singleto entre os elétrons em p e d “apaga” o spin do cobre. Além disso podemos considerar a física de isolantes de transferência de carga através do hamiltoniano de Hubbard de uma banda com um valor de U efetivo. De fato, o papel dos ligantes na física não-trivial de vários compostos ainda é um assunto discutível [1, 2, 41].

Capítulo 3

Cálculo do Estado Fundamental e Primeiras Excitações do Hamiltoniano de Hubbard

Neste capítulo tentamos caracterizar o problema da diagonalização do hamiltoniano de Hubbard e apresentar os métodos utilizados para o cálculo de seus estados de baixa energia. Inicialmente estabelecemos o espaço de Hilbert do modelo e suas simetrias. Por fim, apresentamos as duas técnicas de diagonalização utilizadas nesta tese: algoritmo de Lanczos para diagonalização exata e grupo de renormalização da matriz de densidade.

3.1 Espaço de Hilbert e Simetrias do Modelo de Hubbard

O modelo de Hubbard considera um único orbital por sítio da rede cristalina. Cada sítio, portanto, comporta no máximo dois elétrons e pode ser encontrado em quatro estados: $|vac\rangle$, $|\uparrow\rangle = c_{\uparrow}^{\dagger}|vac\rangle$, $|\downarrow\rangle = c_{\downarrow}^{\dagger}|vac\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle = c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\uparrow}^{\dagger}|vac\rangle$. Para uma rede de N sítios podemos numerar cada sítio de acordo com um critério arbitrário e identificar os estados do sistema pelo número de ocupação de elétrons ($n_{i\sigma}$) com spin σ de cada sítio:

$$|n_{1\downarrow}n_{1\uparrow}n_{2\downarrow}n_{2\uparrow}\dots n_{N\downarrow}n_{N\uparrow}\rangle.$$

Desta maneira, o número de estados do espaço de Hilbert para uma rede de N sítios será 4^N e são construídos pelo produto tensorial dos espaços de Hilbert locais de cada sítio. Neste ponto da discussão precisamos fazer uma ressalva: para íons Cu^{+2} com configuração $3d^9$ da camada de valência, encontrados no compostos das Figs. 1.3 e 1.6, consideramos o estado de vácuo como aquele em que os orbitais d estão totalmente preenchidos, ou seja, $|vac\rangle \equiv |3d^{10}\rangle$. Note que se quiséssemos ser mais realistas deveríamos falar em criação de “buracos” e não de “elétrons”. Entretanto, visto que as regras de comutação são as mesmas para ambos os operadores de buracos e elétrons – ambos são férmions – as conclusões físicas são as mesmas (simetria partícula-buraco).

O hamiltoniano de Hubbard, Eq. (2.2), possui dois termos que individualmente podem ser facilmente tratados: o primeiro termo, o “hopping”, pode ser diagonalizado utilizando-se a invariância de translação do modelo; e o segundo termo, a repulsão coulombiana, já é diagonal. Entretanto, com os dois termos presentes o problema requer a diagonalização de uma matriz de dimensão 4^N . Como, em

princípio, estamos interessados em obter conclusões sobre o limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$, vemos que esta não é uma tarefa fácil. Ao nosso lado, existem as simetrias satisfeitas pelo hamiltoniano. Algumas simetrias são gerais, estando presentes independentemente da geometria do modelo, a saber: conservação do número de partículas

$$N_e = \sum_i n_i;$$

conservação do spin total

$$S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2,$$

com

$$S^z = \sum_j \frac{1}{2} (n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}),$$

$$S^x = \sum_j \frac{1}{2} (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}),$$

e

$$S^y = \sum_j \frac{1}{2i} (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} - c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow});$$

e conservação das componentes S^x , S^y e S^z . Estas simetrias são representadas pelos grupos $U(1)$ (carga) e $SU(2)$ (spin). O hamiltoniano pode ser diagonalizado por blocos com número de partículas N_e e componente S^z fixos. A dimensão desses subespaços é facilmente calculada, sendo dada por

$$\dim(N_\uparrow, N_\downarrow) = \frac{(N!)^2}{(N - N_\uparrow)!(N - N_\downarrow)!N_\downarrow!N_\uparrow!}.$$

Além dessas simetrias, alguns modelos tem simetrias particulares. A mais co-

um delas é a invariância de translação, que ocorre em modelos com condições de contorno fechadas. Nesses casos podemos construir uma base rotulada pelo autovalor do operador de translação, o vetor de onda $\mathbf{k}$, além de S^z e N_e . Com esta simetria, as dimensões dos blocos a serem diagonalizados é reduzida por um fator N_e , onde N_e é o número de células unitárias do sistema.

3.2 Algoritmo de Lanczos para Diagonalização Exata

Mesmo considerando todas as simetrias possíveis teremos que diagonalizar hamiltonianos em espaços de Hilbert que crescem exponencialmente com o número de sítios da rede. Visto que o número de subespaços de simetrias distintas nos quais podemos decompor o hamiltoniano cresce tipicamente de forma linear com o tamanho do sistema, em geral precisaremos de um método numérico para calcular as propriedades do estado fundamental e excitações dos modelos quânticos de interesse. O algoritmo de Lanczos [54] é um método iterativo para o cálculo exato dessas propriedades. Este método requer apenas que três estados fiquem armazenados na memória, a convergência das menores energias é rápida e a precisão pode ser ajustada à precisão de máquina. Por isso, o algoritmo de Lanczos é o método numérico mais utilizado para o cálculo exato do estado fundamental de sistemas finitos.

O algoritmo representa, de fato, uma mudança de base para um hamiltoniano d -dimensional. A base final, $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |d-1\rangle\}$ é gerada a partir de um estado arbitrário $|0\rangle$, com $\langle 0|0\rangle = 1$. É possível dar uma justificativa simples para o método lembrando que podemos decompor qualquer estado na base dos auto-estados de

$\mathcal{H}$, $\{|\epsilon_0\rangle, |\epsilon_1\rangle, |\epsilon_2\rangle, \dots, |\epsilon_d\rangle\}$, com $\epsilon_0 < \epsilon_1 < \epsilon_2 \dots$ e imaginando que não haja degenerescência:

$$|0\rangle = \sum_i a_i |\epsilon_i\rangle.$$

No estado $\mathcal{H}^n|0\rangle$, quanto maior for “n” (a ordem da iteração), maior será o peso dos auto-estados de maior energia em sua composição. Depois de algumas poucas iterações as menores energias estarão completamente perdidas. A fim de contornar este problema, definimos um estado, $|1\rangle$, como uma combinação linear de $\mathcal{H}|0\rangle$ e $|0\rangle$:

$$|1\rangle = \mathcal{H}|0\rangle - \alpha|0\rangle,$$

onde α seja tal que

$$\langle 1|1\rangle = \langle \mathcal{H}^2 \rangle_0 + \alpha^2 - 2\alpha \langle \mathcal{H} \rangle_0, \quad (3.1)$$

é mínimo. A partir da Eq. (3.1) adotamos a convenção: $\langle \mathcal{H}^n \rangle_i \equiv \langle i|\mathcal{H}^n|i\rangle$. O valor de α para o qual $\langle 1|1\rangle$ é mínimo será

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha}(\langle 1|1\rangle) &= 0 \\ 2\alpha - 2\alpha \langle \mathcal{H} \rangle_0 &= 0 \\ \alpha &= \langle \mathcal{H} \rangle_0 \equiv \alpha_0, \text{ portanto} \\ |1\rangle &= \mathcal{H}|0\rangle - \alpha_0|0\rangle. \end{aligned} \quad (3.2)$$

A norma do estado (3.2), a qual será definida por β_1 , é dada por

$$\beta_1 = \langle 0|\mathcal{H}|1\rangle \quad (3.3)$$

$$= \sqrt{\langle \mathcal{H}^2 \rangle_0 - \langle \mathcal{H} \rangle_0^2}. \quad (3.4)$$

Com $\beta_1 \in \Re$ para $\mathcal{H}$ hermitiano. Desta maneira, o segundo estado da base será

$$|1\rangle = \frac{1}{\beta_1}(\mathcal{H}|0\rangle - \alpha_0|0\rangle). \quad (3.5)$$

Note que se decompusermos $|1\rangle$ nos auto-estados de $\mathcal{H}$,

$$|1\rangle = \frac{1}{\beta_1} \sum_i c_i (\epsilon_i - \langle \mathcal{H} \rangle_0) |\epsilon_i\rangle,$$

fica evidente que estamos privilegiando os extremos do espectro, ou seja, o algoritmo exibe uma rápida convergência para o estado fundamental e o estado de maior energia.

Agora, a nova base já possui dois estados ortogonais $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, pois $\langle 1|0\rangle = 0$, como podemos observar facilmente. Continuando o processo, o próximo estado será dado pela combinação

$$|2\rangle = \mathcal{H}|1\rangle - \alpha|1\rangle - \beta|0\rangle,$$

com β e α sendo tais que $\langle 2|2\rangle$ é mínimo:

$$\langle 2|2\rangle = \langle \mathcal{H}^2 \rangle_1 - 2\alpha \langle \mathcal{H} \rangle_1 - 2\beta \langle 1|\mathcal{H}|0\rangle + \alpha^2 + \beta^2,$$

$$\delta \langle 2|2\rangle = 0 \Rightarrow \begin{cases} \beta &= \langle 1|\mathcal{H}|0\rangle = \beta_1; \\ \alpha &= \langle \mathcal{H} \rangle_1 \equiv \alpha_1. \end{cases}$$

Desta forma, o terceiro estado normalizado da base é dado por:

$$|2\rangle = \frac{1}{\beta_2}[(\mathcal{H} - \langle \mathcal{H} \rangle_1)|1\rangle - \beta_1|0\rangle], \quad (3.6)$$

com $\beta_2 = \langle 1|\mathcal{H}|2\rangle \in \Re$. Note ainda que $\langle 2|1\rangle = 0 = \langle 2|0\rangle$. Neste ponto, a base

possui os estados $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle\}$. Seguindo o mesmo procedimento, $|3\rangle$ será expresso como

$$|3\rangle = (\mathcal{H} - \langle\mathcal{H}\rangle_2)|2\rangle - \beta_2|1\rangle + \gamma|0\rangle.$$

A parte de $\langle 3|3\rangle$ que depende de γ , $\langle 3|3\rangle_\gamma$ é

$$\langle 3|3\rangle_\gamma = \gamma^2 + 2\gamma\langle 0|\mathcal{H}|2\rangle \quad (3.7)$$

mas, de 3.6, temos que

$$\langle 0|\mathcal{H}|2\rangle = \frac{1}{\beta_2}(\langle 0|\mathcal{H}^2|1\rangle - \alpha_1\beta_1 - \beta_1\alpha_0). \quad (3.8)$$

Podemos, ainda, reescrever (3.5) como

$$\mathcal{H}|0\rangle = \beta_1|1\rangle + \alpha_0|0\rangle,$$

de forma que

$$\begin{aligned} \langle 1|\mathcal{H}^2|0\rangle &= \beta_1\langle\mathcal{H}\rangle_1 + \alpha_0\langle 1|\mathcal{H}|0\rangle \\ &= \beta_1\alpha_1 + \alpha_0\beta_1. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Visto que $\langle 1|\mathcal{H}^2|0\rangle = \langle 0|\mathcal{H}^2|1\rangle$, podemos utilizar o resultado da Eq. (3.9) na Eq. (3.8) para obtermos $\langle 0|\mathcal{H}|2\rangle = 0$, ou seja, $\langle 3|3\rangle_\gamma = \gamma^2$, acarretando que $\gamma = 0$ minimiza $\langle 3|3\rangle$. Desta maneira, $|3\rangle$ será uma combinação apenas de $|1\rangle$ e $|2\rangle$. Pode-se mostrar por indução que o vetor da i -ésima iteração só dependerá dos dois vetores

que o antecede e que a relação entre os estados da base é dada por

$$|i\rangle = \frac{1}{\beta_i}((\mathcal{H} - \alpha_{i-1})|i-1\rangle - \beta_{i-1}|i-2\rangle), \quad (3.10)$$

com coeficientes

$$\begin{cases} \alpha_i &= \langle i|\mathcal{H}|i\rangle \text{ e} \\ \beta_i &= \langle i-1|\mathcal{H}|i\rangle. \end{cases} \quad (3.11)$$

O processo termina quando a base cobrir todo o espaço de Hilbert. Na base de Lanczos, o hamiltoniano será representado por uma matriz tridiagonal:

$$\begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \beta_3 & \alpha_3 & \beta_4 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Uma das vantagens do algoritmo é a economia de memória já mencionada: só é preciso reter $|i-1\rangle$, $\mathcal{H}|i-1\rangle$ e $|i-2\rangle$. Na i -ésima iteração, o hamiltoniano terá uma representação tridiagonal de dimensão $i+1$ com polinômio característico $p_i(x)$. É fácil ver que existe uma relação de recorrência para esses polinômios:

$$p_i(x) = (x - \alpha_i)p_{i-1}(x) - \beta_i^2 p_{i-2}(x);$$

com isso, se as menores energias dos passos $i-1$ e $i-2$ forem iguais, dentro da precisão desejada, ou seja, $p_{i-1}(\epsilon_0) = 0 = p_{i-2}(\epsilon_0)$, então ϵ_0 também será a menor raiz de p_i e de todos os polinômios seguintes. Desta maneira, se estivermos interessados apenas no estado fundamental, basta gerarmos a base até que a menor energia da

matriz nos dois últimos passos tenham convergido. O grande mérito do algoritmo é que independentemente da dimensão do espaço de Hilbert, a menor energia converge após um número relativamente pequeno de iterações (tipicamente algumas dezenas de iterações).

Além da energia, com os polinômios podemos calcular os auto-estados de $\mathcal{H}$. Para tanto, note que

$$\begin{aligned}
 |0\rangle &= p_0(\mathcal{H})|0\rangle; \\
 |1\rangle &= \frac{1}{\beta_1}(\mathcal{H} - \alpha_0)|0\rangle \\
 &= \frac{1}{\beta_1}p_1(\mathcal{H})|0\rangle; \\
 |2\rangle &= \frac{1}{\beta_2}((\mathcal{H} - \alpha_1)|1\rangle - \beta_1|0\rangle) \\
 &= \frac{1}{\beta_1\beta_2}((\mathcal{H} - \alpha_1)p_1(\mathcal{H}) - \beta_2^2p_0(\mathcal{H}))|0\rangle \\
 &= \frac{1}{\beta_1\beta_2}p_2(\mathcal{H})|0\rangle; \\
 &\vdots \\
 |i\rangle &= \frac{1}{\prod_{k=0}^i \beta_k}p_i(\mathcal{H})|0\rangle,
 \end{aligned}$$

com $p_0(\mathcal{H}) = 1$. A componente do auto-estado de energia ϵ_j na direção de $|i\rangle$ será

$$\begin{aligned}
 \langle \epsilon_j | i \rangle &= \langle \epsilon_j | \frac{1}{\prod_{k=1}^i \beta_k} p_i(\mathcal{H}) | 0 \rangle \\
 &= \frac{1}{\prod_{k=0}^i \beta_k} p_i(\epsilon_j) \langle \epsilon_j | 0 \rangle,
 \end{aligned}$$

teremos então todas as componentes proporcionais a $\langle 0|\epsilon_j\rangle$, ou seja, o auto-estado não normalizado é

$$|\epsilon_j\rangle = \sum_{i=0}^{d-1} \frac{1}{\prod_{k=1}^i \beta_k} p_i(\epsilon_j) |i\rangle.$$

Note, entretanto, que se a energia tiver convergido no passo d_0 , todos os polinômios com $i \geq d_0$ serão nulos. Portanto, quando a menor energia convergir, não precisaremos de mais estados da base para sabermos o estado fundamental. Um problema técnico na implementação do método é a perda de ortogonalidade da base, devido a erros de arredondamento. Isto não representa um grande obstáculo, já que não afeta a convergência das auto-energias. Estes erros podem levar à duplicação de autovalores da matriz tridiagonal, devendo-se ter cuidado quando se desejar obter o espectro completo. Neste caso, existem algoritmos que realizam uma reortogonalização seletiva da base.

Existe, ainda, um algoritmo denominado “Lanczos modificado 2x2” [55] em que só são utilizados os dois primeiros estados, $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Diagonaliza-se a matriz 2x2. O seu autovetor de menor energia é utilizado para reiniciar o processo e assim sucessivamente até que a menor energia entre diagonalizações não varie, dentro da precisão desejada. As vantagens do Lanczos 2x2 são que, a cada passo, o autovetor de menor energia da matriz 2x2 está mais próximo do auto-estado de $\mathcal{H}$ e que só é necessário guardar dois estados na memória da máquina. Encontramos ainda na literatura o “Lanczos modificado 4x4” [56], onde são usados apenas quatro vetores da base de Lanczos, com procedimento similar ao do 2x2. Finalmente, notamos que variantes do algoritmo de Lanczos são utilizadas para o cálculo de propriedades dinâmicas [57] e termodinâmicas [58].

3.3 Grupo de Renormalização da Matriz de Densidade

O grupo de renormalização da matriz de densidade [59] (adotaremos a sigla inglesa DMRG) é um dos métodos mais versáteis para o cálculo do estado fundamental de sistemas quânticos com interações competitivas em uma e até duas dimensões. Nesta seção faremos uma descrição abreviada do método a fim de informar ao leitor sobre alguns termos que serão utilizadas na parte original desta tese, não pretendemos, portanto, falar sobre todas as suas nuances e aplicações. Sugerimos as referências [60, 61] (e referências citadas) ao leitor interessado em se aprofundar no tema.

O objetivo principal do DMRG é encontrar uma base com a menor dimensão possível que seja capaz de representar adequadamente o estado fundamental do hamiltoniano em um espaço com simetrias bem definidas. O hamiltoniano total do sistema (superbloco) possui uma estrutura de quatro partes: dois blocos, com um número arbitrário de sítios e um espaço de Hilbert que pode ter dimensão elevada; e dois sítios, com um número pequeno e fixo de estados. Na Fig. 3.1 apresentamos uma imagem desta estrutura. O procedimento de renormalização tenta encontrar uma base de dimensão mínima para o hamiltoniano dos blocos de modo a que o estado fundamental do superbloco (blocos+sítios) seja corretamente reproduzido. Naturalmente este procedimento envolve uma truncagem dos estados dos blocos para um número computacionalmente viável de estados. Os estados com maior contribuição para o autoestado do superbloco devem ser retidos, podemos estabelecer um critério matemático bem definido através da matriz de densidade reduzida. A seguir faremos uma apresentação formal do método.

Suponha que o bloco da esquerda B_l tenha comprimento linear l e espaço de

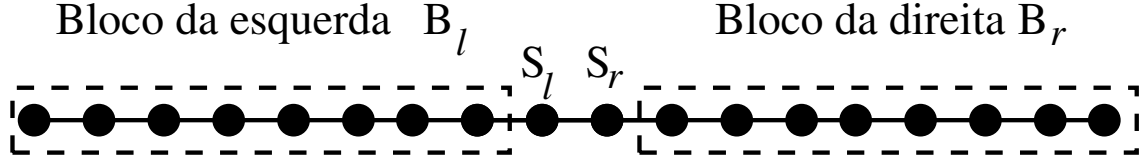


Figura 3.1: Superbloco: estrutura básica de execução do DMRG: bloco da esquerda B_l de comprimento linear l , bloco da direita B_r de comprimento linear r , sítio da esquerda S_l e sítio da direita S_r .

Hilbert de dimensão M^l coberto pelos estados $|m_l\rangle$, $m_l = 1 \dots M^l$. O bloco da direita B_r , por sua vez, tenha comprimento r e espaço de Hilbert de dimensão M^r coberto pelos estados $|m_r\rangle$, $m_r = 1 \dots M^r$. Além disso, considere que o sítio da esquerda (direita) S_l (S_r) tenha espaço de Hilbert de dimensão D^l (D^r) e seja coberto pelos estados $|\sigma_l\rangle$, $\sigma_l = 1 \dots D^l$ ($\sigma_r = 1 \dots D^r$). Estamos interessados em encontrar o estado fundamental do superbloco para tamanhos inacessíveis à diagonalização exata e tentar inferir com precisão as características do sistema no limite termodinâmico. O procedimento básico do algoritmo é o crescimento dos blocos B_l e B_r pela absorção dos sítios S_l e S_r , formando novos blocos de comprimento $l + 1$ e $r + 1$, respectivamente, até que um critério de finalização do crescimento seja satisfeito. Considere, por exemplo, o bloco da esquerda. Em cada passo, o bloco acrescido de um sítio tem inicialmente um espaço de Hilbert de dimensão $M^l D^l$. O processo de truncagem consiste em diminuir esta dimensão para um valor M pré-estabelecido. Os estados escolhidos são os autoestados da matriz de densidade reduzida

$$\rho = \text{tr}_{m_{r+1}} |\Psi\rangle\langle\Psi|,$$

onde $|\Psi\rangle$ é o estado fundamental do superbloco e o traço é realizado nos estados do novo bloco da direita B_{r+1} . Em linguagem de Mecânica Estatística, estamos

imaginando o superbloco como sendo o *Universo*, o bloco da esquerda o *Sistema* e o da direita o *Ambiente*. Explicitamente, o procedimento de crescimento do bloco da esquerda segue os seguintes passos: na configuração $B_l S_l S_r B_r$ calculamos o estado fundamental do superbloco, $|\Psi\rangle$, através do algoritmo de Lanczos:

$$|\Psi\rangle = \sum_{m_l \sigma_l \sigma_r m_r} \Psi_{m_l \sigma_l \sigma_r m_r} |m_l\rangle |\sigma_l\rangle |\sigma_r\rangle |m_r\rangle.$$

Em seguida, expandimos este estado na base dos novos blocos ($|m_{l+1}\rangle$ e $|m_{r+1}\rangle$) a fim de construir a matriz de densidade reduzida

$$|\Psi\rangle = \sum_{m_{l+1}}^{M^l D^l} \sum_{m_{r+1}}^{M^r D^r} \Psi_{m_{l+1} m_{r+1}} |m_{l+1}\rangle |m_{r+1}\rangle;$$

em geral, $M^l D^l > M$. A matriz de densidade reduzida terá os seguintes elementos

$$\rho_{m_{l+1} m'_{l+1}} = \sum_{m_{r+1}}^{M^r D^r} \bar{\Psi}_{m_{l+1} m_{r+1}} \Psi_{m'_{l+1} m_{r+1}}.$$

Diagonalizamos ρ por meio de algum algoritmo de diagonalização de matrizes densas e indexamos seus autoestados ($|w_\alpha\rangle$) e autovalores (w_α) em ordem decrescente de autovalor, ou seja, $w_1 > w_2 > \dots > w_{M^l D^l}$. O próximo passo requer a transformação do hamiltoniano do bloco $\mathcal{H}_{l+1}$ para a base dos M autoestados de maiores autovalores w_α . Esta transformação é realizada através da operação

$$\tilde{\mathcal{H}}_{l+1} = U \mathcal{H}_{l+1} U^\dagger,$$

onde as linhas de U são os M estados retidos. O processo de truncagem acarreta

em um erro da ordem de

$$1 - \sum_{\alpha=1}^M w_{\alpha} \quad (3.12)$$

em quantidades locais, tais como a densidade de energia e a magnetização. A quantidade (3.12) é denominada *peso descartado*. O mesmo procedimento deve ser adotado para o bloco B_{r+1} . O processo continua acrescentando-se mais dois sítios centrais e assim sucessivamente até que o crescimento é finalizado.

Existem dois critérios de finalização do crescimento, distinguido-se pela forma com que se deseja calcular propriedades do limite termodinâmico. No primeiro deles, DMRG de tamanho infinito, o sistema cresce indefinidamente até que algum tipo de densidade (magnetização, densidade de energia, etc.) tenha convergido. Esta estratégia não é muito utilizada, visto que o processo de crescimento acaba deixando marcas que podem levar a interpretações erradas para o limite termodinâmico. Este problema é particularmente desastroso para pequenas dopagens nos modelos de Hubbard e t-J ou em sistemas não-homogêneos [60]. Na segunda abordagem, DMRG de tamanho finito, o crescimento é finalizado quando o sistema atinge um tamanho pré-estabelecido. A fim de eliminar os “vícios” do crescimento (denominados erros de ambiente), os blocos da esquerda e da direita com todos os tamanhos gerados no processo de crescimento são reajustados no ambiente correto, ou seja, considerando-se um superbloco com o tamanho desejado. O processo é realizado aumentando-se o comprimento de um dos blocos às custas da diminuição no comprimento do outro. Considere, por exemplo, que desejamos calcular o estado fundamental de um sistema com tamanho L . Após o crescimento, o bloco da esquerda é aumentado até o tamanho máximo permitido $l = L - 2 - (r = 1)$, em cada passo do algoritmo a truncagem é realizada apenas no bloco da esquerda. Os papéis então se invertem, o bloco da direita cresce às custas do bloco da esquerda, truncando-se apenas o espaço

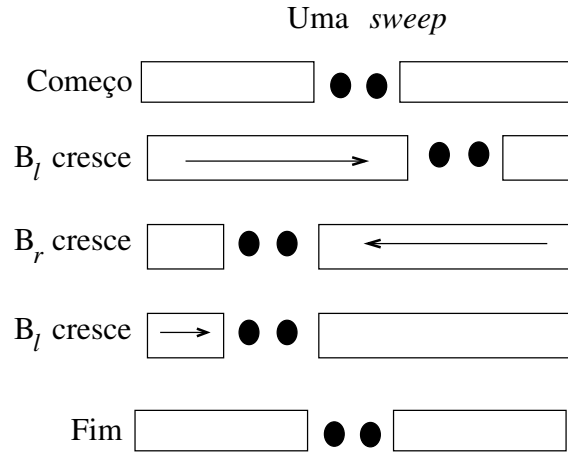


Figura 3.2: Um ciclo completo do DMRG de tamanho finito (uma *sweep*).

de Hilbert do bloco da direita. Um ciclo completo em que os blocos da direita e da esquerda com todos os comprimentos foram otimizados é chamado de *sweep*, veja a Fig. 3.2. Após alguns *sweeps* os erros de ambiente são eliminados. A única fonte de erro será o peso descartado, que pode ser diminuído de forma controlada aumentando-se o valor de M . Após calcularmos as quantidades de interesse para vários tamanhos L distintos, o limite termodinâmico das mesmas é obtido através de um *ansatz* para a dependência da quantidade com o tamanho L do sistema. Esta é a versão do algoritmo que foi utilizada nos resultados de pesquisa desta tese.

A implementação computacional do algoritmo requer que o hamiltoniano e todos os operadores associados aos blocos sejam armazenados no disco rígido do computador. A cada passo do DMRG a truncagem para a base reduzida deve ser realizada em todos os operadores associados, com isso os mesmos sempre terão uma representação na mesma base do hamiltoniano. A operação que demanda mais tempo de computação é o cálculo do estado fundamental do superbloco. Este cálculo é efetuado através do algoritmo de Lanczos que, por sua vez, esta baseado no produto da

matriz do hamiltoniano por um vetor (veja a seção anterior). Se este produto for implementado descuidadamente, o custo temporal desta operação pode ser de $O(M^4)$, que é desastroso para fases que exigem valores de M razoavelmente grandes ~ 500 . Na Ref. [60] o autor explica como se deve proceder em uma implementação eficiente, mostrando que é possível fazer o custo desta operação ser de $O(M^3)$. Além disso, um ponto crucial para a redução do tempo de computação é o método de *predição do autoestado* que também foi desenvolvido por S. R. White [62]. A idéia consiste na transformação do autoestado calculado em um passo do algoritmo para o passo seguinte através de matrizes densidade já obtidas. Este autoestado transformado serve de estado inicial para o procedimento de diagonalização do passo posterior. Com isso, o número de estados da base de Lanczos (o número de produtos de matriz por vetor) necessário para o cálculo da energia é drasticamente reduzido. Nesta tese o procedimento de renormalização foi realizado apenas para sistemas com condições de contorno abertas segundo o seguinte procedimento: crescemos o sistema até o tamanho desejado retendo um número pequeno de estados por bloco, quando o tamanho desejado é atingido, aumentamos o valor de M a cada *sweep* até que M alcance um valor máximo pré-definido. Tipicamente, os pesos descartados são $\sim 10^{-7}$. Além disso, a comparação com resultados da diagonalização exata ajuda a evitar erros de interpretação que podem ser introduzidos pelas condições de contorno abertas.

Capítulo 4

Cadeias AB_2 e ABC em Banda Semi-Cheia

Neste capítulo consideraremos as propriedades magnéticas das cadeias AB_2 e ABC de Hubbard em banda semi-cheia em função da repulsão coulombiana U . Inicialmente apresentaremos a estrutura de bandas para $U = 0$ das duas cadeias. Em seguida discutiremos uma simetria local característica da cadeia AB_2 , a qual será útil na elucidação do comportamento físico desta cadeia. Em conexão com alguns resultados rigorosos conhecidos, revelaremos numericamente a estrutura ferromagnética do estado fundamental. Finalmente, explicitaremos a natureza das excitações magnéticas e sua dependência com U .

4.1 Limite sem interação: $U = 0$

O primeiro passo no entendimento das propriedades de elétrons fortemente correlacionados é o estudo do limite $U = 0$. Neste regime, o estado de N_e elétrons é

determinado ao se preencher os níveis de energia de um elétron em acordo com o princípio de exclusão de Pauli. Como veremos, sistemas quase-unidimensionais possuem propriedades topológicas que são facilmente evidenciadas neste limite. Em particular, uma quantidade extensiva de estados localizados, formando bandas sem-dispersão (*flat*), que são determinantes na diferenciação destes sistemas em relação à cadeia linear.

O único termo do hamiltoniano de Hubbard, Eq. (2.2), para um elétron é o *hopping*

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j; \quad (4.1)$$

neste caso a variável de spin é irrelevante e não a consideramos no hamiltoniano. É possível realizar um cálculo unificado para a diagonalização do hamiltoniano dos dois sistemas de interesse, cadeias AB_2 e ABC , se considerarmos a cadeia representada na Fig. 4.1, que chamaremos “*SSS*”. Nesta cadeia o *hopping* β entre os sítios S_{3l} e $S_{1,l+1}$ é um parâmetro ajustável. Para $\beta = 1$ a cadeia *SSS* se reduz à cadeia AB_2 , com os sítios $S_1 \equiv A$, $S_2 \equiv B_1$ e $S_3 \equiv B_2$; enquanto que para $\beta = 0$, a cadeia *ABC* é reproduzida, com os sítios $S_1 \equiv A$, $S_2 \equiv B$ e $S_3 \equiv C$ — compare as figuras 1.2 e 4.1. O hamiltoniano da cadeia *SSS* pode ser escrito como

$$\begin{aligned} H(\beta) = & -t \sum_{l=1, \sigma}^{N_c} [(c_{1l\sigma}^\dagger c_{2l\sigma} + c_{1l\sigma}^\dagger c_{3l\sigma} + c_{1l\sigma}^\dagger c_{2,l-1\sigma}) \\ & + \beta c_{1l\sigma}^\dagger c_{3,l-1\sigma} + h.c.], \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde l identifica a célula e N_c é a quantidade de células do sistema. Utilizando a invariância de translação do modelo, podemos diagonalizar facilmente o seu hamiltoniano. Para isso, notamos que o estado $|\alpha, l\rangle$ localizado em um sítio qualquer α

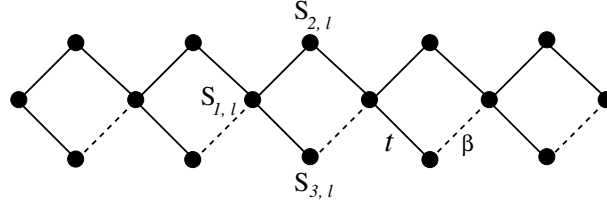


Figura 4.1: Ilustração da cadeia SSS. Na figura são apresentados os três sítios da célula unitária, bem como as conexões em que o hopping é $t(\equiv 1)$ ou β .

da célula l pode ser expandido em auto-estados $|\alpha, q\rangle$ do operador de translação, onde $\alpha = 1, 2, 3$ e $q = 2\pi l/N_c$, com $l = 0 \dots N_c - 1$. Aos estados estendidos $|\alpha, q\rangle$ podemos associar operadores de segunda quantização, e. g., o operador de criação

$$c_{\alpha,q}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_l e^{iql} c_{\alpha,l}^\dagger. \quad (4.3)$$

Na base $|\alpha, q\rangle$, o hamiltoniano (4.2) tem uma representação de blocos indexados por q , como podemos demonstrar invertendo a Eq. (4.3),

$$c_{\alpha,l}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_q e^{-iql} c_{\alpha,q}^\dagger, \quad (4.4)$$

e substituindo a Eq. (4.4) bem como o seu hermitiano conjugado na Eq. (4.2), a qual será reescrita como

$$H(\beta) = \sum_q [f_q c_{1q}^\dagger c_{2q} + g_q(\beta) c_{1q}^\dagger c_{3q} + h.c.], \quad (4.5)$$

onde $f_q \equiv -t(1 + e^{-iq})$ e $g_q(\beta) \equiv -t(1 + \beta e^{-iq})$. Vemos então que a matriz hamiltoniana apresenta N_c blocos desacoplados referentes aos N_c possíveis valores de q . A representação matricial de cada um desses blocos é a mesma, a menos do valor de

q :

$$\begin{pmatrix} 0 & f_q & g_q(\beta) \\ \bar{f}_q & 0 & 0 \\ \bar{g}_q(\beta) & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

Diagonalizando a matriz (4.6), encontraremos os seguintes auto-valores:

$$\begin{cases} \lambda_0 & = & 0; \\ \lambda_{q\pm}(\beta) & = & \pm t \sqrt{1 + \beta^2 + 4 \cos^2(q/2) + 2\beta \cos(q)}. \end{cases} \quad (4.7)$$

Portanto, o espectro de uma partícula apresenta uma banda *flat* formada por N_c orbitais localizados com energia nula, visto que o autovalor λ_0 é independente de q ; e duas bandas dispersivas constituídas de N_c níveis estendidos cada. Para as cadeias AB_2 ($\beta = 1$) e ABC ($\beta = 0$) os modos dispersivos são dados por:

$$\begin{cases} AB_2 : & \epsilon(q)_{\pm} = & \pm 2\sqrt{2}t \cos(q/2); \\ ABC : & \epsilon(q)_{\pm} = & \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2(q/2)}. \end{cases} \quad (4.8)$$

Na figura 4.2 representamos as bandas eletrônicas das cadeias AB_2 e ABC . Em particular, note que a cadeia ABC possui um *gap* $\Delta = 2t$ entre as bandas dispersivas, que não existe para a cadeia AB_2 . Esta característica faz com que a cadeia ABC seja isolante de banda nas densidades eletrônicas $n = 2/3$ e $n = 1$. O *gap* para estados itinerantes, relacionado às propriedades de condução é facilmente calculado: $\Delta = 2t$ para $n = 1$ e $\Delta = t$ para $n = 2/3$. Por outro lado, a cadeia AB_2 é condutora para todas as densidades acessíveis ao modelo. Ressaltamos que usar o termo “banda” quando nos referimos a estados localizados é naturalmente uma licença de linguagem, visto que esta palavra está relacionada a uma largura finita de energia dentro da qual as partículas podem ser encontradas. As bandas de orbitais sem

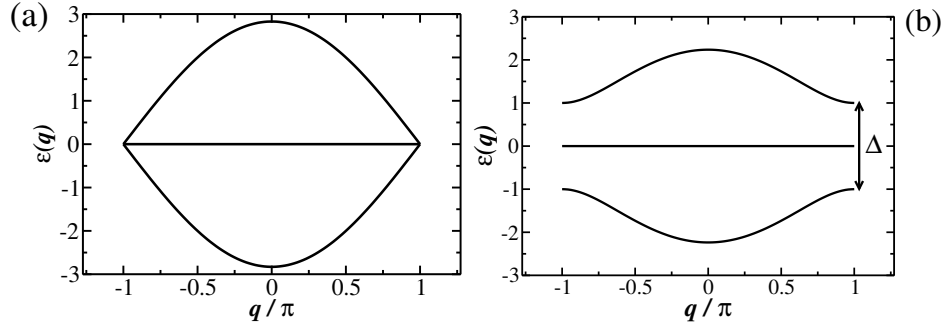


Figura 4.2: Bandas eletrônicas das cadeias AB_2 (a) e ABC (b) no limite *tight-binding*. Também mostramos o gap Δ entre as bandas dispersivas da cadeia ABC .

dispersão desempenham um papel dos mais relevantes nas propriedades magnéticas dessas cadeias quando a repulsão coulombiana U é finita. A discussão sobre essas propriedades será adiada para a Seção 4.3. Por enquanto, estudaremos uma simetria particular da cadeia AB_2 que ajudará no entendimento de várias propriedades dessa cadeia nos diversos regimes que serão tratados nesta tese.

4.2 Simetria local da cadeia AB_2 e sua relação com a cadeia alternada $\text{spin}-1/2/\text{spin}-1$

A menos de certos casos com acoplamentos frustrados (como o caso exibido na Fig. 1.5), a cadeia AB_2 é invariante pela troca das variáveis associadas aos sítios B_{1l} e B_{2l} de uma mesma célula l . Essa é uma simetria de reflexão em que o operador de troca π_l apresenta dois possíveis auto-valores $p_l = \pm 1$. O espaço de Hilbert conjunto dos sítios B_{1l} e B_{2l} pode ser seccionado em dois subespaços, um deles de paridade ímpar ($p_l = -1$) e o outro de paridade par ($p_l = 1$). Como a cadeia possui N_c

células, o número de subespaços de configurações de paridades locais distintos é 2^{N_c} . Desta maneira, utilizar esta simetria na diagonalização requer o cálculo do estado de mais baixa energia nesses 2^{N_c} subespaços. Entretanto, se o sistema for tratado com condições de contorno fechadas, o número de subespaços será reduzido por um fator $\sim N_c$ devido à simetria de translação aplicada aos arranjos de paridades locais. A fim de facilitar a discussão, estabelecemos uma convenção para identificar os diversos arranjos de paridades possíveis. A notação $(+)^x(-)^{N_c-x}$, por exemplo, representa o setor de simetria em que existem x células contíguas de paridade par e $N_c - x$ células contíguas de paridade ímpar; no mesmo espírito, $[(+)^1(-)^3]^{\frac{N_c}{4}}$ identifica o setor de simetria com um arranjo periódico do grupo contido nos colchetes; e assim sucessivamente.

Em uma abordagem direta do problema, estabeleceríamos a base de representação tratando os sítios B_{1l} e B_{2l} separadamente para, em seguida, projetar esta base no subespaço com o arranjo de simetrias desejado. Entretanto, utilizamos uma abordagem que consideramos mais eficiente. Nesta, as variáveis dinâmicas dos sítios B_{1l} e B_{2l} são pré-definidas no espaço de Hilbert conjunto dos dois sítios, ao qual associamos uma base formada por autovetores do operador de troca local. Com esse procedimento, a etapa de projeção da base (que exige um tempo computacional razoável) é eliminada. Na tabela 4.1 apresentamos os auto-estados de π_l e algumas de suas características, tais como a paridade, o spin total, o número de elétrons e o valor médio de duplas ocupações do estado. Nesta tabela, os auto-estados de π_l estão definidos em termos dos operadores de criação de estados antiligantes $|a_{l\sigma}\rangle$ e

p_l	<i>Estado</i>	S	<i>Descrição</i>	N_e	$\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle$
+	$\frac{1}{\sqrt{2}}(b_{\downarrow}^{\dagger}b_{\uparrow}^{\dagger} - a_{\downarrow}^{\dagger}a_{\uparrow}^{\dagger}) vac\rangle$	0	Singleto	2	0
+	$b_{\sigma}^{\dagger} vac\rangle, \sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$	1/2	Ligante	1	0
+	$ vac\rangle$	0	Vácuo	0	0
+	$\frac{1}{\sqrt{2}}(b_{\downarrow}^{\dagger}b_{\uparrow}^{\dagger} + a_{\downarrow}^{\dagger}a_{\uparrow}^{\dagger}) vac\rangle$	1/2	—	2	1
+	$a_{\downarrow}^{\dagger}a_{\uparrow}^{\dagger}b_{\sigma}^{\dagger} vac\rangle, \sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$	1/2	—	3	1
+	$a_{\downarrow}^{\dagger}a_{\uparrow}^{\dagger}b_{\downarrow}^{\dagger}b_{\uparrow}^{\dagger} vac\rangle$	0	Cheio	4	2
-	$\frac{1}{\sqrt{2}}(b_{\downarrow}^{\dagger}a_{\uparrow}^{\dagger} + b_{\uparrow}^{\dagger}a_{\downarrow}^{\dagger}) vac\rangle$	1	Tripleto	2	0
-	$b_{\uparrow}^{\dagger}a_{\uparrow}^{\dagger} vac\rangle$	1	Tripleto	2	0
-	$b_{\downarrow}^{\dagger}a_{\downarrow}^{\dagger} vac\rangle$	1	Tripleto	2	0
-	$a_{\sigma}^{\dagger} vac\rangle, \sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$	1/2	Antiligante	1	0
-	$b_{\uparrow}^{\dagger}b_{\downarrow}^{\dagger}a_{\sigma}^{\dagger} vac\rangle, \sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$	1/2	—	3	1
-	$\frac{1}{\sqrt{2}}(b_{\downarrow}^{\dagger}a_{\uparrow}^{\dagger} - b_{\uparrow}^{\dagger}a_{\downarrow}^{\dagger}) vac\rangle$	0	—	2	1

Tabela 4.1: Auto-estados do operador de troca dos sítios B_{1l} e B_{2l} da célula l . Também estão expressos a paridade do estado ($p_l = \pm 1$), o valor do spin total S , a denominação e a quantidade de sítios duplamente ocupados $\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle$ de cada estado.

ligantes $|b_{l\sigma}\rangle$ que são dados por

$$\begin{cases} |a_{l\sigma}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|B_{1l}\rangle - |B_{2l}\rangle); \\ |b_{l\sigma}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|B_{1l}\rangle + |B_{2l}\rangle). \end{cases} \quad (4.9)$$

Além disso, o estado de vácuo $|vac\rangle$ é definido como o estado vazio.

A presença de bandas *flat* neste modelo é facilmente revelada através desta simetria. Considere uma cadeia com N_c células em um auto-estado $|l\rangle$ de paridades não-homogêneas; especificamente, suponha uma única célula com paridade par e as outras com paridade ímpar: $|l\rangle = |(-)_1(-)_2...(+)_l...(-)_{N_c}\rangle$. Com condições de contorno fechadas, existirão N_c auto-estados com a mesma energia, devido à invariância de translação do modelo; portanto, podemos construir um estado $|q\rangle$ do operador

de translação através da seguinte composição:

$$|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{l=1}^{N_c} e^{iql} |l\rangle. \quad (4.10)$$

Visto que todas as componentes $|l\rangle$ apresentam a mesma energia, o estado $|q\rangle$ é degenerado em q . Salientamos, entretanto, que o auto-estado do hamiltoniano não é uma superposição coerente dos estados $|l\rangle$, como na Eq. (4.10). De fato, qualquer composição dos estados $|l\rangle$ com quaisquer coeficientes também teria a mesma energia. Desta forma, podemos concluir que a banda *flat* nesta cadeia é consequência de quebra espontânea da simetria de translação. A banda *flat* que aparece em $U = 0$ é formada por estados do tipo $|a_{l\sigma}\rangle$ (paridade ímpar), enquanto que os modos dispersivos são compostos de orbitais $|b_{l\sigma}\rangle$ (paridade par) e $|A_{l\sigma}\rangle$, como podemos ver calculando os autovetores da matriz (4.6). A ocupação de orbitais antiligantes por um único elétron implica na inversão de simetria da célula à qual o orbital pertence e, conseqüentemente, na presença da banda *flat* no espectro de uma partícula.

Um outro ponto importante diz respeito ao modelo de Heisenberg. O hamiltoniano para a cadeia AB₂ de Heisenberg pode ser escrito como

$$H = J \sum_{l=1}^{N_c} [\mathbf{S}_{Al} \cdot (\mathbf{S}_{B_1l} + \mathbf{S}_{B_2l}) + \mathbf{S}_{Al} \cdot (\mathbf{S}_{B_1,l-1} + \mathbf{S}_{B_2,l-1})], \quad (4.11)$$

onde $J = 4t^2/U$. Note que os spins dos sítios B de uma mesma célula acoplam simetricamente com os sítios A vizinhos. Tendo em conta que no modelo de Heisenberg sítios duplamente ocupados ou vazios são completamente suprimidos, vemos na tabela 4.1 que os únicos estados possíveis para os sítios B de uma mesma célula são os estados singlete e tripleto. Através do hamiltoniano (4.11) observamos facilmente que se houver uma única célula no estado singlete a cadeia ficará desacoplada

nesta célula. Por outro lado, se todas as células exibirem paridade ímpar, os sítios B de uma mesma célula estarão formando estados tripletos com spin total 1, ou seja, para este setor de arranjo de paridades o espectro da cadeia AB_2 de Heisenberg é idêntico ao espectro da cadeia alternada spin-1/2/spin-1 de Heisenberg [15]. Desta maneira, alguns dos nossos resultados podem ser comparados com resultados conhecidos para a cadeia spin-1/2/spin-1 [17]. Em seguida, passaremos à discussão do comportamento das AB_2 e ABC para a densidade de elétrons $n = 1$ em função do acoplamento coulombiano.

4.3 $U \neq 0$: Ferrimagnetismo

O teorema de Lieb e Mattis [63] assegura que o spin total S_g do estado fundamental do modelo de Heisenberg em redes bipartidas é dado por

$$S_g = \frac{|N_1 - N_2|}{2}, \quad (4.12)$$

onde N_1 (N_2) identifica o número de sítios da sub-rede 1 (2). Como já vimos, o modelo de Heisenberg é o limite de forte acoplamento ($U \gg t$) do modelo de Hubbard para $n = 1$. Ao demonstrar que S_g é o mesmo para qualquer U finito, Lieb provou que S_g para o modelo de Hubbard e $n = 1$ também é dado pela Eq. (4.12) [64]. Desta maneira, se $|N_1 - N_2| \sim N$ o sistema exibirá ferromagnetismo não-saturado para qualquer U finito. As cadeias AB_2 e ABC satisfazem as condições do teorema de Lieb e apresentam 1 sítio por célula unitária em uma das sub-redes e 2 sítios por célula unitária na outra, ou seja, para ambas as cadeias $S_g = N_c/2$. Um segundo ponto importante diz respeito à distribuição espacial dos spins para cadeias que apresentam ferromagnetismo não-saturado. Nestes casos, Tian mostrou que o estado

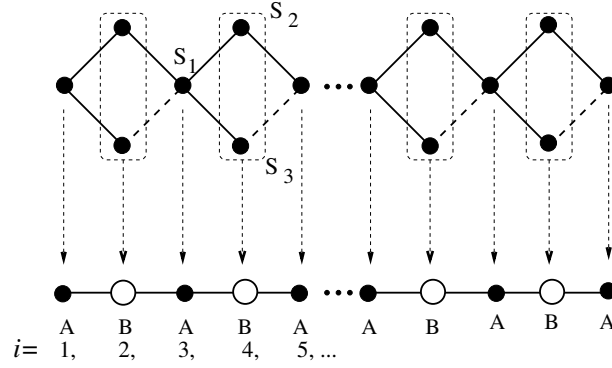


Figura 4.3: Mapeamento que gera a cadeia linear efetiva (CLE) a partir da cadeia SSS. Lembramos que para a cadeia AB_2 (ABC), $S_1 \equiv A$ ($\equiv A$), $S_2 \equiv B_1$ ($\equiv B$) e $S_3 \equiv B_2$ ($\equiv C$).

fundamental do modelo de Heisenberg é ferrimagnético, ou seja, apresenta ambas as ordens ferromagnética e antiferromagnética [65], enquanto que Tian e colaboradores [66, 23] estabeleceram rigorosamente a ordem ferrimagnética para o modelo de Hubbard em redes desta classe. Entretanto, embora esperemos ferrimagnetismo, a estrutura magnética específica das cadeias AB_2 a ABC não é conhecida através dos resultados gerais obtidos pelos teoremas acima mencionados, podendo depender fortemente da repulsão coulombiana e de flutuações quânticas.

A ordem magnética pode ser investigada através do fator de estrutura magnético:

$$S(q) = \frac{1}{N} \sum_{ml} e^{iq(m-l)} \langle \mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_l \rangle. \quad (4.13)$$

A Eq. (4.13) é definida sobre uma *cadeia linear efetiva* (CLE) de $2N_c$ sítios obtida através do mapa mostrado na Fig. 4.3. Nesta cadeia, a variável X_{Bl} associada ao sítio B da célula l será dada por $X_{2l} + X_{3l}$. Além disso, na expressão (4.13) q assume os valores $q = 2\pi l / (2N_c)$, com $l = 0 \dots (2N_c - 1)$.

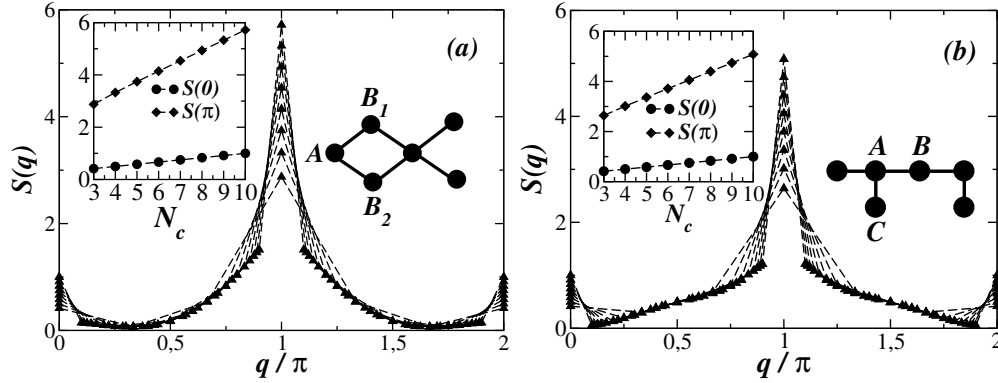


Figura 4.4: Fator de estrutura magnético $S(q)$ definido na CLE gerada a partir das cadeias AB_2 (a) e ABC (b) no limite Heisenberg ($U \gg t$). O tamanho do sistema varia de $N_c = 3$ até $N_c = 10$. A figura inserida mostra a dependência com o tamanho dos picos ferromagnético $[S(0)]$ e antiferromagnético $[S(\pi)]$. Linhas tracejadas são guias para o olho.

A quantidade $S(q)$ está relacionada à susceptibilidade magnética estática $\chi(q) = S(q)/(k_B T)$ a campo nulo, onde k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. A condição para uma ordem ferromagnética (antiferromagnética) é que $S(0)[S(\pi)] \sim N$. Desta forma, um estado com ordem ferrimagnética de longo alcance deve satisfazer completamente as duas condições, ou seja, $S(0) \sim N$ e $S(\pi) \sim N$. Como mostrado nas Figs. 4.4 e 4.5, este é o caso para as duas cadeias tanto no limite de fraco acoplamento ($U = 2t$) quanto no limite Heisenberg.

Devido à natureza crítica de ambas as cadeias em baixas temperaturas, o comprimento de correlação ξ e $\chi(q = 0)$ satisfazem um comportamento tipo lei de potência: $\xi \sim T^{-\nu}$ e $\chi \sim T^{-\gamma}$ para $T \rightarrow 0$. Como $\chi \sim S(q = 0)/T \sim N/T$ e $\xi \sim N$ em $T = 0$, teremos que $\chi \sim T^{-\gamma} \sim T^{-\nu-1}$, i. e., $\gamma - \nu = 1$, em concordância com os valores $\gamma = 2$ e $\nu = 1$ derivados através de técnicas de grupo de renormalização [28, 29].

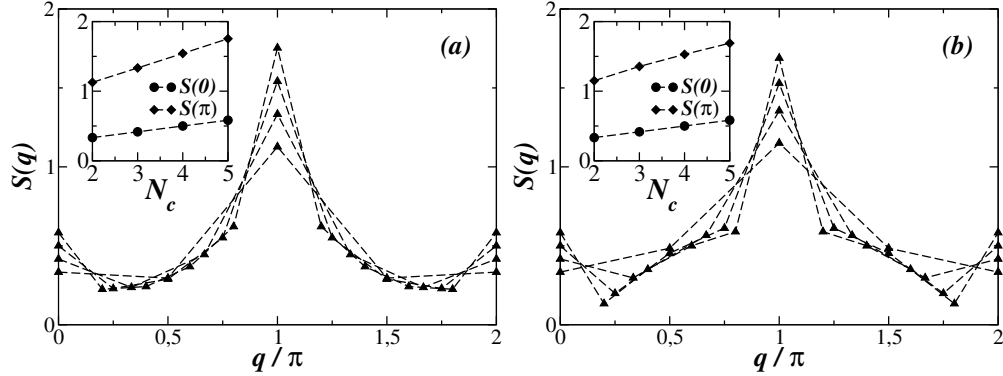


Figura 4.5: Fator de estrutura magnético $S(q)$ para as cadeias AB_2 (a) e ABC (b) usando o modelo de Hubbard para $U = 2$. O tamanho do sistema varia de $N_c = 2$ a $N_c = 5$. A figura inserida apresenta a dependência com o tamanho dos picos ferromagnético $[S(0)]$ e antiferromagnético $[S(\pi)]$. Linhas tracejadas são guias para o olho.

Na Fig. 4.6 apresentamos a magnetização por sítio ($\langle S_i^z \rangle$) e o valor médio da dupla ocupação ($\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle$) como função de U . Como o sistema se encontra em uma fase com simetria tipo $SU(2)$ espontaneamente quebrada, nós podemos escolher o setor de spin $S^z = \sum_i S_i^z = S_g$ para estudar as quantidades mencionadas. No limite Heisenberg ($U \gg t$, $\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle = 0$), a magnetização no volume, estimada utilizando-se cadeias com tamanhos até $N_c = 10$, são: $\langle S_A^z \rangle = -0.2925$ e $\langle S_{B_{1,2}}^z \rangle = 0.3962$, para a cadeia AB_2 , em concordância com cálculos de DMRG [19] e com os valores de $\langle S_A^z \rangle$ e $2\langle S_{B_{1,2}}^z \rangle$ para a cadeia spin- $\frac{1}{2}$ /spin-1 [17]. Por outro lado, para a cadeia ABC teremos $\langle S_A^z \rangle = -0.2567$, $\langle S_B^z \rangle = 0.3741$ e $\langle S_C^z \rangle = 0.3826$. Ressaltamos que a estrutura ferrimagnética exibe flutuações quânticas, fato esse que reduz a magnetização local em relação ao valor clássico, embora para qualquer $U \neq 0$ a magnetização por célula seja fixa em $1/2$. No limite sem interação ($U = 0$) nós observamos nas Figs. 4.6(a) e 4.6(b) que $\langle S_A^z \rangle = 0$ e $\langle S_{B_1(B)}^z + S_{B_2(C)}^z \rangle = 0.5$ para a

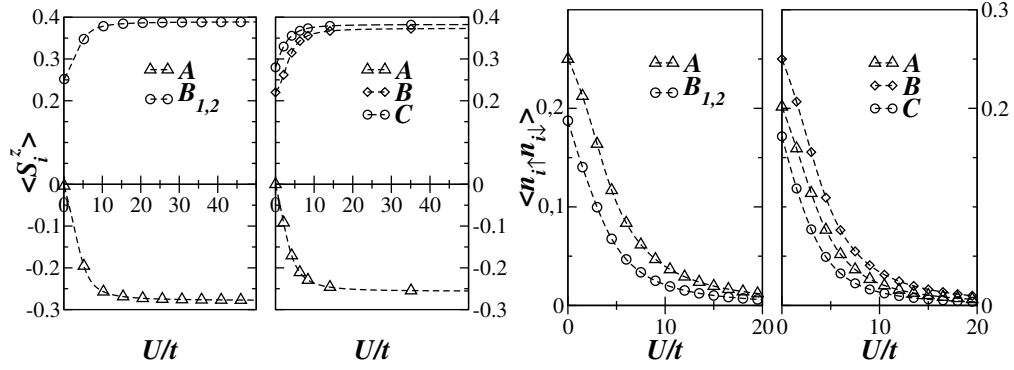


Figura 4.6: Magnetização por sítio $\langle S_i^z \rangle$ e valor médio da dupla ocupação $\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle$ como função de U para $N_c = 5$ nas cadeias AB_2 e ABC no setor de spin $S^z = S_g$. Linhas tracejadas são guias para o olho.

cadeia AB_2 (ABC). Esses resultados estão relacionados à estrutura de bandas (veja a Fig. 4.2): preenchendo as bandas até que a ocupação seja $n = 1$ e escolhendo o setor de simetria $S^z = S_g$, colocaremos N_c elétrons não-emparelhados no nível *flat*, estes ocupam apenas sítios $B_1(B)$ e $B_2(C)$. Salientamos ainda que o estado fundamental não é único. Para qualquer valor de $S \leq N_c/2$ é possível construir um estado fundamental. Quando a repulsão coulombina é introduzida, o estado com $S_g = N_c/2$ se separa e evolui continuamente do limite de fraco acoplamento para forte acoplamento, como mostrado na Fig. 4.6.

4.4 Excitações Magnéticas

Mágnons ferromagnéticos (que reduzem o spin total do estado fundamental) e antiferromagnéticos (que aumentam o spin total do estado fundamental) estão naturalmente associados a sistemas que exibem ordem ferrimagnética. As duas cadeias

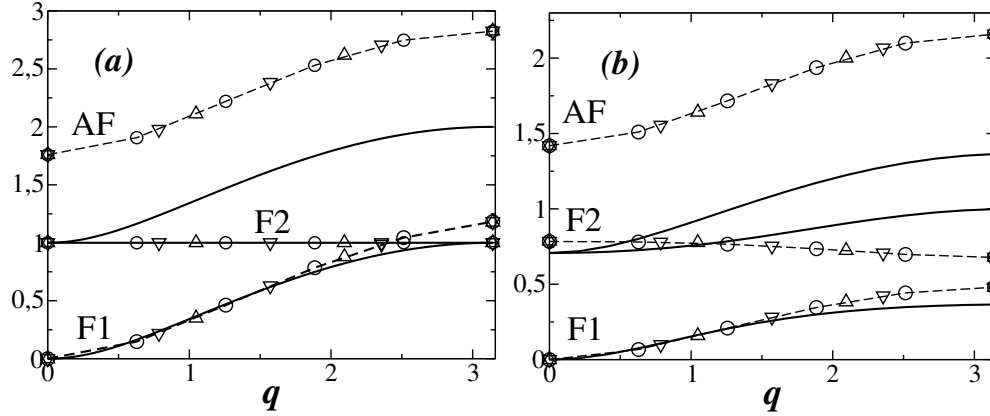


Figura 4.7: Modos de onda de spin ferromagnéticos (F1 e F2) e antiferromagnéticos (AF) para as cadeias AB_2 (a) e ABC (b) para $N_c = 10$ (círculos), 8 (triângulo para baixo), 6 (triângulo para cima) no modelo de Heisenberg. Linhas sólidas são resultados de TOSL da Ref. [26] (AB_2) e Ref. [67] (ABC); linhas tracejadas são guias para o olho.

apresentam três modos de onda de spin: um modo antiferromagnético (AF), definido como $\Delta E_{S+}^{AF}(q) = E^{(1)}(S^z = S_g + 1, q) - E_{GS}$; e dois modos ferromagnéticos (F1 e F2), dados por $\Delta E_{S-}^{Fi}(q) = E^{(i)}(S^z = S_g - 1, q) - E_{GS}$, onde E_{GS} é a energia do estado fundamental e $E^{(i)}(S^z, q)$ representa a menor energia ($i = 1$) e a energia da primeira excitação ($i = 2$) do setor $\{S^z, q\}$, com $q = 2\pi l/N_c$ e $l = 0, 1, \dots, N_c$.

Esses modos são calculados através de diagonalização exata em sistemas com condições de contorno periódicas e são exibidos na Fig. 4.7 para as duas cadeias no modelo de Heisenberg. Podemos observar que o modo antiferromagnético AF apresenta um *gap*, o qual será denotado por Δ_{S+} ; enquanto que o modo ferromagnético F1 não possui *gap*: este é o modo de Goldstone, cuja presença é esperada em consequência da fase com quebra espontânea da simetria do tipo $SU(2)$; e o modo ferromagnético F2 é uma excitação com *gap*, o qual denotaremos por Δ_{S-} .

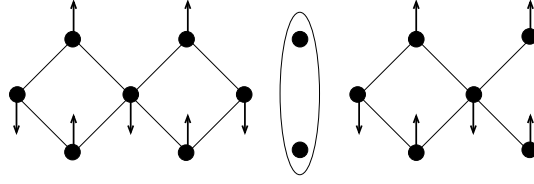


Figura 4.8: Ilustração do desacoplamento da cadeia AB_2 induzido pela excitação ferromagnética F2. A elipse está representando que os sítios B_1 e B_2 envolvidos estão em um estado singleto.

Podemos ver na Fig. 4.7(a) que o modo F2 da cadeia AB_2 é *flat*. Como já comentamos, modos *flat* para a cadeia AB_2 estão diretamente relacionados a paridades locais não-homogêneas. Além do caráter *flat* do modo F2, é possível mostrar de outras formas que o mesmo é uma superposição incoerente de estados localizados do tipo mostrado na Eq. (4.10). Uma delas é calcular o valor da função de correlação $C_{B_1 B_2} \equiv \sum_{l=1}^{N_c} \langle \mathbf{S}_{B_1 l} \cdot \mathbf{S}_{B_2 l} \rangle$. Para qualquer valor de q em uma cadeia com 10 células $C_{B_1 B_2} = 1.5$, significando que existem 9 células com sítios B_1 e B_2 em um tripleto ($\langle \mathbf{S}_{B_1 l} \cdot \mathbf{S}_{B_2 l} \rangle = 0.25$) e 1 célula em que B_1 e B_2 estão em um estado singleto ($\langle \mathbf{S}_{B_1 l} \cdot \mathbf{S}_{B_2 l} \rangle = -0.75$). Podemos também calcular a energia mais baixa no setor $(+)^1(-)^{N_c-1}$ e mostrar que é igual à energia do modo *flat*. Como já foi mostrado na Seção 4.2, esta excitação acarreta na quebra espontânea da simetria de translação e no desacoplamento da cadeia, como ilustrado na Fig. 4.8. Por outro lado, os modos AF e F1 são dispersivos e preservam as paridades locais do estado fundamental, ou seja, $p_l = -1$ para qualquer l nesses modos [15]. Desta forma, essas excitações são idênticas às da cadeia spin-1/2/spin-1 [17]. Surpreendentemente, cálculo de teoria de onda de spin linear (TOSL) [26] prevê que $\Delta_{S-} = 1$, um valor muito próximo da nossa estimativa para sistemas de até 10 células: $\Delta_{S-} = 1.0004J$. Esta estimativa foi melhorada calculando-se Δ_{S-} para sistemas de até 120 células

com DMRG, através do qual chegamos ao valor $\Delta_{S-} = 1.00035999J$. Vemos então que a correção devida a processos de ordem superior, desprezados na TOSL, é de $\approx 4 \times 10^{-4}$. Além disso, TOSL apresenta uma boa concordância para o modo F1 no limite de longos comprimentos de onda ($q \rightarrow 0$). Entretanto, TOSL e teoria de campo médio (TCM) [31] encontram $\Delta_{S+} = 1$, desviando da nossa estimativa $\Delta_{S+} = 1.7591J$, que está em excelente acordo com cálculos analíticos e numéricos para a cadeia spin-1/2/spin-1 [17]. Por outro lado, teoria de ondas de spin com interação (TOSI) [27] estabelece um resultado melhor que TOSL e TCM para Δ_{S+} , porém implica em um desvio maior para Δ_{S-} e, conseqüentemente, para o modo *flat*. Ressaltamos ainda que devido à diferença de simetrias entre os modos F1 e F2, um possível cruzamento de níveis não pode ser excluído *a priori*, como de fato é observado nos dados da Fig. 4.7(a): para $q \gtrsim 0.75\pi$ a excitação localizada se mostra abaixo da dispersiva.

Podemos observar pela Fig. 4.7(b) que a cadeia ABC apresenta três modos dispersivos. Como na cadeia AB_2 , o modo antiferromagnético é massivo com $\Delta_{S+} = 1.4189$. Mais uma vez, a aproximação de TOSL [67] faz uma previsão qualitativamente correta mas quantitativamente incorreta para o modo AF. Entretanto, um bom acordo é encontrado entre os nossos resultados e a previsão TOSL para o modo F1 (modo de Goldstone) no limite de longos comprimentos de onda. Além disso, o *gap* para o modo F2 é estimado em $\Delta_{S-} = 0.6778J$. Como podemos ver na Fig. 4.7(b), o modo F2 não é *flat* como na cadeia AB_2 , entretanto a largura da banda associada a este modo é ≈ 0.15 da largura do modo AF e 0.23 da largura do modo F1, ou seja, o modo F2 mesmo não sendo rigorosamente localizado, ainda assim é uma excitação consideravelmente mais lenta que as outras. Além disso, podemos notar claramente na Fig. 4.7(b) a repulsão de níveis entre os modos F1 e

F2, os quais na cadeia ABC apresentam o mesmo grupo de simetrias.

4.5 Platôs de Magnetização e Dependência dos *Gaps* de Ondas de Spin com U

Os *gaps* antiferromagnéticos acima mencionados são responsáveis por platôs na curva de magnetização por sítio [$m(B) = \langle S^z \rangle / N$] como função do campo magnético aplicado B no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$).

De fato, Oshikawa *et al.* [68] demonstraram que, se

$$\nu(s - m) = \text{inteiro}, \quad (4.14)$$

um platô pode aparecer na curva $m(B)$ para o modelo de Heisenberg no limite termodinâmico [68]. Na Eq. (4.14), s é o spin do sítio, m é a magnetização e ν é o número de sítios em uma unidade de período do estado fundamental para um dado valor de B . Para os modelos aqui considerados, $s = 1/2$ e existem três sítios por célula unitária ($\nu = 3$), então — a menos que o sistema quebre espontaneamente a invariância translacional e exiba um estado fundamental de maior periodicidade — platôs em $m = 1/6$ e $m = 1/2$ (saturação) são possíveis de acordo com a Eq. (4.14). No cálculo da curva de magnetização, devemos introduzir no hamiltoniano de Heisenberg um termo de Zeeman, $-\mathbf{B} \cdot \mathbf{S}$, contendo o campo magnético $\mathbf{B}$. O modelo, originalmente rotacionalmente invariante, terá um eixo preferencial na direção de $\mathbf{B}$. Para facilitar a computação, definimos o eixo de quantização z do modelo na direção

de $\mathbf{B}$, de forma que o hamiltoniano com o termo de Zeeman será dado por

$$H(B, S^z) = H(0, S^z) - BS^z. \quad (4.15)$$

As energias $E(B, S^z)$ do hamiltoniano (4.15) podem ser facilmente obtidas calculando-se as energias de $E(0, S^z)$ para todos os valores de S^z , visto que o eixo de quantização z é o mesmo nos dois casos ($B = 0$ e $B \neq 0$) e, portanto, os dois hamiltonianos apresentam auto-estados comuns:

$$E(B, S^z) = E(0, S^z) - BS^z. \quad (4.16)$$

Além disso, podemos considerar apenas $S^z > 0$. Em sistemas finitos, a curva $m(B)$ é tipo degrau e pode ser obtida considerando-se as diferenças entre as menores energias nos setores $S^z = i$ e $S^z = j$, ou seja, $E_{min}(0, i)$ e $E_{min}(0, j)$, respectivamente. Para as cadeias AB_2 e ABC , se $B < \Delta_{S+}$ e não-nulo o estado fundamental será encontrado no setor $S_0^z = N_c/2$. Podemos ver pela Eq. (4.16) que o campo B_{01} para o qual o estado fundamental passará ao setor $S_1^z = 1 + (N_c/2)$ será $B_{01} = \Delta_{S+}$ e como já determinamos que $\Delta_{S+} \neq 0$ no limite termodinâmico, $m(B)$ apresenta platôs em $m = 1/6$ de larguras 1.7591 e 1.4188 para as cadeias AB_2 e ABC , respectivamente, como mostrado na Fig. 4.9. A segunda transição ocorrerá para um campo $B_{12} = E(0, S_2^z = S_1^z + 1) - E(0, S_1^z)$ e assim sucessivamente. De uma forma mais geral, podemos construir a curva segundo o seguinte procedimento: partindo de $i = 0$ e definindo $S_0^z = N_c/2$, o valor de B para o qual ocorre a transição $(i + 1)$ será $B_{i,i+1} = \min\{\Delta(j, S_i^z)/(j - S_i^z), j \in (S_i^z, N/2]\}$, onde $\Delta(j, S_i^z) = E(0, j) - E(0, S_i^z)$ e atribuímos o valor de j no qual o mínimo é encontrado a S_{i+1}^z , incrementamos i de 1 até que $S_{i+1}^z = S_{max}^z = N/2$. O detalhe (1) das Figs. 4.9(a) e 4.9(b) evidenciam a

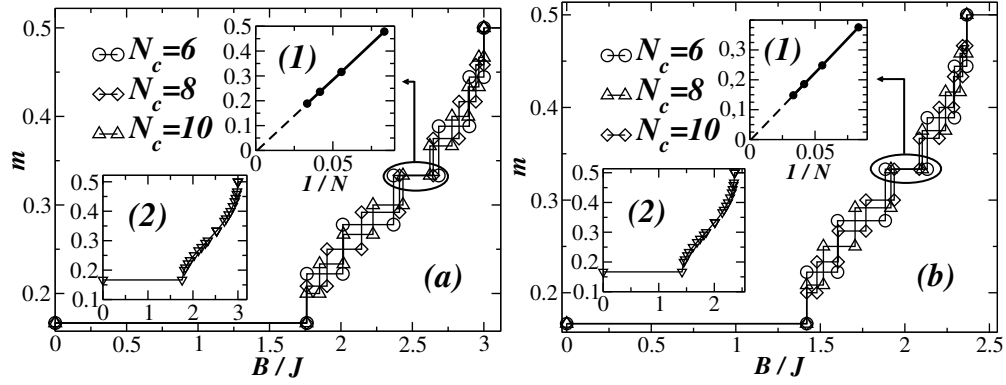


Figura 4.9: Magnetização como função do campo magnético aplicado B para o modelo de Heisenberg nas cadeias AB_2 (a) e ABC (b). O detalhe (1) mostra um estudo do comportamento com o tamanho da largura do degrau em $m = 1/3$; o detalhe (2) apresenta a curva traçada através dos pontos médios dos degraus de magnetização de sistemas finitos, exceto em regiões de platô.

ausência de um possível platô em $m = 1/3$, que estaria relacionado a uma duplicação do período do estado fundamental [$\nu = 6$ na Eq. (4.14)]. Para campos maiores que B_{01} a magnetização cresce da forma esperada [68], como mostrado no detalhe (2) das Figs. 4.9 (a) e 4.9 (b), até a magnetização de saturação $m = 1/2$ para $B_S = 3J$ e $B_S = 2.3660J$, que são os campos de saturação das cadeias AB_2 e ABC de Heisenberg, respectivamente, e que definem o início do segundo platô. O comportamento de $m(B)$ contrasta com o comportamento linear que é previsto por TCM [31].

Uma questão interessante é determinar a dependência dos *gaps* AF e F2 com a repulsão coulombiana U no modelo de Hubbard: $\Delta_{S+}(U)$ (largura do platô em $m = 1/6$) e $\Delta_{S-}(U)$, respectivamente. Com o objetivo de reduzir efeitos de tamanho finito no cálculo de $\Delta_{S\pm}(U)$, nós escolhemos condições de contorno que apresentam a menor diferença de energia entre o estado fundamental e os estados excitados. Na

Fig. 4.10 exibimos $\Delta_{S\pm}(U)$ após extrapolação para o limite termodinâmico segundo o *ansatz* [69]:

$$\Delta = \Delta_{\infty} + c_1 N^{-2} + c_2 N^{-4}, \quad (4.17)$$

utilizando-se valores calculados para sistemas com $N = 9, 12, 15$ e 18 para a cadeia AB_2 ; e $N = 6, 9, 12$ e 15 para a cadeia ABC . Note que $\Delta_{S+}(U = 0) = 0$ e $2t$ para as cadeias AB_2 e ABC , respectivamente. Este fato pode ser entendido se observarmos que $\Delta_{S+}(U = 0)$ é dado pelo *gap* Δ entre as duas bandas eletrônicas dispersivas do limite *tight-binding* mostrado na Fig. 4.2: para U pequeno, uma excitação com spin mais alto que o estado fundamental é realizada pela promoção de um elétron da banda dispersiva inferior para a banda dispersiva superior. Além disso, $\Delta_{S+}(U \rightarrow 0) \sim U^x$, $x \simeq 2$, para a cadeia AB_2 , enquanto que para a cadeia ABC $\Delta_{S+}(U \rightarrow 0)$ aumenta linearmente até atingir o valor de $2t$ do limite *tight-binding*. Para ambas as cadeias, podemos identificar um *crossover* para o limite Heisenberg: $\Delta_{S+} \sim J$, em consonância com os resultados da Fig. 4.7. Finalmente, podemos notar que $\Delta_{S-}(U \rightarrow 0)$ se anula linearmente com U , para ambas as cadeias, seguindo o comportamento do *gap* entre as bandas eletrônicas *up* e *down flats* da aproximação Hartree-Fock [7].

4.6 Conclusões

Neste capítulo apresentamos as bandas eletrônicas do limite *tight-binding* ($U = 0$) das cadeias AB_2 e ABC de Hubbard. Analisamos, ainda, uma simetria de troca local da cadeia AB_2 que é extremamente relevante para o entendimento físico desta cadeia. Estudamos a estrutura magnética específica das cadeias AB_2 e ABC em banda semi-cheia, explicitando, em particular, a ordem ferrimagnética do estado

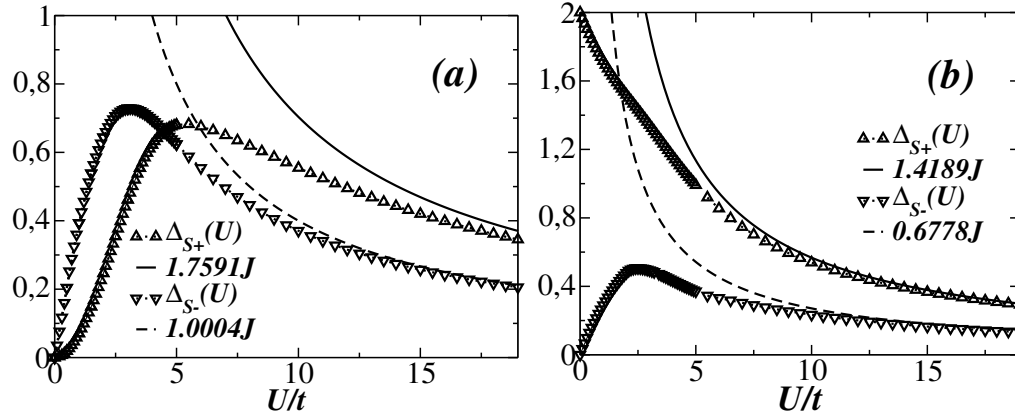


Figura 4.10: *Gaps* AF (Δ_{S+}) e F2 (Δ_{S-}) de ondas de spin em unidades de t para a cadeia AB_2 (a) e ABC (b) como função de U para o modelo de Hubbard. Linha sólida (tracejada) é o *gap* AF (F2) para o modelo de Heisenberg com $J = 4t^2/U$; linhas pontilhadas são guias para o olho.

fundamental. Em conexão com esta ordem, ambas as cadeias exibem três modos de onda de spin, os quais foram estudados em detalhe no limite Heisenberg. Uma desses modos é antiferromagnético e necessita de uma energia finita para ser excitado. Esta excitação massiva é responsável por um platô na curva de magnetização em função do campo magnético em ambos os modelos de Heisenberg. Os outros modos são ferromagnéticos: um deles é o modo de Goldstone, induzido pela quebra espontânea da invariância de rotação do modelo; enquanto que o outro modo é massivo, com banda razoavelmente estreita no caso da cadeia ABC e banda sem dispersão (modo localizado) no caso da cadeia AB_2 .

Capítulo 5

Cadeia AB_2 Dopada

Neste capítulo apresentaremos um amplo estudo do modelo de Hubbard na cadeia AB_2 dopada, nos regimes de fraco e forte acoplamento (modelo $t - J$), incluindo o limite U -infinito. Devido à topologia especial de sua célula unitária, a cadeia exibe uma grande variedade de fases quando o estado ferrimagnético ($n = 1$) é dopado com buracos ($\delta = 1 - n$). Nos regimes de fraco e forte acoplamento (com U finito) para $\delta \ll 1$, o estado ferrimagnético ($\delta = 0$) cede lugar a estados espirais de spin; enquanto que no limite U -infinito, observamos o estado ferromagnético metálico de Nagaoka. Aumentando a dopagem, o sistema exibe separação de fases antes de atingir um estado RVB (*resonating valence bond*) de curto alcance com *gap* de spin e isolante para $\delta = 1/3$. Finalmente, para $\delta > 1/3$ observamos um cruzamento (*crossover*), que antecipa o comportamento líquido de Luttinger encontrado para $\delta > 2/3$.

5.1 Descrição do Modelo

O hamiltoniano de Hubbard, Eq. (2.2), para uma cadeia com N_c células unitárias e N sítios pode ser escrito como

$$H = -t\sqrt{2} \sum_{l=1, \sigma}^{N_c} [b_{l\sigma}^\dagger (A_{l\sigma} + A_{l+1, \sigma}) + \text{h.c.}] + U \sum_{i=1}^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (5.1)$$

onde $A_{l\sigma}^\dagger$ e $b_{l\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(B_{1,l\sigma}^\dagger + B_{2,l\sigma}^\dagger)$ são os operadores de criação de um elétron com spin σ no sítio A e em um estado ligante entre os sítios B_1 e B_2 da célula l , respectivamente, $t(\equiv 1)$ é a amplitude de *hopping* e U é o acoplamento coulombiano, como usual. Para $U = \infty$, a dupla ocupação é completamente excluída e o hamiltoniano terá a seguinte forma:

$$H = -t\sqrt{2} \sum_{l=1, \sigma}^{N_c} P_G [b_{l\sigma}^\dagger (A_{l\sigma} + A_{l+1, \sigma}) + \text{h.c.}] P_G, \quad (5.2)$$

onde $P_G = \prod_i (1 - n_{i\uparrow} n_{i\downarrow})$ é o operador de projeção de Gutzwiller para estados simplesmente ocupados, o qual é obtido do modelo $t - J$

$$H = -t\sqrt{2} \sum_{l=1, \sigma}^{N_c} P_G [b_{l\sigma}^\dagger (A_{l\sigma} + A_{l+1, \sigma}) + \text{h.c.}] P_G + \frac{J}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j), \quad (5.3)$$

tomando-se $J \equiv 4t^2/U = 0$ (veja a Seção 2.2). A simetria local mencionada na Seção 4.2 continua válida, ou seja, os hamiltonianos são invariantes pela troca dos sítios B de uma mesma célula. No cálculo de algumas quantidades, também faremos uso da cadeia linear efetiva (CLE) definida na Seção 4.3 e gerada pelo mapa mostrado na Fig. 4.3.

No capítulo anterior estudamos a cadeia AB_2 com banda semi-preenchida, revelando a sua estrutura ferrimagnética, em acordo com o teorema de Lieb [64], para qualquer valor de U finito. Por outro lado, no caso U -infinito e semi-preenchimento da banda, o spin total S_g do estado fundamental é extensivamente degenerado: neste limite a interação magnética $J = 0$, ou seja, para $\delta = 0$ a carga está congelada e o acoplamento entre spins é nulo. Dopando o sistema com buracos, ativamos a itinerância eletrônica. Conseqüentemente, toda a física resulta deste único processo. A fim de reduzir a energia cinética — único termo do hamiltoniano —, os buracos tendem a escolher um ambiente ferromagnético. Em conexão com esta afirmação intuitiva, Nagaoka [70] forneceu uma prova rigorosa de que sob certas condições de rede e um buraco, o estado fundamental é ferromagnético. Neste limite, a cadeia AB_2 submetida a condições de contorno periódicas e um buraco ($N_e = N - 1$) satisfaz os requisitos do teorema de Nagaoka para ferromagnetismo saturado [7, 32]. Para o ferromagnetismo de Nagaoka e o ferrimagnetismo de Lieb o estado fundamental é homogêneo em paridade (Seção 4.2) com $p_l = -1$ para qualquer célula l .

Neste capítulo consideraremos o efeito de dopagem, $\delta = 1 - (N_e/N)$, nos regimes de fraco e forte acoplamentos, incluindo o limite U -infinito. No cálculo de diagonalização exata (Seção 3.2), as condições de contorno são escolhidas de modo a minimizar a energia, exceto para $U = 2$ e $\delta \leq 1/3$ [Fig. 5.1(c)] em que a condição de contorno (periódica ou antiperiódica) é tal que o vetor de onda de Fermi, k_F , do limite termodinâmico faz parte do conjunto de vetores de onda do sistema finito [71]. Usamos DMRG de tamanho finito (Seção 3.3) para cadeias abertas com sítios A em seus extremos e cadeias abertas com 98 sítios apresentando sítios B em seus extremos, retraindo de 364 a 546 estados por bloco na última *sweep*. O máximo peso descartado na última *sweep* foi tipicamente $\sim 10^{-7}$, exceto para fases com simetrias

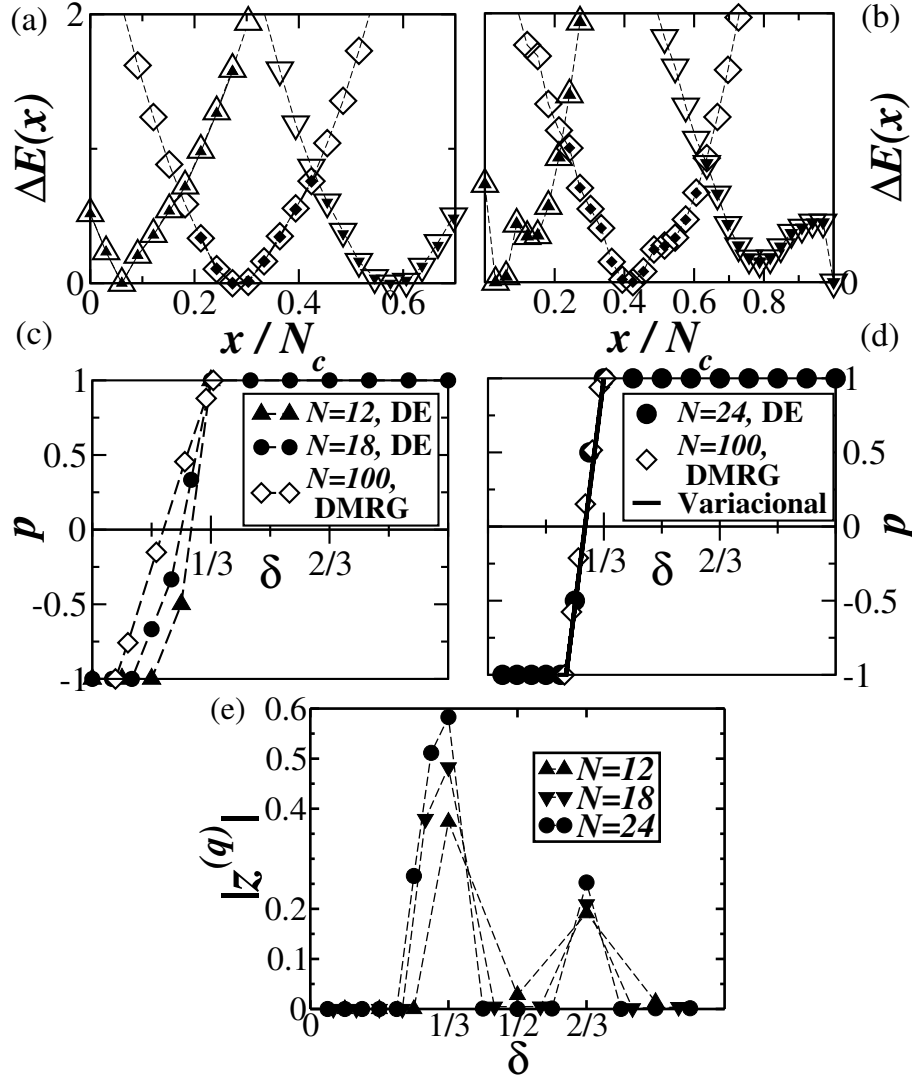


Figura 5.1: Resultados de DMRG para a diferença entre a energia mais baixa do setor de simetria $(-)^x(+)^{N_c-x}$ e o estado fundamental para $N = 100$ ($N_c = 33$) para (a) $U = 2$ com $\delta = 0.32$ (triângulo), $\delta = 0.26$ (losango) e $\delta = 0.18$ (triângulo invertido); (b) $U = \infty$ para $\delta = 0.32$ (triângulo), $\delta = 0.28$ (losango) e $\delta = 0.24$ (triângulo invertido), considerando 108 estados por bloco (símbolos vazios) e 216 estados por bloco (símbolos cheios). Média das paridades locais, p , como função de δ para (c) $U = 2$ e (d) $U = \infty$, o termo DE indica que o cálculo foi realizado através de diagonalização exata. (e) Resultados de diagonalização exata para $|z^{(q)}|$. Linhas tracejadas são guias para o olho.

ímpares homogêneas e $U = 2$, onde o peso descartado foi $\sim 10^{-5}$. Nos cálculos com DMRG nós tratamos os sítios B_1 e B_2 como um sítio composto com um espaço de Hilbert de 9 estados para o modelo $t - J$ e o limite U -infinito (estados sem dupla ocupação expostos na Tabela 4.1) e de 16 estados para fraco acoplamento (todos os estados da Tabela 4.1). Entretanto, tendo em vista a simetria de troca local, podemos decompor este super-sítio em seus dois setores de paridade: $+1$ e -1 . Sob esse esquema, nós consideramos todos os setores com simetria de paridade da forma $(-)^x(+)^{N_c-x}$, com x células contíguas de simetria ímpar em um lado da cadeia aberta e $N_c - x$ células contíguas de simetria par no outro lado. A energia é estudada em função de x para um número crescente de estados retidos por bloco, com o objetivo de localizar o valor de x para o qual a energia é mínima, definido como $\bar{x}$, como mostrado nas Figs. 5.1(a) e 5.1(b). Além disso, verificamos que os estados de separação de fases ($\bar{x} \neq 0$ e $\bar{x} \neq 1$) são estáveis em relação à formação de fases mistas, compostas de domínios de paridades ímpares menores, pela observação da energia de configurações de paridades do tipo $(-)^{\bar{x}-1}(+)^l(-)(+)^{N_c-\bar{x}-l}$ em função de l . Desenvolvemos, ainda, uma abordagem variacional simples para $U = \infty$ e $\delta \leq 1/3$, que será exposta em detalhe na Seção 5.5. Os resultados obtidos através deste cálculo estão mostrados nas Figs. 5.1(c) e 5.1(d).

Nas Figs. 5.1(c) ($U = 2$) e 5.1(d) ($U = \infty$) apresentamos também a paridade local média,

$$p \equiv \frac{1}{N_c} \sum_{l=1}^{N_c} p_l, \quad (5.4)$$

como função da dopagem, calculada usando os métodos acima mencionados. Em ambos os regimes, observamos a ocorrência de uma fase homogênea próxima de $\delta = 0$ com $p = -1$. Para dopagens maiores o sistema separa fases, exibindo células

de paridade ímpar em uma região da cadeia e células de paridade par na outra. Definindo $\delta_{SF}(U)$ como a dopagem mais baixa em que a separação de fases é observada para um dado valor de U , encontramos que $\delta_{SF}(2) \approx 0.07$ e $\delta_{SF}(\infty) \approx 0.22$. Para $\delta \geq 1/3$ o estado fundamental é homogêneo com $p = 1$.

A fim de apresentar uma visão geral das propriedades de condução das fases da cadeia AB_2 no limite U -infinito, nós exibimos na Fig. 5.1(e) a quantidade [72]

$$|z^{(q)}| = |\langle \exp(\frac{2\pi qi}{L} \sum_j x_j) \rangle|, \quad (5.5)$$

calculada na CLE através de diagonalização exata, onde $L = 2N_c$, $x_j = jn_j$, n_j é a densidade eletrônica no sítio j e q é tal que $\frac{N_e}{L} = \frac{p}{q}$, com p e q co-primos. A fase de $z^{(q)}$ corresponde ao valor médio do operador de posição no estado fundamental, enquanto que o seu módulo define o comprimento de localização do sistema; em um estado isolante, $|z^{(q)}| \rightarrow 1$, com $L \rightarrow \infty$, enquanto que em um estado condutor, $|z^{(q)}| \rightarrow 0$, para condições de contorno fechadas [72]. O aumento de $|z^{(q)}|$ com o tamanho do sistema para $\delta = 2/3$ e $1/3$, bem como na região de separação de fases, evidenciam os estados isolantes nestas dopagens. Uma melhor fundamentação dessas conclusões será apresentada na Seção 5.4, onde exporemos o peso de Drude, calculado através de diagonalização exata, e o *gap* de carga para sistemas maiores, calculado através de DMRG.

Para o modelo $t - J$, apresentamos na Fig. 5.2 a região de dopagens em que ocorre separação de fases para $0 < J < 0.4$. Notamos que esta se estabelece em uma faixa intermediária de dopagens entre $\delta_{SF}(2)$ e $\delta_{SF}(\infty)$. De fato, com o aumento de J (redução de U), δ_{SF} tende a diminuir, o que é consistente com a relação entre $\delta_{SF}(2)$ e $\delta_{SF}(\infty)$. Ressaltamos que esta consistência é esperada, visto que para

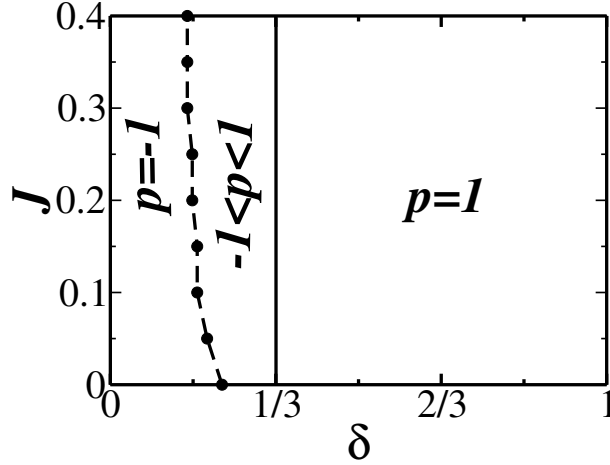


Figura 5.2: Regiões homogêneas ($p = \pm 1$) e não-homogêneas em função da dopagem δ e do acoplamento magnético J para o modelo $t - J$. A linha com círculos e a linha reta em $\delta = 1/3$ limitam a região em que o sistema exibe separação de fases ($-1 < p < 1$).

$J = 0.4$ ($U = 10$) o modelo $t - J$ ainda se encontra no regime perturbativo do modelo de Hubbard. Além disso, as dopagens $1/3$ e $2/3$ também são isolantes, como para os acoplamentos $U = 2$ e $U = \infty$, ao menos para os valores de J estudados ($0 < J < 0.4$).

5.2 Estados espirais e Ferromagnetismo Saturado

Nas Figs. 5.3(a) e 5.3(b), expomos o fator de estrutura magnético:

$$S(q) = \frac{1}{S_{Lieb}(S_{Lieb} + 1)} \sum_{l,m}^{2N_c+1} e^{iq(l-m)} \langle \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_m \rangle, \quad (5.6)$$

calculado no setor $S^z = 0$ e $U = 2$ usando DMRG para a CLE. Como uma primeira observação, note a presença de picos em $q = 0$ e $q = \pi$ para $\delta = 0$, como con-

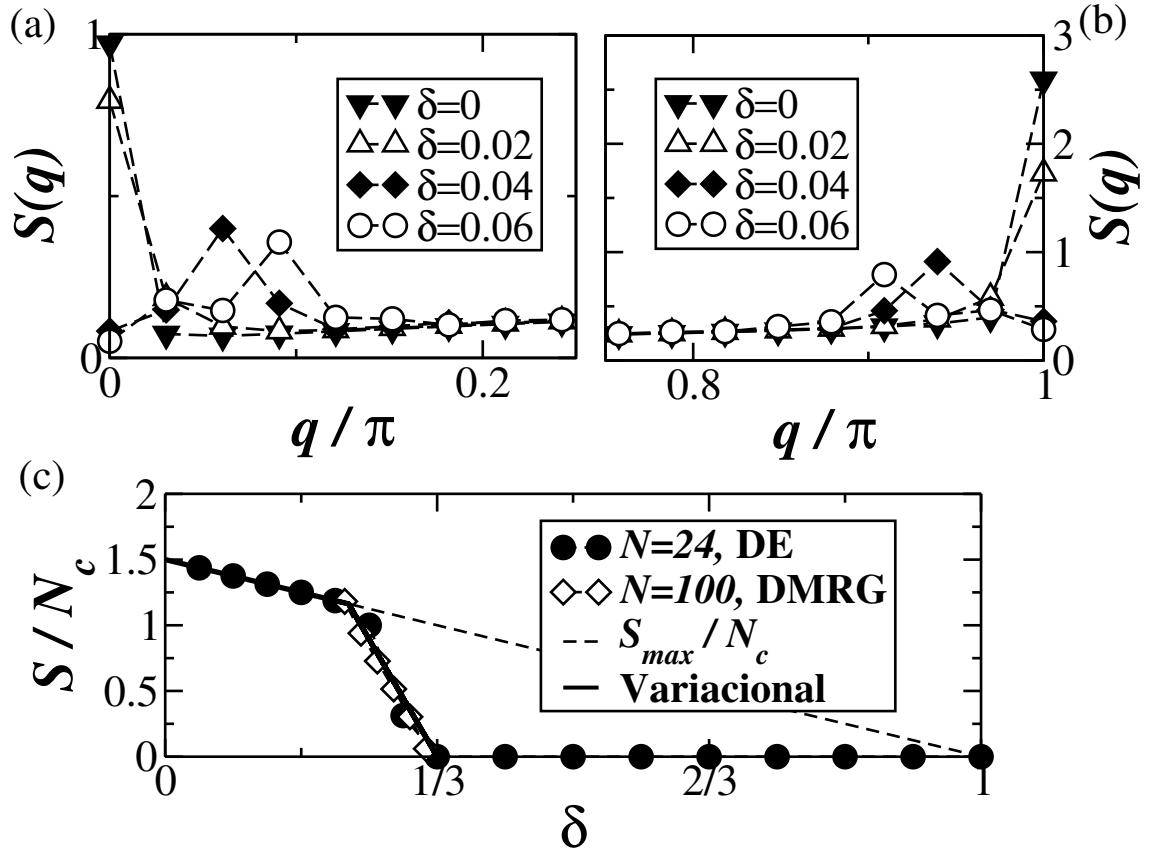


Figura 5.3: (a) e (b): Fator de estrutura magnético para $U = 2$ e $N = 100$ na região de baixa dopagem. (c) Spin total por célula, S/N_c , em função de δ para $U = \infty$. O termo DE em (c) indica que o cálculo foi realizado através de diagonalização exata e S_{max}/N_c é a curva para o estado completamente polarizado.

seqüência da estrutura ferrimagnética estudada no capítulo anterior. Esses picos estão presentes até uma dopagem de dois buracos ($\delta = 0.02$); entretanto, não fica claro se a fase ferrimagnética é de fato robusta na presença de buracos no limite termodinâmico, ou se esta é uma característica do tamanho finito do sistema estudado. Por outro lado, com aumento da dopagem, picos relacionados a estados espirais de spin em posições que dependem da dopagem surgem perto de $q = 0$ e $q = \pi$. A análise do *gap* de carga,

$$\Delta_c = E(N_e + 1) + E(N_e - 1) - 2E(N_e), \quad (5.7)$$

sugere que esses estados são metálicos, em contraposição ao estado ferrimagnético isolante de Mott encontrado para $\delta = 0$.

Na Fig. 5.3(c), apresentamos o spin total do estado fundamental como função da dopagem para $U = \infty$. Para $\delta < \delta_{SF}(\infty)$, ferromagnetismo metálico devido à cinemática dos buracos (mecanismo de Nagaoka) é observado. Em relação a esta fase, também consideramos a presença de um fluxo Φ do tipo Aharonov-Bohm para uma cadeia fechada através da transformação de *gauge*:

$$\begin{cases} b_{l\sigma} & \rightarrow b_{l\sigma} e^{2\pi\Phi l/N_c}; \\ A_{l\sigma} & \rightarrow A_{l\sigma} e^{2\pi\Phi l/N_c}, \end{cases} \quad (5.8)$$

com $\Phi_0 = hc/e \equiv 1$. A variação do fluxo é equivalente a uma mudança na condição de contorno: $\Phi = 0$ representando condição periódica de contorno e $\Phi = 1/2$ anti-periódica. Na Fig. 5.4(a) nós apresentamos a dependência do *gap* Δ_0 entre a energia mais baixa para um fluxo Φ e aquela do estado ferromagnético ($\Phi \equiv \Phi_F$) como função de $\tilde{\Phi} = |\Phi - \Phi_F|$ em $\delta = 1/6$. Vários cruzamentos de níveis podem ser

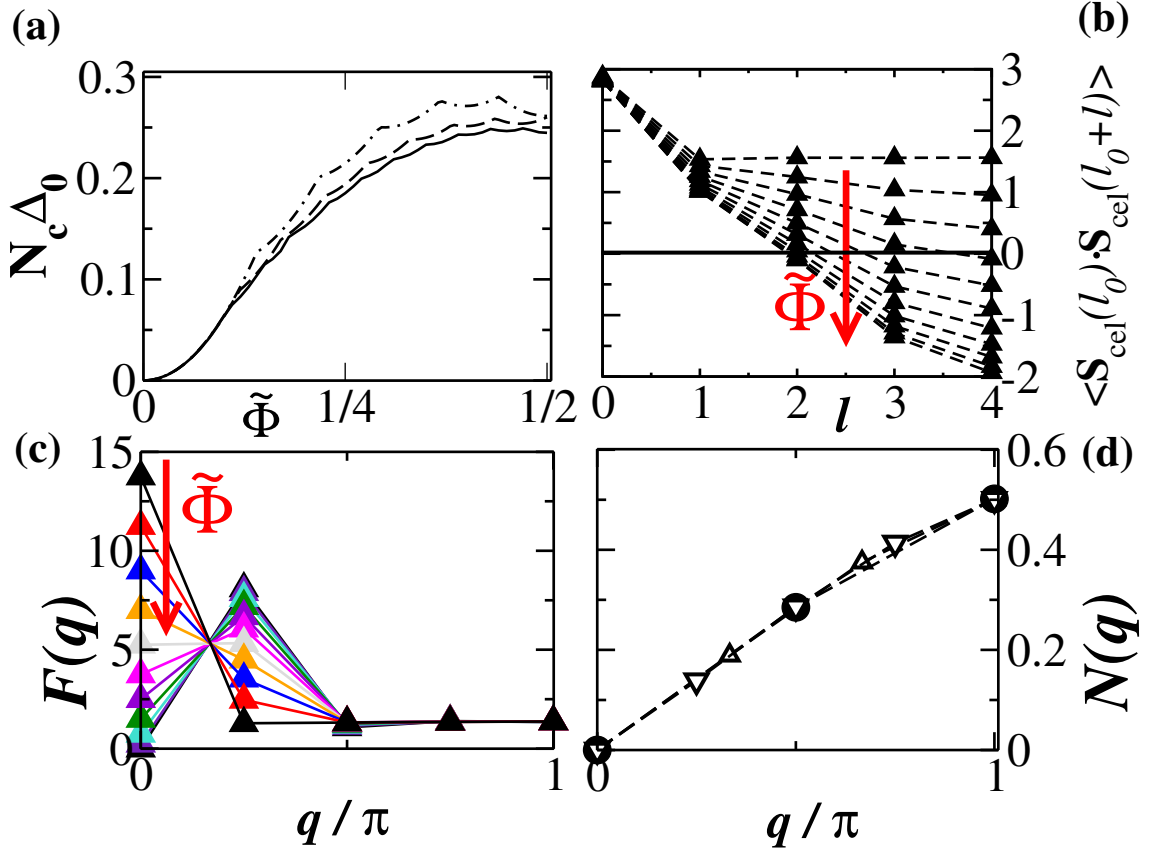


Figura 5.4: Resultados de diagonalização exata para (a) N_c vezes o *gap* de energia Δ_0 entre a energia do estado ferromagnético ($\Phi = \Phi_F$) e a energia mais baixa para um fluxo Aharonov-Bohm Φ como função de $\tilde{\Phi} = |\Phi - \Phi_F|$ para $\delta = 1/6$ e $N_c = 4$ (linha traço-ponto), 6 (linha tracejada) and 8 (linha sólida). Cálculos de diagonalização exata para o comportamento com $\tilde{\Phi}$ da função de correlação de spin $\langle \mathbf{S}_{\text{cell}}(l_0) \cdot \mathbf{S}_{\text{cell}}(l_0 + l) \rangle$ entre os spins celulares como função de l (b) e o fator de estrutura magnético como função do vetor de onda da rede q para $\delta = 1/6$. (d) Fator de estrutura de carga calculado no estado de energia mais baixa para qualquer $\tilde{\Phi}$ e $\delta = 1/6$ com $N_c = 4$ ($\bullet$), 6 ($\blacktriangle$) e 8 (∇).

identificados na curva $\Delta_0(\Phi)$. De fato, com o aumento do fluxo a partir de Φ_F , o spin total diminui de seu valor máximo possível, $S = N_e/2$, para o valor mínimo: $S = 0$ ($S = 1/2$) se N_e for par (ímpar), um comportamento também observado na rede quadrada [73]. Note que $N_c\Delta_0$ tende à saturação quando o tamanho do sistema aumenta, indicando que o espaçamento entre níveis diminui com $1/N_c$. Esses resultados sugerem que o estado fundamental termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) exibe quebra espontânea de invariância de rotação como resultado de uma combinação ergódica de uma infinidade de estados ($N_c \rightarrow \infty$), incluindo o estado singleto espiral [74, 75]. Nas Figs. 5.4(b) e 5.4(c), apresentamos a função de correlação entre os spins das células, $\mathbf{S}_{cel}(l) = \mathbf{S}_A(l) + \mathbf{S}_{B_1}(l) + \mathbf{S}_{B_2}(l)$, e o fator de estrutura magnético:

$$F(q) = \frac{1}{N_c} \sum_{\langle l, m \rangle} e^{iq(l-m)} \langle \mathbf{S}_{cel}(l) \cdot \mathbf{S}_{cel}(m) \rangle, \quad (5.9)$$

como função da distância l e do vetor de onda $q = 2\pi l/N_c$, $l = 0, \dots, N_c$, respectivamente. Como podemos notar, os estados ferromagnético e singleto espiral estão continuamente conectados, de forma que todos os estados contribuindo para o estado fundamental termodinâmico exibem ordem de longo alcance. Em particular, com o aumento do fluxo a partir de Φ_F , o pico de $F(q)$ observado em $q = 0$ (ferromagnetismo) decresce monotonicamente com Φ , enquanto que o pico em $q = 2\pi/N_c$ fica mais saliente. Notamos ainda que o fator de estrutura de carga

$$N(q) = \frac{1}{N_c} \sum_{\langle l, m \rangle} e^{iq(l-m)} \langle \Delta n_l \Delta n_m \rangle, \quad (5.10)$$

onde $\Delta n_l = n_l - \langle n_l \rangle$ e n_l é a ocupação eletrônica da célula l , não é afetado pela variação do fluxo e apresenta um pico no vetor de onda $q = 2k_F = \pi$ [Fig. 5.4(d)],

onde k_F é o vetor de onda de Fermi para férmions não-interagentes sem-spin [7], o qual é dado por $k_F = 3\pi\delta$, $\delta \leq 1/3$.

Nas Figs. 5.5(a) e 5.5(b) apresentamos o fator de estrutura magnético $S(q)$ para o modelo $t-J$ em uma cadeia com $N = 98$ e $J = 0.3$ para vários valores de δ . Como no caso $U = 2$, encontramos um valor de dopagem diferente de zero, $\delta = 2/98$, em que a cadeia exibe fase ferrimagnética, apesar de ainda não conseguirmos afirmar se este é um efeito de tamanho finito, enquanto que dopagens maiores estabilizam estados espirais. Na Fig. 5.5(c) expomos o desvio, Δ_q , do vetor de onda no qual se localiza o pico do fator de estrutura, em relação ao vetor de onda da ordem antiferromagnética ($q = \pi$), normalizado por π :

$$\frac{\Delta_q}{\pi} = 1 - \frac{q}{\pi}. \quad (5.11)$$

Em particular, note que Δ_q/π expõe dois regimes lineares em função de δ com uma transição ocorrendo em $\delta \sim 0.08$; um comportamento que ainda não elucidamos. É interessante mencionar que a ocorrência de fases espirais em oxocuprados tem sido um tópico recorrente [76].

Na Fig. 5.5(d) apresentamos a linha de transição $J_T = J_T(\delta)$ do estado completamente polarizado de Nagaoka para estados com magnetizações menores. Note o excelente ajuste dos pontos para $N_c = 8$ com uma forma quadrática. Para a rede quadrada, Eisenberg *et al.* também encontram que a linha de transição segue uma forma quadrática [77]; entretanto, os seus resultados indicam que o estado de Nagaoka é instável com respeito a separação de fases, com os buracos confinados em uma bolha ferromagnética circundada por uma região sem buracos com ordem antiferromagnética. Por outro lado, ainda para a rede quadrada, Kusakabe e Aoki sugerem [78] que a transição conduz a um estado antiferromagnético e que $J_T \sim \delta^{1.7}$.

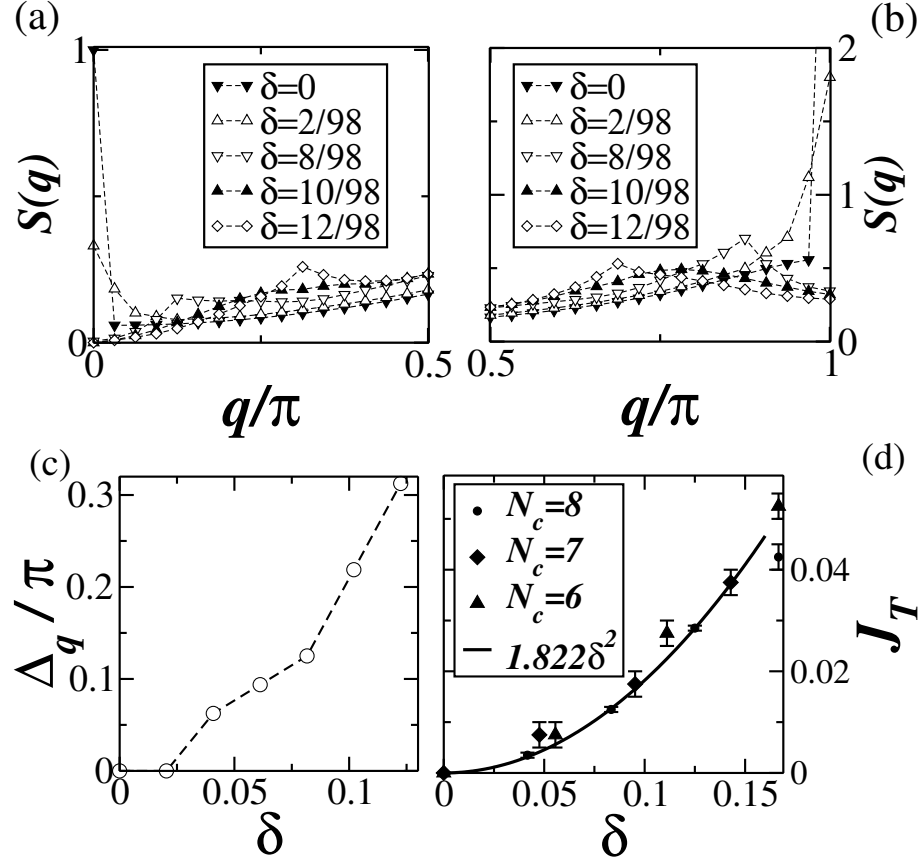


Figura 5.5: (a) e (b): Cálculo de DMRG para o fator de estrutura magnético para uma cadeia com $N = 98$ e $J = 0.3$ para as dopagens indicadas. (c) Pico do fator de estrutura magnético para uma cadeia com $N = 98$ e $J = 0.3$ em função da dopagem. (d) Resultados de diagonalização exata para a linha de transição $J_c(\delta)$. Cálculos realizados no modelo $t - J$.

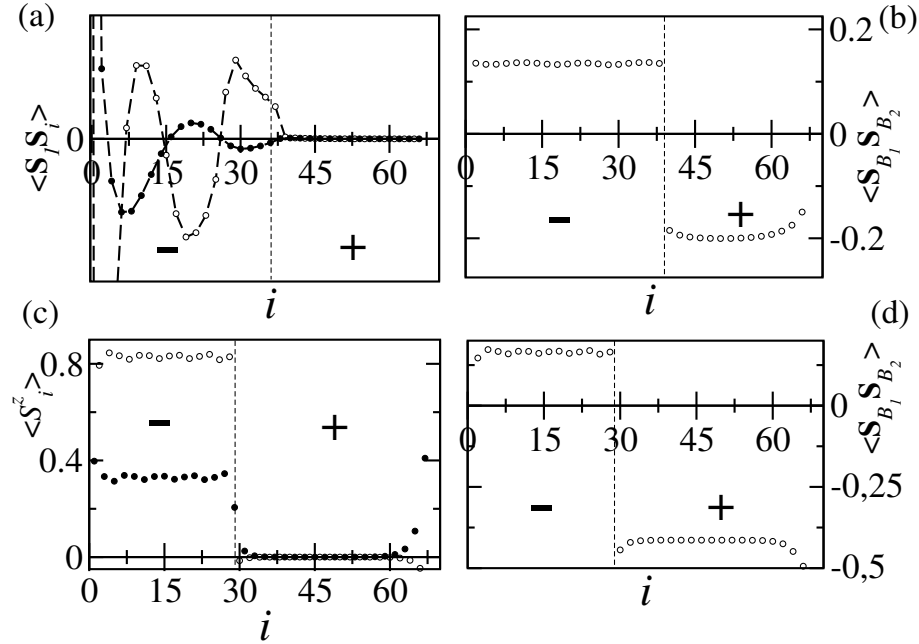


Figura 5.6: Cálculo de DMRG para algumas propriedades do estado fundamental para $\delta = 0.18$ ($U = 2$) e $\delta = 0.28$ ($U = \infty$) em uma cadeia com $N = 100$. (a) Função de correlação $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_i \rangle$ para $U = 2$. (b) Valor esperado de S_i^z para $U = \infty$ no setor $S^z = S_g$. Função de correlação de spin $\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle_i$ para (c) $U = 2$ e (d) $U = \infty$. Notação da cadeia efetiva linear (Fig. 4.3): ($\bullet$) identifica sítios A enquanto ($\circ$) identifica $B_1 + B_2$ da mesma célula. $-$ ($+$) indica paridades locais ímpares (pares). Linhas tracejadas são guias para o olho.

Ainda não somos capazes de definir exatamente o(s) estado(s) que se estabelece(m) imediatamente após a transição no caso da cadeia AB_2 , de forma que não podemos afirmar qual dos quadros [77, 78] melhor se ajusta à cadeia AB_2 .

5.3 Separação de Fases e Estados RVB

No regime de separação de fases a compressibilidade diverge devido à dependência linear da energia com a dopagem. Nas Figs. 5.6 e 5.7, apresentamos cálculos de DMRG de algumas propriedades do estado fundamental da cadeia AB_2 para duas dopagens onde se verifica separação de fases: $\delta = 0.18$ ($U = 2$) e $\delta = 0.28$ ($U = \infty$), exibidas segundo a notação da CLE. Inicialmente, notamos que todas essas propriedades expõem uma clara modulação na mesma sub-rede na fase metálica (células de paridade ímpar) devido à itinerância eletrônica. Em particular, esta modulação é mais forte para $U = 2$ na fase espiral, onde é evidenciada pela função de correlação $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_i \rangle$ mostrada na Fig. 5.6(a), e também é detectada na fase ferromagnética metálica ($U = \infty$), sendo manifestada pela magnetização por sítio $\langle S_i^z \rangle$ mostrada na Fig. 5.6(c). Por outro lado, na fase isolante ¹(paridade par), um comportamento uniforme é observado, exceto por efeitos de interface e de superfície. Essas fases não-magnéticas são caracterizadas por correlações do tipo singlete entre spins nos sítios B_1 e B_2 de uma mesma célula, isto é, $\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle \approx -0.20$ (≈ -0.41) para $U = 2$ ($= \infty$), como mostrado nas Figs. 5.6(b) e 5.6(d). Por outro lado, na fase metálica a correlação varia muito pouco com U e indica correlações tripleto robustas, isto é, $\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle \approx 0.13$ (≈ 0.16) para $U = 2$ ($= \infty$). Note que em fases onde não se verifica o *hopping* de buracos, mesmo quando restritos a uma mesma célula como na fase isolante, o valor de $\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle$ em um estado singlete (tripleto) é -0.75 (0.25). A densidade de buracos $\langle n_{h,i} \rangle$ é mostrada nas Figs. 5.7(a) e 5.7(b). Na fase metálica, com células de paridade ímpar, os buracos não ocupam orbitais anti-ligantes, estes sempre permanecem ocupados por um elétron, enquanto que na fase isolante, com células de paridade par, estes orbitais são acessíveis aos buracos

¹Estados RVB que serão estudados em seguida

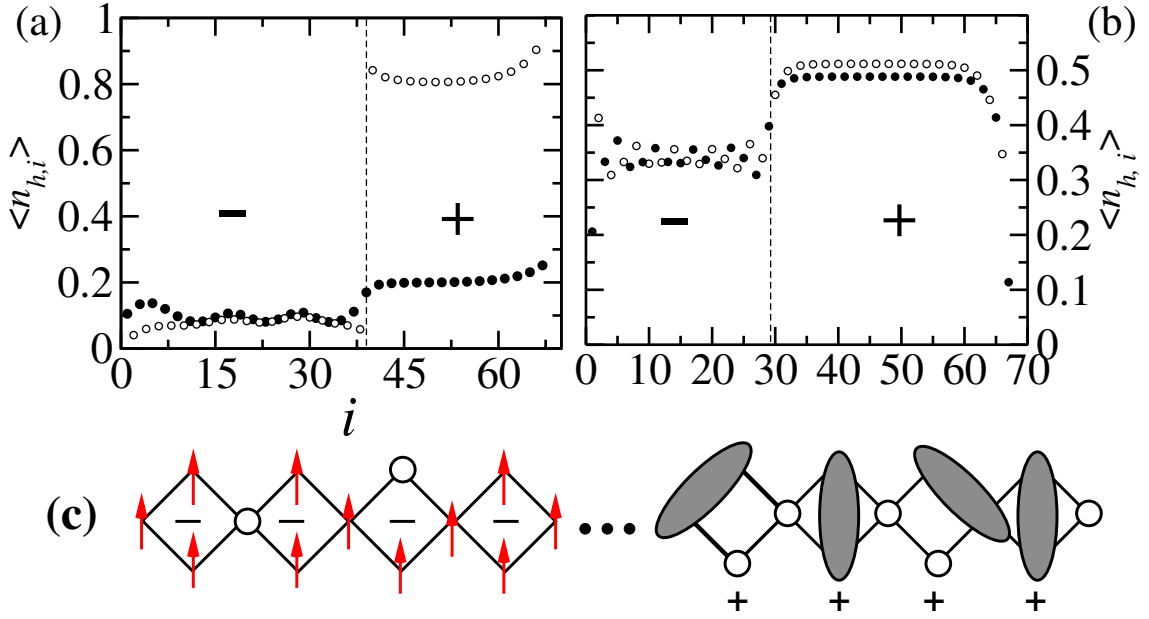


Figura 5.7: Cálculo de DMRG para algumas propriedades locais do estado fundamental para $\delta = 0.18$ ($U = 2$) e $\delta = 0.28$ ($U = \infty$) em uma cadeia com $N = 100$. Valor esperado da densidade de buracos $n_{h,i}$ para (a) $U = 2$ e (b) $U = \infty$. Notação da cadeia efetiva linear (Fig. 4.3): (•) identifica sítios A enquanto (◦) identifica $B_1 + B_2$ da mesma célula. (c) Ilustração do estado fundamental para $U = \infty$ no regime de separação de fases: ligações singleto são representados por elipses e buracos por círculos. $- (+)$ indica paridades locais ímpares (pares). Linhas tracejadas são guias para o olho.

². Desta maneira, no primeiro caso a densidade de buracos nos sítios A e $B_1 + B_2$ são muito similares. O mesmo pode ocorrer no segundo caso, se sítios duplamente ocupados forem excluídos ($U = \infty$). Para este acoplamento, ilustramos um estado de separação de fases na Fig. 5.7(c). Gostaríamos de ressaltar que no limite U -infinito o momento magnético não-saturado observado na Fig. 5.3 é consequência

²Verifique na Tabela 4.1 que todos os estados de paridade ímpar apresentam um único elétron no orbital antiligante, portanto para uma célula de paridade ímpar o orbital antiligante nunca fica vazio.

deste estado de fases separadas e, portanto, não indica uma transição de segunda ordem, como poderíamos supor apenas pela dependência de S_g com a dopagem. Devemos ressaltar que, para este mesmo limite de acoplamento, ferromagnetismo não-saturado foi observado em sistemas tipo escada [79] e na rede quadrada [80] como uma fase intermediária entre a ferromagnética saturada e a paramagnética em função da dopagem. Todavia, as características destas fases não foram explicitadas em detalhe.

Com respeito ao modelo $t - J$, observamos na Fig. 5.8 que o fator de estrutura magnético $S(q)$ para $J = 0.3$ e $\delta = 76/98$ (uma dopagem na região de separação de fases) apresenta ordem magnética incomensurável, relacionada à região de paridades ímpares. Entretanto, a função de correlação $\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle_i$ exibe um comportamento similar ao caso $U = \infty$. Para a rede quadrada, a região de parâmetros do modelo $t - J$ em que se verifica separação de fases é uma questão bastante controversial, principalmente para $J \lesssim 0.5$ e pequenas dopagens [81, 82]; com previsões de separação de fases [77, 81, 82] e formação de *stripes* [83]. Por outro lado, a região de separação de fases para cadeias lineares [84] e escadas [85, 86] é mais bem definida.

Para a dopagem $\delta = 1/3$, isto é, um buraco por sítio A para condições de contorno abertas usando DMRG [19], o estado fundamental apresenta paridades positivas em todo o sistema e é completamente dominado pela fase isolante de Mott (paridades pares) ilustrada na Fig. 5.7(c) para $U = \infty$. Nesta dopagem, o *gap* de carga,

$$\Delta_c = \mu_+ - \mu_-, \quad (5.12)$$

onde $\mu_+ = [E(N_e + \Delta N_e) - E(N_e)]/\Delta N_e$, $\Delta N_e > 0$ ($\Delta N_e/N \rightarrow 0$), e $\mu_- = E(N_e) - E(N_e - 1)$, deve ser calculado com cuidado. Inicialmente, note que a adição de elétrons ao estado com dopagem $\delta = 1/3$ coloca o sistema em uma região de dopagens

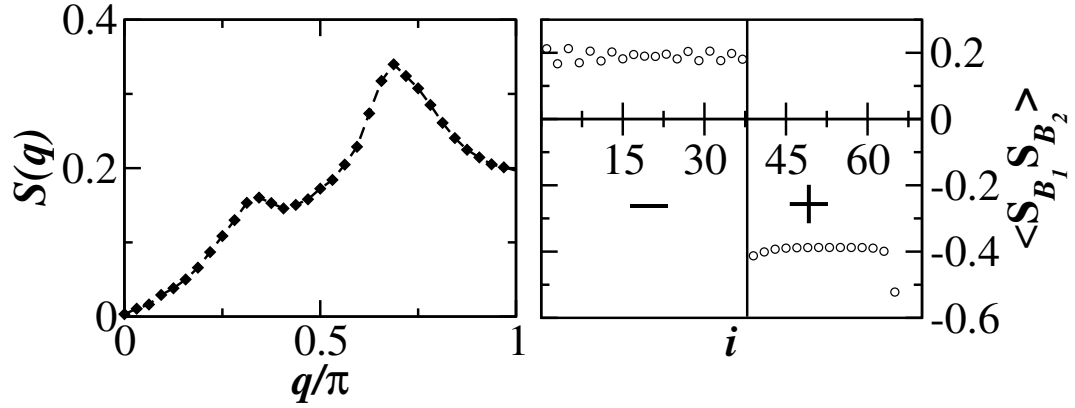


Figura 5.8: Cálculos de DMRG para o modelo $t - J$ com $J = 0.3$ e $\delta = 76/98$ em uma cadeia com $N = 98$. (a) Fator de estrutura magnético $S(q)$ e (b) Função de correlação de spin $\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle_i$. $- (+)$ indica paridades locais ímpares (pares). A linha tracejada serve de guia para o olho.

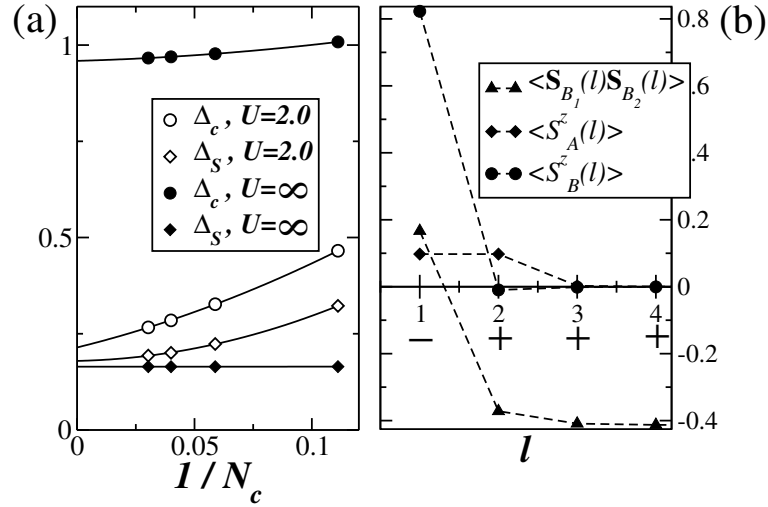


Figura 5.9: Resultados de DMRG para (a) a dependência com o tamanho da cadeia do gap de carga (Δ_c) e do gap de spin (Δ_S) em função de $1/N_c$ para $\delta = 1/3$; linhas sólidas são ajustes polinomiais. Resultados de diagonalização exata para (b) o valor esperado de $S_A^z(l)$, $S_B^z(l)$ e da função de correlação $\langle \mathbf{S}_{B_1}(l) \cdot \mathbf{S}_{B_2}(l) \rangle$ no setor de spin $S^z = 1$ em função do rótulo l da célula. Os sinais $\pm$ abaixo do eixo horizontal em (b) indicam a paridade da célula.

em que a separação de fases é observada e que, portanto, exibe uma reta horizontal no gráfico do potencial químico μ contra a densidade. Pela comparação dos resultados de DMRG e diagonalização exata para $U = \infty$, limite para o qual Δ_c apresenta uma pequena dependência com o tamanho [Fig. 5.9(a)], nós concluímos que os efeitos de superfície, presentes para condições de contorno abertas, são minimizados se tomarmos $\Delta N_e = 2$ e introduzirmos as células com paridade ímpar no centro da cadeia. Através deste procedimento, estimamos [Fig. 5.9(a)] $\Delta_c \approx 0.21$ (≈ 0.96) para $U = 2$ ($= \infty$). Notamos ainda a ausência deste problema no cálculo de μ_- (introdução de buracos), que é justificada pela homogeneidade das paridades do estado excitado. O *gap* de spin,

$$\Delta_S = E(S = 1) - E(S = 0), \quad (5.13)$$

extrapolado — com excitação caracterizada pela inversão da paridade de uma célula do centro da cadeia — também é mostrado na Fig. 5.9(a) para $U = 2$ ($\Delta_S \approx 0.18$) e $U = \infty$ ($\Delta_S \approx 0.16$), e o seu valor exibe uma fraca dependência com o tamanho do sistema para o limite U -infinito. Esta excitação é massiva e o mágnon está localizado na célula de simetria ímpar, predominantemente nos seus sítios B, como mostrado na Fig. 5.9(b).

Nas Figs. 5.10(a) 5.10(b) apresentamos o *gap* de spin extrapolado segundo a Eq. 4.17 em função de U , para o modelo de Hubbard com $0 \leq U \leq 5.0$, e de J , para o modelo $t - J$ com $0 \leq J \leq 0.5$, respectivamente, para $\delta = 1/3$. O estado excitado apresenta as mesmas propriedades de simetria dos casos $U = 2$ e $U = \infty$. Em particular, reproduzimos o valor do *gap*, $\Delta_S \approx 0.27$, encontrado por Sierra *et al.* [19] para o modelo $t - J$ com $J = 0.35$. Note que este *gap* é nulo para $U = 0$, o que está de acordo com a estrutura das bandas eletrônicas do limite *tight-*

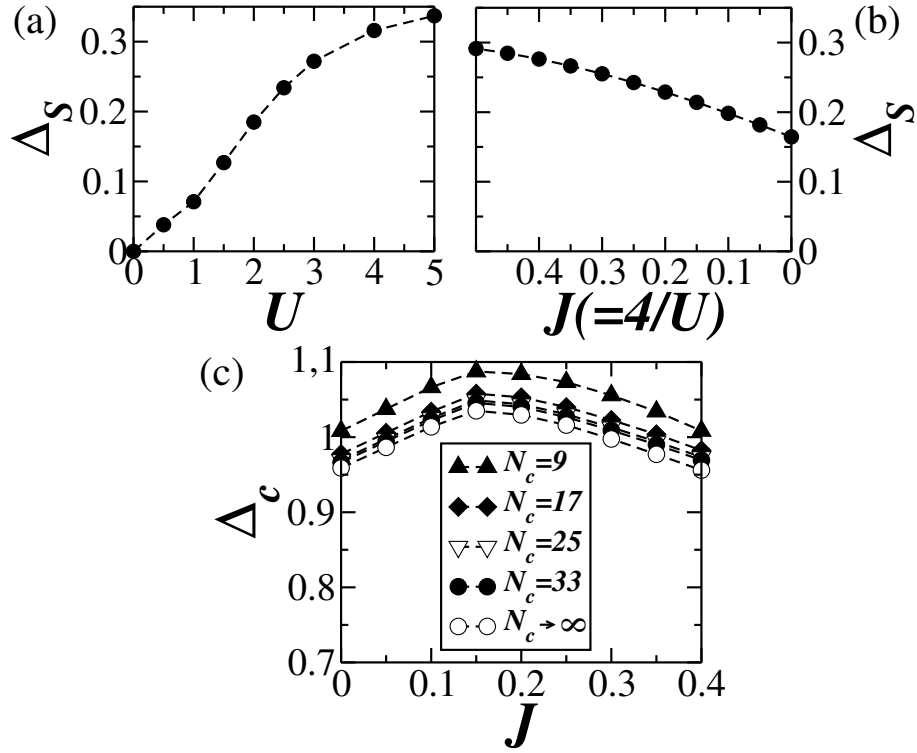


Figura 5.10: Extrapolações para o limite termodinâmico ($N_c \rightarrow \infty$) do *gap* de spin Δ_S utilizando-se seus valores calculados através de DMRG para sistemas com $N_c = 9, 17, 25, 33$ para o modelo de Hubbard (a) e $t - J$ (b) em $\delta = 1/3$. (c) Cálculo de DMRG para o *gap* de carga do modelo $t - J$.

binding apresentada na Fig. 4.2(a). Por outro lado, o *gap* de carga em função do acoplamento magnético J para o modelo $t - J$ e $0 \leq J \leq 0.4$, Fig. 5.10, exibe uma clara mudança no comportamento de acoplamento forte, $J \lesssim 0.15$, para acoplamento intermediário, $J \gtrsim 0.30$, em torno de $J \approx 0.15$.

Como consequência do *gap* de spin finito, as funções de correlação de spin para $U = 2$ e $U = \infty$, calculadas por DMRG e exibidas na Fig. 5.11, apresentam uma rápida queda com a distância entre spins para $\delta = 1/3$. Este comportamento pode

ser ajustado à forma exponencial

$$A \exp(-j/\xi), \quad (5.14)$$

onde ξ é o comprimento de correlação e j é a distância entre spins, usando a notação da CLE. Os valores de ξ para as correlações $\langle \mathbf{S}_A(l_c) \cdot \mathbf{S}_A(l) \rangle$, $\langle \mathbf{S}_A(l_c) \cdot \mathbf{S}_B(l) \rangle$ e $\langle \mathbf{S}_B(l_c) \cdot \mathbf{S}_B(l) \rangle$ são ≈ 0.4 (2.2), 0.25 (0.45) e 0.39 (0.75), respectivamente, para $U = \infty$ ($U = 2$), com l_c denotando a célula central. Desta maneira, exceto pela correlação $\langle \mathbf{S}_A(l_c) \cdot \mathbf{S}_A(l) \rangle$ para $U = 2$, os valores de ξ são extremamente pequenos, com os spins correlacionados apenas dentro da célula. Além disso, os valores calculados de $\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle$ no interior do sistema para $\delta = 1/3$ estão em excelente concordância com as mesmas quantidades da fase de paridades pares da região de separação de fases mostrada nas Figs. 5.6(b) and 5.6(d). Esses resultados convergem para afirmarmos que em $\delta = 1/3$ o estado fundamental é do tipo RVB de curto alcance [87], como ilustrado na Fig. 5.11(d). Para $J = 0.35t$, Sierra *et al.* [19] chegaram a conclusões similares para o modelo $t - J$ nesta cadeia, enquanto que Giesekeus [88] provou que um estado RVB de curto alcance é o estado fundamental de uma rede não-bipartida com a mesma simetria local da cadeia AB_2 mas com um padrão de *hopping* distinto.

5.4 Comportamento do tipo Líquido de Luttinger

Nesta seção nosso foco será o estudo do comportamento do sistema para as dopagens $1/3 < \delta < 1$ considerando, inicialmente, uma cadeia de 8 células sob condições de contorno fechadas através de diagonalização exata. O primeiro fato notável é o comportamento das funções de correlação de spin após doparmos o estado isolante

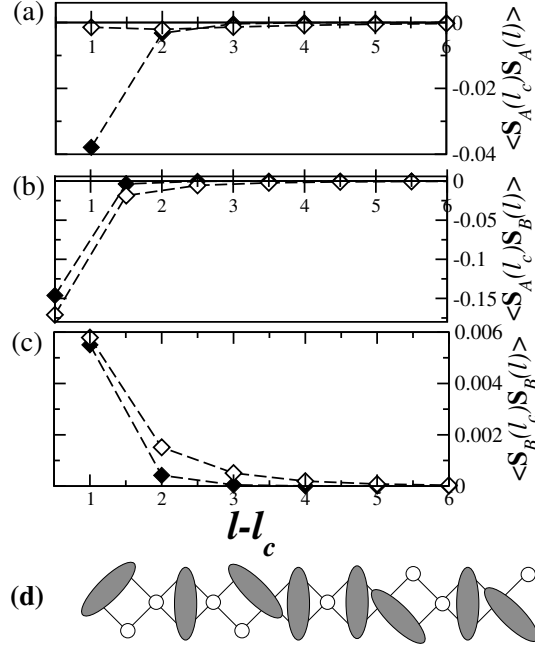


Figura 5.11: Funções de correlação de spin (a) $\langle \mathbf{S}_A(l_c) \cdot \mathbf{S}_A(l) \rangle$, (b) $\langle \mathbf{S}_A(l_c) \cdot \mathbf{S}_B(l) \rangle$ e (c) $\langle \mathbf{S}_B(l_c) \cdot \mathbf{S}_B(l) \rangle$ como função de $l - l_c$ na CLE (Fig. 4.3) com $\delta = 1/3$ e $N_c = 33$ usando DMRG; nestas expressões, l_c denota a célula central; ($\diamond$) se refere ao acoplamento $U = 2$ e ($\blacklozenge$) a $U = \infty$. Linhas tracejadas são guias para o olho. (d) Ilustração do estado fundamental para $\delta = 1/3$, ligações do tipo singleto são representadas por elipses e buracos por círculos.

encontrado em $\delta = 1/3$ com dois buracos. O valor de $\langle \mathbf{S}_{B_1}(l_0) \cdot \mathbf{S}_{B_2}(l_0) \rangle$ (onde l_0 denota uma célula arbitrária) muda de -0.41 para -0.28. Esta variação pode ser entendida se considerarmos que os dois buracos extras quebram dois pares singlete do estado RVB e permanecem predominantemente em sítios B . De acordo com este mecanismo, a função de correlação deveria apresentar o valor $\frac{N_e-2}{N_c}(-0.41) \approx -0.31$, um número bastante próximo do calculado: -0.28. Além disso, as funções de correlação de spin mostradas na Fig. 5.12(a) evidenciam a formação de correlações entre spins dos sítios B com um alcance maior que aquele observado para $\delta = 1/3$, enquanto que as outras correlações permanecem de curto alcance. Estes resultados indicam que os elétrons liberados do estado RVB de curto alcance devido à inclusão de buracos, estão antiferromagneticamente acoplados e estendidos ao longo da cadeia, como ilustrado na Fig. 5.12(b).

Com o objetivo de revelar a estrutura do estado fundamental para dopagens termodinamicamente finitas, calculamos a função de correlação $\langle \mathbf{S}_{B_1}(l_0) \cdot \mathbf{S}_{B_2}(l_0) \rangle$ e as densidades eletrônicas como função de δ , exibidas na Fig. 5.12(c). A observação mais saliente é que a densidade de elétrons nos sítios A é aproximadamente constante na região $1/3 < \delta < 2/3$, enquanto que os sítios B são monotonicamente depopulados. Como consequência deste comportamento: $\langle \mathbf{S}_{B_1}(l_0) \cdot \mathbf{S}_{B_2}(l_0) \rangle$ diminui continuamente com o aumento da dopagem. Além disso, na Fig. 5.12(d) são mostradas as funções de correlação de spin entre vizinhos mais próximos. Essas quantidades expõem valores muito diversos para $\delta = 1/3$, que, todavia, se aproximam uns dos outros para $\delta > 2/3$. Por essas razões, consideramos o intervalo de dopagens $1/3 < \delta < 2/3$ como uma região de “cruzamento” (*crossover*), onde por efeito de dopagem do isolante de Mott encontrado em $\delta = 1/3$, a fase líquido de Luttinger [89] começa a emergir e se estabelece totalmente para $\delta > 2/3$, como veremos adiante.

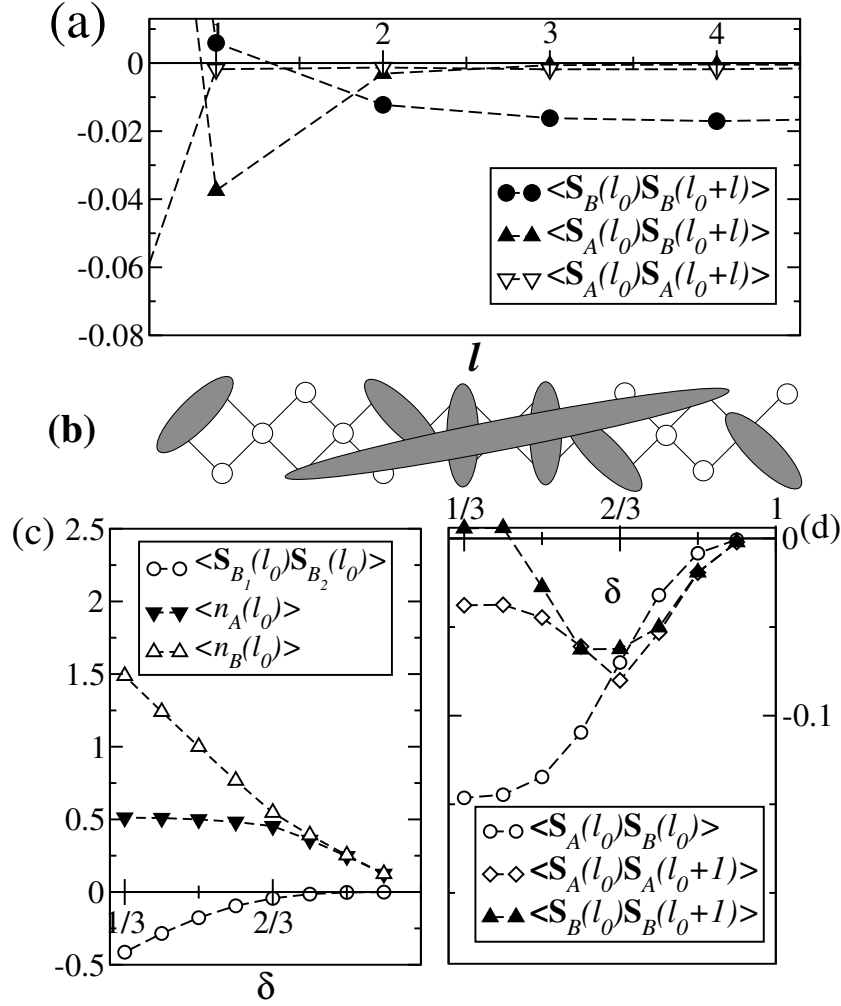


Figura 5.12: (a) Resultados de diagonalização exata para as funções de correlação entre spins mais próximos em função do rótulo l das células, com $\mathbf{S}_B \equiv \mathbf{S}_{B_1} + \mathbf{S}_{B_2}$. (b) Ilustração do estado fundamental para o isolante em $\delta = 1/3$ dopado com dois buracos: ligações do tipo singlete são representadas por elipses e buracos por círculos. (c) Resultados de diagonalização exata para as funções de correlação de spin entre os sítios B de uma mesma célula, $\langle \mathbf{S}_{B_1}(l_0) \cdot \mathbf{S}_{B_2}(l_0) \rangle$, densidades de elétrons nos sítios A, $\langle n_A(l_0) \rangle$, e nos sítios B $\equiv B_1 + B_2$, $\langle n_B(l_0) \rangle \equiv \langle n_{B_1}(l_0) + n_{B_2}(l_0) \rangle$. (d) Resultados de diagonalização exata para as funções de correlação de spin entre vizinhos mais próximos como função de δ , com $\mathbf{S}_B \equiv \mathbf{S}_{B_1} + \mathbf{S}_{B_2}$. Em (a), (c) e (d) l_0 denota uma célula arbitrária.

Também consideramos algumas funções-resposta na região de $\delta > 1/3$: a compressibilidade κ , definida através da relação:

$$\chi = \frac{1}{n_0^2 \kappa} = \frac{V}{4} [E(N_e + 2) + E(N_e - 2) - 2E(N_e)], \quad (5.15)$$

onde V é o volume e $n_0 = \frac{N_e}{V}$ é a densidade de elétrons; a velocidade das excitações de carga

$$u_\rho = \frac{E(\Delta k, S=0) - E_{GS}}{\Delta k}, \quad (5.16)$$

com $\Delta k = 2\pi/L$ e L sendo o comprimento da cadeia; bem como o peso de Drude

$$D = \frac{L}{4\pi} \left[\frac{\partial^2 E(\Phi)}{\partial \Phi^2} \right]_{\Phi_{min}}, \quad (5.17)$$

onde Φ_{min} é o valor de fluxo para o qual a energia é mínima [90, 91]. Em uma fase isolante essas quantidades satisfazem os seguintes limites:

$$\lim_{N_e \rightarrow \infty} \begin{cases} \chi &= \infty; \\ u_\rho &= \infty; \\ D &= 0, \end{cases} \quad (5.18)$$

enquanto que para um metal, χ , u_ρ e D são finitos. Como mostrado na Fig. 5.13, em $\delta = 1/3$, χ e u_ρ aumentam, enquanto D diminui com o aumento do tamanho do sistema para ambos os acoplamentos $U = 2$ e $U = \infty$, embora a característica isolante seja melhor evidenciada para $U = \infty$ devido ao maior valor de *gap* de carga, como exposto na Fig. 5.9(a). Para a outra densidade comensurável, $\delta = 2/3$, podemos notar os sinais de uma fase isolante para $U = \infty$, enquanto que para $U = 2$ não observamos qualquer comportamento especial. Objetivando esclarecer

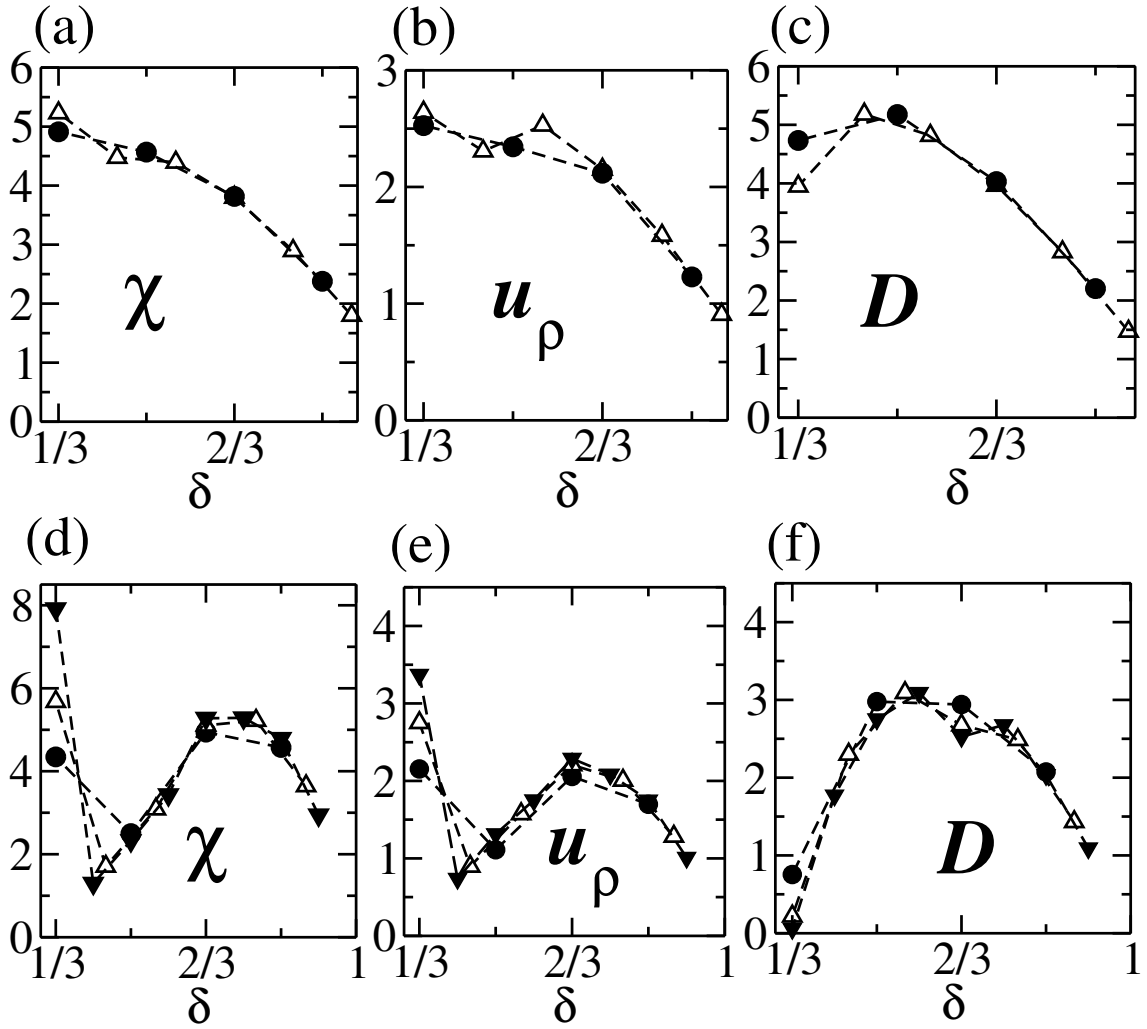


Figura 5.13: Resultados de diagonalização exata para a susceptibilidade de carga χ , a velocidade das excitações de carga u_ρ e o peso de Drude D , para $U = 2$ [(a),(b) e (c)] e $U = \infty$ [(d), (e) e (f)], com $N_c = 4$ ($\bullet$), 6 ($\triangle$) e 8 ($\blacktriangledown$).

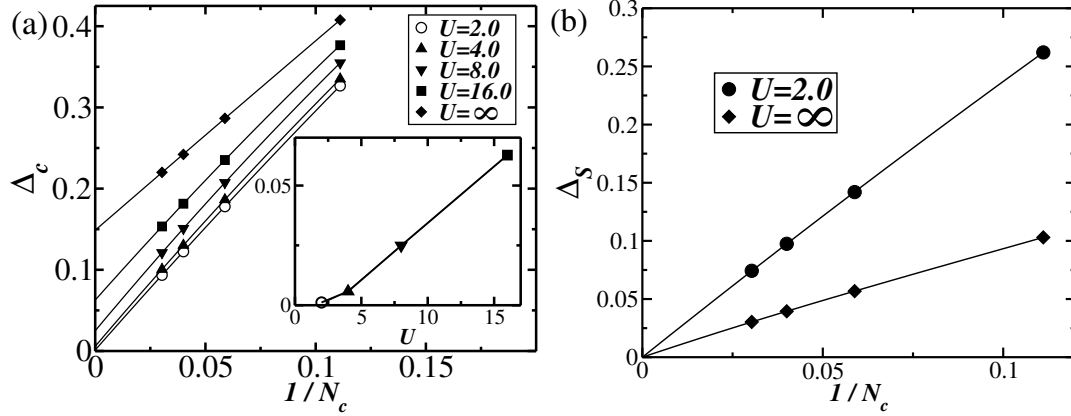


Figura 5.14: Resultados de DMRG para o (a) *gap* de carga Δ_c como função de $1/N_c$ para $\delta = 2/3$ usando DMRG; o destaque apresenta os valores extrapolados para o limite termodinâmico do *gap* de carga como função de U . Cálculos de DMRG para o (b) *gap* de spin Δ_s como função de $1/N_c$ para $U = 2$ (●) e $U = \infty$ (◆). Linhas sólidas são ajustes polinomiais, exceto para o destaque de (a), onde foi usada uma forma com singularidade essencial para $U \rightarrow 0$ explicada no texto.

este ponto, estudamos a dependência com N_c do *gap* de carga para sistemas maiores através de DMRG. Em uma cadeia finita com condições de contorno abertas e dois sítios A nos extremos— a configuração que estamos considerando— a densidade $2/3$ não está disponível em sistemas finitos; entretanto a ocupação de dois buracos por célula tende a esta dopagem no limite termodinâmico. Na Fig. 5.14(a), podemos identificar claramente que para $U = \infty$ o sistema é isolante de Mott para esta dopagem, com $\Delta_c \approx 0.15$; entretanto, o valor de Δ_c é extremamente pequeno para $U = 2$. Para compreender melhor a dependência deste *gap* com U , calculamos Δ_c para valores intermediários de U , como mostrado na Fig. 5.14(a). No destaque desta figura, expomos o ajuste de $\Delta_c(U)$ a uma expressão similar ao comportamento limite do *gap* de carga para $U \rightarrow 0$ da solução de Lieb-Wu para a cadeia linear em semi-preenchimento da banda [92]: $U^a \exp(-b/x)$, onde $a(\approx 0.61)$ e $b(\approx 7.95)$ são

parâmetros de ajuste. Devemos ressaltar que, Δ_c satura em um valor ≈ 0.15 para $U = \infty$, destoando da solução de Lieb-Wu [92]. Por outro lado, de forma similar à cadeia linear com semi-preenchimento da banda [92], os dados mostrados na Fig. 5.14(b) indicam a ausência de *gap* de spin para $\delta = 2/3$ no limite termodinâmico em ambos os casos: $U = 2$ e $U = \infty$.

No modelo de Luttinger, é fato bem conhecido [89] que χ , u_ρ e D estão relacionados segundo

$$D = 2u_\rho K_\rho, \quad (5.19)$$

com

$$K_\rho = \frac{\pi u_\rho}{2\chi}, \quad (5.20)$$

onde K_ρ é o parâmetro que governa o decaimento das funções de correlação. A fim de descobrir em que parte da região dopada o espectro de baixas energias da cadeia AB_2 pode ser mapeado no espectro do modelo de Luttinger, nós consideramos a razão

$$R = \frac{u_\rho}{\sqrt{D\chi/\pi}}, \quad (5.21)$$

que deve ser igual a 1 para fases que recaem na classe de universalidade do líquido de Luttinger [85].

Visto que a cadeia AB_2 não é estritamente unidimensional, precisamos ser cuidadosos com a escolha das escalas de tamanho (V e L) encontradas Eqs. (5.15), (5.16) e (5.17). Para $U = 0$, os orbitais dos sítios A e os estados ligantes nos sítios B são translacionalmente equivalentes e ambos constituem os ramos dispersivos mostrados na Fig. 4.2(a). Neste caso, o espectro do sistema pode ser mapeado no de uma cadeia linear com $2N_c$ sítios e um parâmetro de *hopping* reescalado, $t \rightarrow t\sqrt{2}$, para a qual sabemos que $K_\rho = 1$. Se desejamos que a Eq. (5.20) apresente este resul-

tado para $\epsilon_F < 0$, onde ϵ_F é a energia de Fermi, devemos escolher $V \equiv L = 2N_c$ e $\epsilon(k) = -2\sqrt{2}\cos(k)$; ou, em outra possibilidade, devemos tomar $V \equiv L = N_c$ e as dispersões da Eq. (4.8). Em ambos os casos $k_F = \frac{\pi}{2}n_0$, com $n_0 = \frac{N_e}{L}$. Considere, por exemplo, a primeira opção. Para $U = 0$, a velocidade das excitações de carga é igual a velocidade de Fermi u_F , que pode ser facilmente calculada:

$$u_F = \left. \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial k} \right|_{k=k_F} = 2\sqrt{2}\sin(k_F). \quad (5.22)$$

Por outro lado, substituindo a energia do estado fundamental,

$$E_{GS}(n_0) = \frac{-8\sqrt{2}}{\pi}N_c \sin\left(\frac{\pi}{2}n_0\right), \quad (5.23)$$

na versão contínua da Eq. (5.15), nós obtemos

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E_{GS}}{\partial n_0^2}, \quad (5.24)$$

$$= \pi\sqrt{2}\sin\left(\frac{\pi}{2}n_0\right). \quad (5.25)$$

Usando as Eqs. (5.22) e (5.25) na Eq. (5.20), encontramos, como esperado, $K_\rho = 1$.

Com o limite *tight-binding* corretamente estabelecido, voltamos nossa atenção para o caso com interação calculando a razão expressa na Eq. (5.21) através de diagonalização exata. Como exposto na Fig. 5.15(a) o caráter de líquido de Luttinger é patente para $\delta > 2/3$, enquanto que para $1/3 < \delta < 2/3$ nós identificamos a região de *crossover*. Os resultados da diagonalização para K_ρ , calculados através da Eq. (5.20), são apresentados na Fig. 5.15(b). Note que K_ρ é próximo de 1 — o valor encontrado para o caso de férmions não-interagentes — para $U = 2$; enquanto que

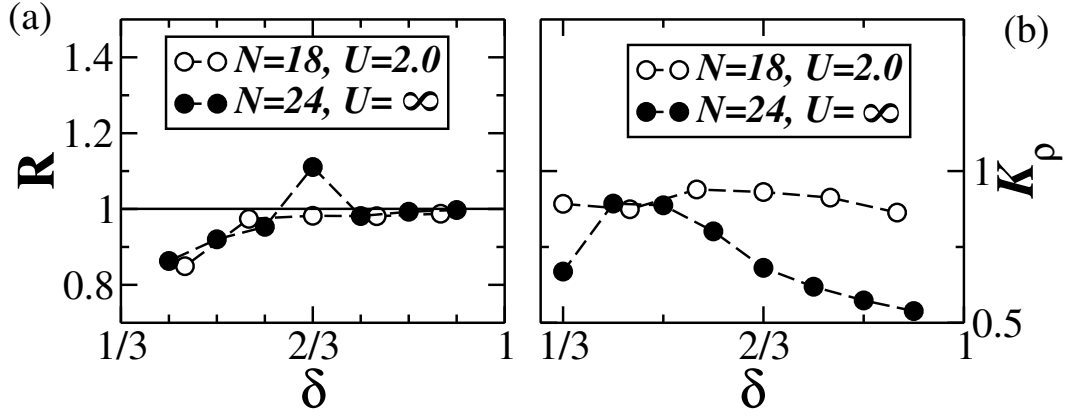


Figura 5.15: (a) Resultados de diagonalização exata para a razão $R=u_\rho/\sqrt{D\chi/\pi}$. (b) Resultados de diagonalização exata para K_ρ em função de δ .

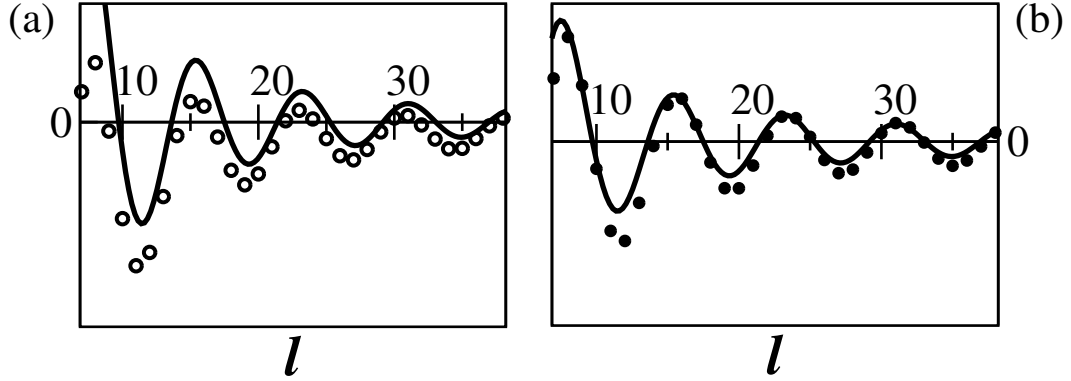


Figura 5.16: Funções de correlação de spin $C(l)$ para $U = 2$ (d) e $U = \infty$ (e) para $\delta = 88/106$ e $N = 106$ usando DMRG: linhas sólidas são ajustes à Eq. (5.27).

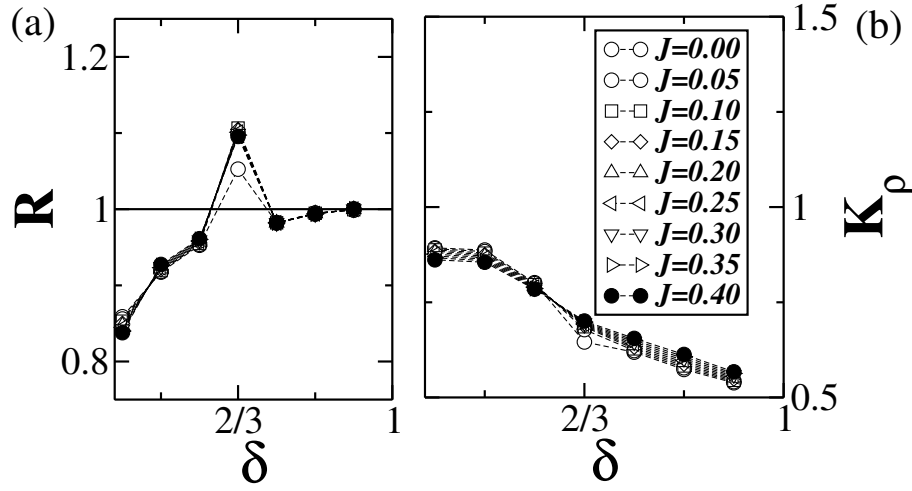


Figura 5.17: (a) Resultados de diagonalização exata para a razão $R = u_\rho / \sqrt{D\chi/\pi}$ em função de δ para vários valores de J [legenda em (b)] no modelo $t - J$. (b) Resultados de diagonalização exata para K_ρ em função de δ para o modelo $t - J$ com os valores de J indicados.

K_ρ é próximo de $1/2$ — valor encontrado para férmions sem-spin e não-interagentes — para $U = \infty$ [93].

A fim de reforçar esses resultados, nós calculamos a função de correlação de spin:

$$C(l) \equiv \frac{\sum_{i,j} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle \delta_{|i-j|,l}}{\sum_{i,j} \delta_{|i-j|,l}} \quad (5.26)$$

através de DMRG e definida sobre a CLE. Na Eq. (5.26), consideramos uma média sobre todos os pares de spins separados pela mesma distância l com o objetivo de reduzir efeitos de superfície. Para um líquido de Luttinger [93], o comportamento assintótico de $C(l)$ deve se ajustar à expressão:

$$C_{LL}(l) \sim \frac{\cos(2k_F l) [\ln(l)]^{1/2}}{l^{1+K_\rho}}. \quad (5.27)$$

Nas Figs. 5.16(a) e 5.16(b) nós apresentamos $C(l)$ calculada na dopagem $\delta = 88/106$ para $U = 2$ e $U = \infty$, respectivamente. Nas mesmas figuras também estão expostos os ajustes à $C_{LL}(l)$ com $k_F = \frac{\pi}{2}n_0$ e K_ρ obtido dos resultados mostrados na Fig. 5.15(b) após interpolação linear: $K_\rho = 0.89$ ($U = 2$) e $K_\rho = 0.57$ ($U = \infty$). Motivados por um compromisso entre valores altos de l e efeitos de superfície mínimos, um ajuste, muito bom para ambos os acoplamentos, é obtido considerando-se valores intermediários de l . Para o modelo $t - J$ com $0 \leq J \leq 0.4$, vemos na Fig. 5.17(a) que a fase líquido de Luttinger também é encontrada na região $\delta > 2/3$ e, além disso, notamos um ligeiro incremento de K_ρ com J nesta mesma região, Fig. 5.17(b), o que é consistente com o fato de que $K_\rho \rightarrow 1$ para $U \rightarrow 0$. Em vista de todos os resultados expostos nesta Seção, concluímos que o modelo de Luttinger descreve corretamente a física de baixas energias da cadeia AB_2 para $\delta > 2/3$.

5.5 Cálculo Variacional para $U = \infty$ e $\delta \leq 1/3$

Na região onde a fase ferromagnética metálica (paridades -1) é observada a energia como função da dopagem é idêntica a energia de férmions sem-spin não interagentes

$$E(k_{F-}) = -\frac{4\sqrt{2}}{\pi}L_- \sin(k_{F-}/2), \quad (5.28)$$

onde $k_{F-} = \pi\nu_{h-}$, $\nu_{h-} = N_{h-}/L_-$, com L_- sendo o comprimento do sistema e N_{h-} o número de buracos. Por outro lado, na fase não-magnética isolante (RVB de curto alcance com paridades pares) em $\delta = 1/3$ (1 buraco por célula)

$$N_{h+} = L_+, \quad (5.29)$$

e a energia por célula ϵ_+ depende muito pouco do tamanho linear do sistema e pode ser estimada tanto por diagonalização exata quanto por DMRG:

$$\epsilon_+ \approx -2.021. \quad (5.30)$$

A energia por célula de um estado de fases separadas em que se verifica a coexistência da fase não-magnética com um tamanho L_+ e da fase ferromagnética com um tamanho L_- será dada por

$$\epsilon = \epsilon_+ \frac{L_+}{N_c} - \frac{4\sqrt{2}}{\pi} \frac{L_-}{N_c} \sin\left(\frac{\pi}{2} \nu_{h-}\right). \quad (5.31)$$

É conveniente escrever ν_{h-} como

$$\nu_{h-} = \frac{N_h - (N_c - L_-)}{L_-} = \frac{3\delta - (1 - x)}{x}, \quad (5.32)$$

onde $N_h = N_{h+} + N_{h-}$, $N_c = L_+ + L_-$, $x = L_-/N_c$ e $N = 3N_c$. Usando a notação acima, podemos reescrever a Eq. (5.31) da seguinte forma:

$$\epsilon(x) = (1 - x)\epsilon_+ - \frac{4\sqrt{2}}{\pi} x \sin\left[\frac{\pi}{2} \left(\frac{3\delta - 1}{x} + 1\right)\right]. \quad (5.33)$$

Note que a função $\epsilon(x)$ exibe uma singularidade em $x = 0$ para qualquer valor finito de $\delta \neq 1/3$ (veja a Fig. 5.18). Entretanto, a região com valores fisicamente aceitáveis de x é definida como

$$0 \leq N_{h+} \leq N_h, \quad (5.34)$$

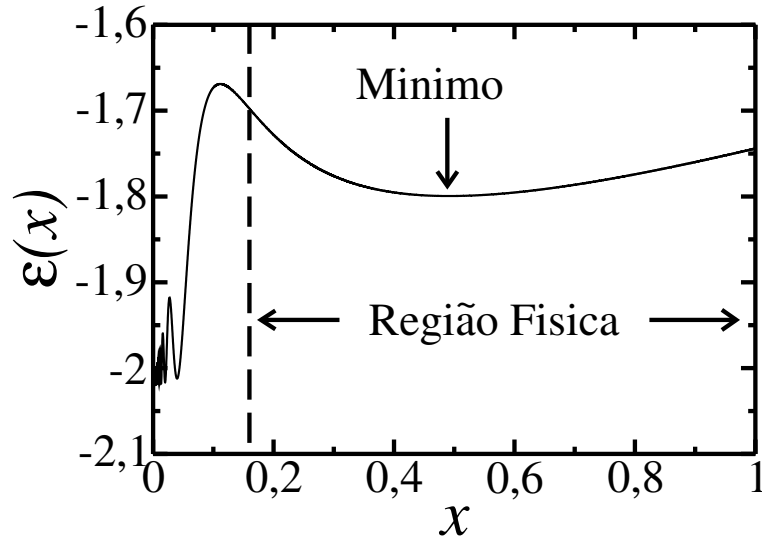


Figura 5.18: Energia por célula unitária, ϵ , em função da fração $x = L_-/N_c$ para $\delta = 0.28$. A região física também está identificada na figura.

isto é,

$$1 - 3\delta \leq x \leq 1. \quad (5.35)$$

Na Fig. 5.18, apresentamos $\epsilon(x)$ para $\delta = 0.28$. Nesta dopagem a região física é $0.16 \leq x \leq 1$, calculada através da Eq. (5.35), com o mínimo de $\epsilon(x)$ sendo encontrado em $x \approx 0.49$.

O valor de x que minimiza a energia para um δ fixo, $\bar{x} = \bar{x}(\delta)$, satisfaz a equação $\left[\frac{\partial \epsilon(x)}{\partial x} \right]_{\delta} = 0$, a qual resulta em

$$\frac{\pi \epsilon_+}{4\sqrt{2}} = \cos(y) + y \sin(y), \quad (5.36)$$

onde

$$y \equiv \frac{\pi}{2} \frac{3\delta - 1}{\bar{x}}. \quad (5.37)$$

As raízes da Eq. (5.36) são calculadas numericamente e conduzem a

$$\begin{cases} \bar{x} = 1, & \text{para } \delta \lesssim 0.225; \\ \bar{x} \approx 3.071 - 9.213\delta, & \text{para } 0.225 \lesssim \delta \leq \frac{1}{3}. \end{cases} \quad (5.38)$$

Desta maneira, concluímos que $\delta_{SF}(\infty) \approx 0.225$, o que está em excelente acordo com os cálculos de diagonalização exata e DMRG.

A magnetização é nula na fase de paridades pares e máxima na de paridades ímpares. Podemos, então, derivar a seguinte expressão para o spin total do estado fundamental por célula unitária:

$$\frac{S_g}{N_c} = \frac{1}{2N_c}(N_e - 2L_+) \quad (5.39)$$

$$= \frac{1}{2}[3(1 - \delta) - 2(1 - \bar{x})]. \quad (5.40)$$

A dependência da paridade média p com δ também pode ser facilmente obtida:

$$p = 1 - 2\bar{x}. \quad (5.41)$$

Finalmente, usando a função (5.38) para $\bar{x}$ nas Eqs. (5.40) e (5.41), calculamos p e S_g como função de δ e os expomos nas Figs. 5.1(d) e 5.3(c), respectivamente, verificando a excelente concordância desses resultados com aqueles obtidos através de diagonalização exata e DMRG.

5.6 Sumário e Conclusões

Em suma, os resultados numéricos deste capítulo evidenciam o rico diagrama de fases exibido pelo modelo de Hubbard na cadeia AB_2 dopada para acoplamento fraco e forte (modelo $t - J$), incluindo o limite U -infinito. Mostramos que nas dopagens comensuráveis $\delta = 1/3$ e $2/3$ o sistema se encontra em fases isolantes, embora para fraco acoplamento e $\delta = 2/3$ o *gap* de carga Δ_c seja muito pequeno, com indicações da presença de uma singularidade essencial no limite $U \rightarrow 0$. Para $U = 2$, no modelo de Hubbard, e $0.1 < J < 0.4$, no modelo $t - J$, com $\delta \lesssim 0.02$ o estado fundamental exibe uma ordem ferrimagnética que é remanescente do regime não-dopado, enquanto correlações magnéticas espirais são observadas para $\delta \gtrsim 0.02$. Para $U = \infty$ e $\delta = 0$ o spin total do estado fundamental é degenerado, enquanto que para $0 < \delta \lesssim 0.225$ a itinerância dos buracos (mecanismo de Nagaoka) estabelece um estado fundamental totalmente polarizado. Neste caso nós observamos a presença de um número extensivo de níveis de baixa energia com spin total indo do mínimo ao máximo valor possível com um espaçamento entre níveis diminuindo com o inverso do tamanho da cadeia. Além disso, identificamos que a linha de instabilidade $J_T(\delta)$ do estado de Nagaoka segue a forma δ^2 . Para dopagens maiores, a cadeia separa fases, apresentando a coexistência de fases metálicas e isolantes. A região isolante toma o sistema por completo na dopagem $\delta = 1/3$ e apresenta um *gap* finito para excitações magnéticas, sendo bem descrita por um estado do tipo RVB de curto alcance. Finalmente, uma região de *crossover* é detectada para $1/3 < \delta < 2/3$, enquanto que um comportamento de líquido de Luttinger foi explicitamente verificado para $\delta > 2/3$.

Capítulo 6

Cadeia AB_2 com Interações Competitivas

Neste capítulo consideraremos o modelo de Heisenberg na cadeia AB_2 com a interação J_2 exposta na Fig. 1.5 que se opõe ao estado ferrimagnético favorecido pela interação J_1 . Apresentaremos evidências de que o estado ferrimagnético é instável em relação a um estado de magnetização inferior ao valor de Lieb para $J_2 \gtrsim 0.34$, exibindo ordem não-colinear (*canted*) na sub-rede B e ordem ferromagnética na sub-rede A. Com o aumento da frustração, a magnetização tende a diminuir continuamente até $J_2 \sim 0.44$, valor a partir do qual o sistema escolhe uma ordem espiral nas duas sub-redes. A fase espiral cede lugar a um arranjo antiferromagnético interno às três sub-redes para $0.83 \lesssim J_2 < 1$.

6.1 Descrição do Modelo

O hamiltoniano do modelo de Heisenberg na cadeia da Fig. 1.5 pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{l=1}^{N_c} [\mathbf{S}_{Al} \cdot (\mathbf{S}_{B_1l} + \mathbf{S}_{B_2l}) + \mathbf{S}_{Al} \cdot (\mathbf{S}_{B_1,l-1} + \mathbf{S}_{B_2,l-1})] + \\
 & J \sum_{\alpha=A,B_1,B_2} \sum_{l=1}^{N_c} \mathbf{S}_{\alpha,l} \cdot \mathbf{S}_{\alpha,l+1} + \\
 & J \sum_{l=1}^{N_c} \mathbf{S}_{B_1,l} \cdot \mathbf{S}_{B_2,l},
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

com as seguintes redefinições: $J_1 \equiv 1$ e $J_2 \equiv J$. A partir do hamiltoniano, bem como da Fig. 1.5, é fácil observar que para $J \rightarrow \infty$ o sistema apresenta duas cadeias desacopladas: os sítios A definem uma cadeia linear, a qual não exibe *gap* de spin e apresenta funções de correlação com decaimento algébrico; e os sítios B formam um sistema escada, com *gap* de spin e correlações de curto alcance. Notamos ainda que, devido à frustração, o hamiltoniano (6.1) não exibe a simetria de troca local vista na Seção 4.2, que foi amplamente utilizada na análise e na computação dos dados expostos nos capítulos anteriores.

Utilizamos diagonalização exata para sistemas com condições de contorno periódicas e DMRG de tamanho finito em sistemas com condições de contorno abertas com dois sítios A em seus extremos. O número máximo de estados retidos por bloco no processo de renormalização foi de 243 a 364. O máximo peso descartado na última *sweep* foi tipicamente $\sim 10^{-7}$. O crescimento do sistema se dá pela inclusão de um sítio A e do supersítio $(B_1 + B_2)$, como no problema do capítulo anterior. Entretanto, diferentemente do que foi feito naquele capítulo, devido à ausência da

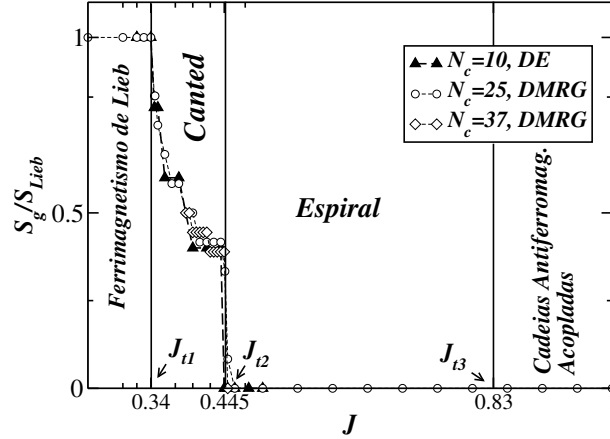


Figura 6.1: Spin total versus frustração J . Nesta figura estão indicados os pontos de transição $J_{t1} \approx 0.34$ e $J_{t2} \approx 0.44$. O rótulo DE indica que o cálculo foi realizado através de diagonalização exata

simetria local, não podemos decompor o espaço de Hilbert de $(B_1 + B_2)$, o que implica que *devemos* considerar o espaço de Hilbert completo de uma só vez.

6.2 Aspectos Gerais do Diagrama de Fases

Na Fig. 6.1 estão indicados o valor do spin total S_g , normalizado por $S_{Lieb} = |N_B - N_A|/2$, como função de J . Para a determinação de S_g através de DMRG, consideramos dois métodos: no primeiro, realizado em todos os pontos mostrados na Fig. 6.1, analisamos a forma da curva de energia em função de S^z ; no segundo, para alguns valores de J , calculamos diretamente o valor de $\langle S^2 \rangle = \sum_{i,j} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$. Podemos identificar através de S_g na Fig. 6.1 dois pontos de transição, os quais serão definidos como $J_{t1} \approx 0.34$ e $J_{t2} \approx 0.44$. Além desses pontos, a Fig. 6.1 também contém um terceiro ponto, $J_{t3} \approx 0.83$, que será caracterizado pelo comportamento do fator de estrutura magnético.

A variação da magnetização em torno de $J = J_{t1}$, indica que esta é uma transição contínua. Por outro lado, a transição em $J = J_{t2}$ apresenta evidências de ser uma transição de primeira ordem. Alguns fatos favorecem esta última afirmação: na diagonalização exata do sistema com 10 células não conseguimos encontrar o spin total com o valor $S_g = 1$, mesmo variando J_2 em torno da transição em passos de 0.001; no cálculo de DMRG para o sistema com 25 células encontramos que S_g varia de $S_g = 4$ em $J = 0.446$, para $S_g = 1$ em $J = 0.450$; finalmente, o cálculo de DMRG mostra que o valor de S_g de um sistema com 37 células muda de $S_g = 7$ em $J = 0.445$ para $S_g = 0$ em $J = 0.450$. Desta forma, acreditamos que no limite termodinâmico a magnetização deve sofrer uma diminuição abrupta de $\approx 0.40S_{Lieb}$ para zero em $J \approx J_{t2}$. Uma transição descontínua também foi observada na solução de campo médio com célula unitária estendida no modelo de rotores quânticos para a cadeia AB_2 frustrada [94]. Na Fig. 6.1 também estão indicadas as fases que são encontradas em função de J e que serão caracterizadas neste capítulo: Ferrimagnetismo de Lieb, para $0 < J < J_{t1}$; fase *canted*, para $J_{t1} < J < J_{t2}$; fase espiral para $J_{t2} < J < J_{t3}$; e fase antiferromagnética para $J_{t3} < J < 1$.

Diversas cadeias ferrimagnéticas frustradas foram estudadas nos últimos anos, sendo observada uma grande diversidade de fases em função dos termos competitivos considerados. Por exemplo, o modelo exposto na Fig. 1.6 (a) apresenta transições abruptas da região de parâmetros onde a fase ferrimagnética é encontrada para fases paramagnéticas [95, 96, 97]. Uma cadeia AB_2 frustrada com um padrão de acoplamentos ligeiramente diferente [98] do que estamos considerando — a cadeia não apresenta a interação de B_1 com B_2 em uma mesma célula — exibe uma transição descontínua do estado ferrimagnético de Lieb para um estado paramagnético sem *gap*. A cadeia spin- $\frac{1}{2}$ /spin-1 frustrada [99] também mostra uma transição de primeira

ordem da fase ferrimagnética para uma fase com correlações incomensuráveis. O mesmo ocorre em uma cadeia dente-de-serra frustrada [100] composta de spins $1/2$ e spins 1 . Por outro lado, foi observada [101] a presença de uma transição contínua da fase ferrimagnética para uma fase *canted* em um sistema de duas cadeias spin- $\frac{1}{2}$ /spin-1 acopladas.

6.3 Transição em $J = J_{t1}$: Ferrimagnetismo de Lieb para a Fase *Canted*

O ponto $J = J_{t1} \approx 0.34$ estabelece o limiar de estabilidade do estado ferrimagnético de Lieb. Com o objetivo de caracterizar a fase encontrada na região $J_{t1} < J < J_{t2}$, calculamos o fator de estrutura magnético na sub-rede A, F_A , e na sub-rede B_1 , F_{B_1} :

$$F_\alpha(q) = \frac{1}{N_c} \sum_{l=1} \langle \mathbf{S}_{\alpha,l} \cdot \mathbf{S}_{\alpha,l+1} \rangle e^{iql}, \quad (6.2)$$

com $\alpha = A, B_1$, os quais são exibidos nas Fig. 6.2(a) e 6.2(b). Notamos nesta figura que F_A expõe um único pico no vetor de onda $q = 0$ (relacionado à ordem ferromagnética) para todos os valores apresentados, o qual diminui em intensidade com o aumento de J , isto é, os sítios A não sofrem mudanças qualitativas de comportamento quando J é variado através de J_{t1} . Um comportamento consideravelmente diverso é apresentado pelos spins da sub-rede B, Fig. 6.2 (b). Neste caso, notamos que F_{B_1} desenvolve um pico em $q = \pi$ no ponto de transição. Desta forma, a sub-rede B apresenta um momento magnético resultante com correlações entre spins de período 2. A orientação relativa entre os spins das sub-redes B_1 e B_2 pode ser obtida através da função de correlação $C_{B_1 B_2} = (1/N_c) \sum_l \langle \mathbf{S}_{B_1 l} \cdot \mathbf{S}_{B_2 l} \rangle$ entre os spins B_1 e

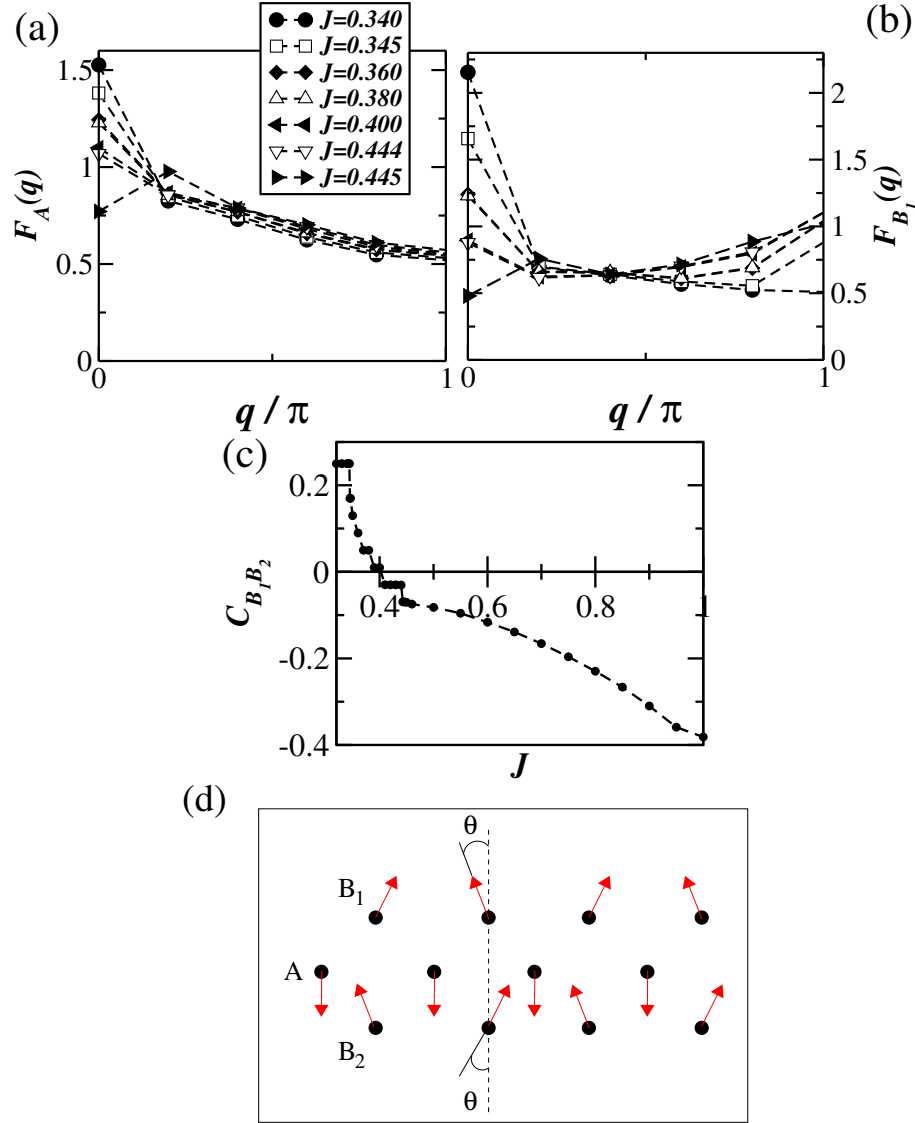


Figura 6.2: Fator de estrutura magnético nas sub-redes A (a) e B_1 (b) para diversos valores de J em um sistema com $N_c = 10$ calculados com diagonalização exata. A legenda de (b) é a mesma de (a). (c) Função de correlação $C_{B_1 B_2}$ calculada com DMRG para um sistema de 25 células. (d) Orientação dos spins na fase *canted*.

B_2 de uma mesma célula, a qual é exposta na Fig. 6.2(c). Lembramos ao leitor que na fase ferrimagnética de Lieb $C_{B_1 B_2} = 0.25$, ou seja, os spins das sub-redes B_1 e B_2 formam um estado tripleto *colinear*. A Fig. 6.2 demonstra que para $J > J_{t1}$ os spins B_1 e B_2 de uma mesma célula ficam inclinados um em relação ao outro, o que caracteriza uma fase *canted*. Pelo que foi exposto sobre o efeito da frustração nas sub-redes A, B_1 e B_2 , acreditamos que o melhor quadro clássico é o que está delineado na Fig. 6.2(d), onde θ define o arranjo *canted*. Na fase ferrimagnética de Lieb o estado fundamental é invariante por rotações em torno da direção do momento magnético resultante, enquanto que na fase *canted* também ocorre a perda deste eixo de simetria, com a transição entre as duas fases sendo de segunda ordem [102]. A fase *canted* exibe duas excitações (ferromagnética e antiferromagnética) sem *gap* em consequência das ordens ferromagnética e antiferromagnética na direção transversal à magnetização [102]. Devido ao desbalanceamento entre o número de spins das sub-redes A e B_1+B_2 , o momento magnético resultante é não-nulo, como mostra a Fig. 6.1, e a orientação relativa entre os spins resultantes das sub-redes A e B_1+B_2 é contrária, ou seja, a ordem ferrimagnética resiste à primeira transição, embora *não* seja a fase ferrimagnética de Lieb. A existência de ordem ferrimagnética nesta fase *canted* é demonstrada pelo cálculo do fator de estrutura magnético $S(q)$ [Eq. (5.6)], apresentado nas Figs. 6.3(a) e 6.3(b), bem como pela função de correlação $C(l)$ [Eq. (5.26)], exibida na Fig. 6.3(c). Os resultados desta figura mostram que o sistema preserva a ordem ferrimagnética após a transição e reforçam a visão clássica exposta na Fig. 6.2(d). De fato, o estado clássico exposto na Fig. 6.2(d) exibe um momento magnético resultante dos sítios B de uma mesma célula que é uniforme ao longo da cadeia e, a depender de θ , implica em um momento magnético finito por célula, dada a orientação do momento magnético do sítio A. Finalmente, notamos

que se considerarmos um espaço de configurações clássicas do tipo exposto na Fig. 6.2(d), tendo θ como o único grau de liberdade, a transição clássica ocorreria em $J = 1/3$, com $\cos(\theta) = 1/(3J)$ para $J \geq 1/3$, que é um valor muito próximo da nossa estimativa numérica quântica $J_{t1} \approx 0.34$. Entretanto, essa solução clássica desvia consideravelmente dos resultados numéricos após a transição, prevendo, em particular, que a magnetização se anularia apenas para $J = 2/3$, em total desacordo com o modelo quântico. Todavia, notamos nas Figs. 6.2(a) e 6.2(b) que a fase *canted* fica instável em relação a uma fase espiral para $J \approx 0.44$: o pico se desloca para um vetor de onda $q \neq 0$ ou π , indicando que um estudo clássico adequado não deve se restringir apenas ao espaço de configurações definido pelo parâmetro θ da Fig. 6.2(d). Em seguida tentaremos construir uma interpretação quântica para a transição em J_{t1} .

Vimos no Capítulo 4 que na ausência da interação frustrante os sítios B_1 e B_2 são encontrados exatamente em um estado tripleto para o qual $C_{B_1 B_2} = 0.25$ e que a cadeia exibe três excitações: o modo ferromagnético F1 sem *gap* (modo de Goldstone), o modo ferromagnético F2 com *gap* definido por Δ_{S-} e o modo antiferromagnético AF com *gap*. Recordamos também que, graças à simetria de troca local, o modo F1 consiste na formação de um estado singlete localizado em uma única célula, com $C_{B_1 B_2} = [-0.75 + 0.25(N_c - 1)]/N_c$. A inclusão de frustração no modelo implica na perda desta simetria local e na conseqüente possibilidade de flutuação no valor das correlações $\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle_l$ para todas as células da cadeia. Mostramos na Fig. 6.2(c) que, de fato, $C_{B_1 B_2}$ tem um valor muito próximo de 0.25 exatamente na transição. Observamos através das Figs. 6.2(a) e 6.2(b) que a fase *canted* preserva a periodicidade do estado fundamental da fase ferrimagnética de Lieb, o que nos leva a concluir que os spins B_1 e B_2 ainda estão fortemente

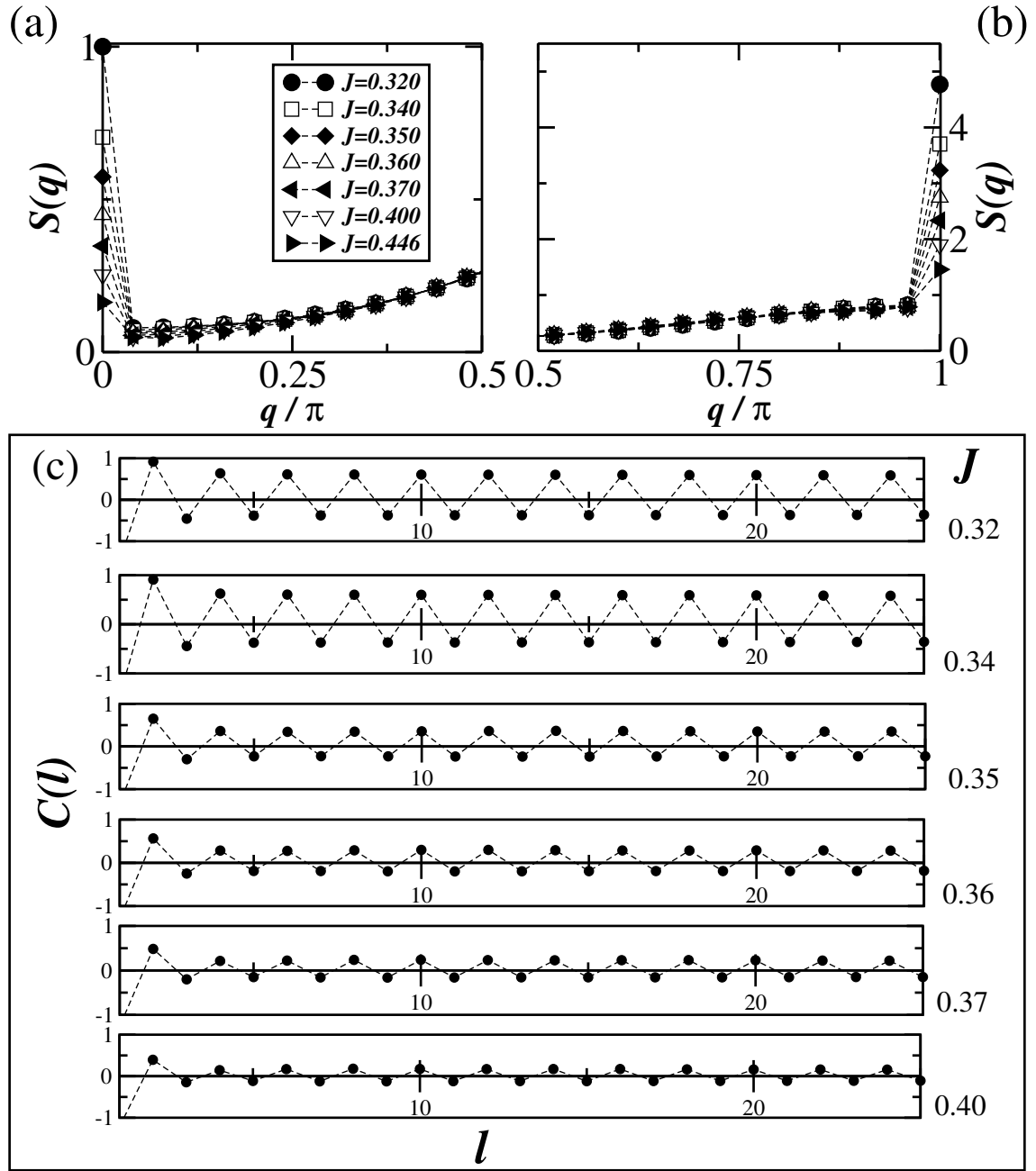


Figura 6.3: (a) e (b): Fator de estrutura magnético $S(q)$ [Eq. (5.6)] definido na CLE para os valores de J indicados. (c) Função de correlação $C(l)$ [Eq. (5.26)] definida na CLE com os valores de J indicados à direita de cada gráfico.

correlacionados e podemos tentar entender a fase *canted* de uma perspectiva quântica considerando os estados do supersítio $B_l \equiv B_{1l} + B_{2l}$: três estados tripleto de spin 1 ($\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle = 0.25$) e o estado singleto de spin nulo ($\langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle = -0.75$). Em particular, consideramos a quantidade

$$N_S = \sum_l \eta_l, \quad (6.3)$$

com η_l dado por

$$\eta_l = 0.25 - \langle \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} \rangle_l. \quad (6.4)$$

Se os sítios B_1 e B_2 estiverem em uma ligação do tipo tripleto $\eta_l = 0$; enquanto que para o caso singleto $\eta_l = 1$. Na Fig. 6.4(a) notamos que N_S sofre variações discretas na fase *canted*, acompanhando a evolução de S_g . Essas componentes singleto que surgem no sistema são as responsáveis pelo estabelecimento da fase *canted*. Em uma cadeia com condição de contorno cíclica, os supersítios B_l são indistinguíveis, de maneira que a probabilidade do singleto ser encontrado em um dado B_l , η_l , é uma quantidade translacionalmente invariante. Em uma cadeia aberta, a superfície do sistema tende a centralizar essas quase-partículas, como podemos observar na Fig. 6.4(b). Além disso, um fato importante manifestado pelos resultados da Fig. 6.4(b) é a explícita repulsão entre singletos.

Com base no que foi revelado pelos resultados numéricos, tentaremos construir um hamiltoniano efetivo com características clássicas e quânticas a fim de explicitar a natureza quântica da transição em J_{t1} . Nesta abordagem, tratamos a parte da energia devida ao acoplamento J entre os sítios A, E_A , de forma clássica, ou seja,

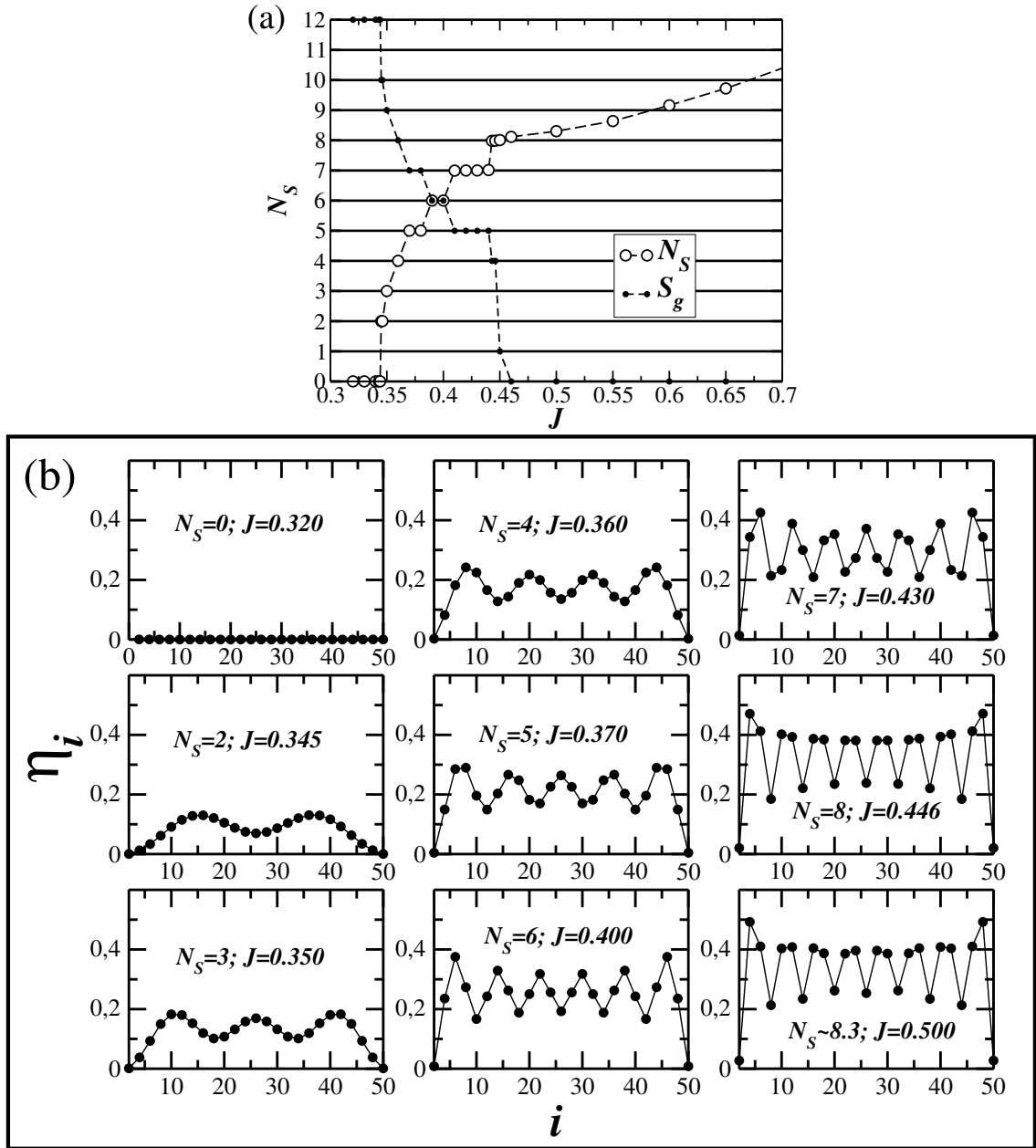


Figura 6.4: (a) Cálculo de DMRG para o número total de células N_S em que os sítios B_1 e B_2 se encontram em um estado singleto para uma cadeia com $N_c = 25$ em função de J ; também está indicado o valor do spin total S_g . (b) Número médio de singlets em função da posição para os valores J indicados nos gráficos.

como um número real dependente de J :

$$E_A = \epsilon_A(J)N_c, \quad (6.5)$$

A parte do hamiltoniano que contém as interações da cadeia AB_2 sem frustração (acoplamento J_1 na Fig. 1.5), estudada no Capítulo 4, sofre um incremento de Δ_{S-} (modo F2) na energia quando um singleto é introduzido na rede

$$E_{AB_2} = E_0(J)N_c + \Delta_{S-}, \quad (6.6)$$

onde também consideramos a energia do estado fundamental de forma clássica. A última parte do hamiltoniano contém os acoplamentos J entre os sítios das subredes B_1 e B_2 , sendo idêntica ao hamiltoniano de uma cadeia do tipo escada. Seguindo as Refs. [102] e [103], introduzimos a seguinte transformação de variáveis:

$$\begin{cases} \mathbf{S}_l &= \mathbf{S}_{B_1 l} + \mathbf{S}_{B_2 l}; \\ \mathbf{D}_l &= \mathbf{S}_{B_1 l} - \mathbf{S}_{B_2 l} \end{cases} \quad (6.7)$$

De maneira que a interação escada adquiere a seguinte forma (a menos de uma constante):

$$H_{\text{escada}} = h_1 + h_2 + h_3, \text{ com} \quad (6.8)$$

$$h_1 = \frac{J}{2} \sum_l S_l^2, \quad (6.9)$$

$$h_2 = \frac{J}{2} \sum_l \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+1}, \quad (6.10)$$

$$h_3 = \frac{J}{2} \sum_l \mathbf{D}_l \cdot \mathbf{D}_{l+1}, \quad (6.11)$$

O termo h_1 , Eq. (6.9), pode ser facilmente definido em função da quantidade de singletos na rede:

$$h_1 = (N_c - N_S)J. \quad (6.12)$$

Além disso, visto que os spins dos sítios A são encontrados em um arranjo colinear, podemos escolher a direção oposta ao sentido desses spins como eixo de quantização ($\equiv z$), para os spins dos sítios B. Como mencionamos, o espaço de Hilbert do dímero $B_{1l}B_{2l}$ apresenta 3 estados tripleto e o estado singlete definidos na Tabela 4.1. Podemos obter um hamiltoniano simples para $h_1 + h_2$ se eliminarmos flutuações para estados tripleto com $S_{B_1}^z + S_{B_2}^z = 0$ e $S_{B_1}^z + S_{B_2}^z = -1$, ou seja, estamos restringindo o elemento quântico a flutuações entre estados singlete ($\equiv |s\rangle$) e tripleto com $S_{B_1}^z + S_{B_2}^z = 1$ ($\equiv |t\rangle$). Neste espaço de Hilbert truncado, o único termo não-nulo das variáveis S_l do hamiltoniano h_2 , Eq. (6.10), é a componente diagonal S_l^z :

$$S_l^z |t, l\rangle = |t, l\rangle, \quad (6.13)$$

de modo que h_2 pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} h_2 &= \frac{J}{2} \sum_l (1 - n_l)(1 - n_{l+1}) \\ &= \frac{JN_c}{2} + \frac{J}{2} \sum_l n_l n_{l+1} - JN_S, \end{aligned} \quad (6.14)$$

onde n_l é o número de ocupação de singletos do supersítio B_l . Vemos então que o hamiltoniano h_2 contém o termo de repulsão entre singletos que se manifesta nos cálculos exibidos na Fig. 6.4(c). Gostaríamos também que o leitor notasse o fator $-JN_S$, também encontrado na Eq. (6.12), o qual demonstra que J funciona como um potencial químico para os singletos; ou como um campo magnético externo

acoplado às excitações magnéticas de um sistema de spins (veja o Capítulo 4).

Continuando no espaço de Hilbert truncado do dímero $B_{1l}B_{2l}$ é possível mostrar que os únicos termos não-nulos das variáveis $\mathbf{D}_l$ do hamiltoniano h_3 , Eq. (6.11), são os seguintes:

$$\begin{cases} D_l^+ |s_l\rangle &= \sqrt{2} |t_l\rangle; \\ D_l^- |t_l\rangle &= \sqrt{2} |s_l\rangle. \end{cases} \quad (6.15)$$

A estrutura dessas equações nos leva a reformular o problema considerando $|t, l\rangle$ como o estado de vácuo do dímero e definindo um operador de criação (destruição) $s^\dagger$ (s) de *bósons* singletos [102, 104] segundo

$$\begin{cases} s_l^\dagger &\equiv \sqrt{2} D_l^-; \\ s_l &\equiv \sqrt{2} D_l^+, \end{cases} \quad (6.16)$$

com a imposição do vínculo do tipo *esfera-dura* aos bósons, ou seja, os únicos estados possíveis são o singlete $|s\rangle$ e o tripleto $|t\rangle$ (estado de vácuo). Substituindo as Eqs. (6.16) na Eq. (6.10), encontramos o hamiltoniano

$$h_3 = \frac{J}{2} \sum_l (s_l^\dagger s_{l+1} + h.c.), \quad (6.17)$$

o qual é responsável pela itinerância dos singletos na rede, que foi evidenciada nos resultados expostos na Fig. 6.4(c). Agrupando os termos h_1 , h_2 e h_3 – Eqs. (6.12), (6.14) e (6.17), respectivamente – no hamiltoniano escada [Eq. (6.8)] e inserindo-os juntamente com os termos (6.5) e (6.6) no hamiltoniano (6.1), este será reescrito como

$$H = \epsilon(J)N_c - 2JN_s + \Delta_{s-} + \frac{J}{2} \sum_l n_l n_{l+1} + \frac{J}{2} \sum_l (s_l^\dagger s_{l+1} + h.c.), \quad (6.18)$$

onde os coeficientes dos termos extensivos foram agrupados em $\epsilon(J) \equiv \frac{3J}{2} + E_0(J) + \epsilon_A(J)$. A diferença de energia, $\omega_-(q, J)$, entre o estado sem singletos, obtida fazendo $N_S = 0$ no hamiltoniano (6.18), e o estado com 1 singlete, calculada fazendo $N_S = 1$ em (6.18), é dada por

$$\omega_-(q, J) = -2J + \Delta_{S-} + J \cos(q), \quad (6.19)$$

que explicita a dependência com J do modo ferromagnético F2 estudado no Capítulo 4. Na Fig. 6.5(a) apresentamos cálculos de diagonalização exata para ω_- em uma cadeia de 10 células e a sua aproximação expressa pela Eq. (6.19). Notamos que a aproximação é muito boa em torno de $q = \pi$, embora apresente uma largura de banda, δ , consideravelmente maior que o resultado numérico, como pode ser observado na Fig. 6.5(b). Além disso, o *gap* entre a excitação singlete e o estado ferrimagnético de Lieb para $J < J_{t1}$ é dado por

$$\begin{aligned} \Delta(J) &\equiv \omega_-(\pi, J) \\ &= -3J + \Delta_{S-}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Na Fig. 6.5(b) comparamos o cálculo exato de $\Delta(J)$ para um sistema de 10 células e a aproximação [Eq. (6.20)]. A transição ocorre no valor de J para o qual o *gap* $\Delta(J_{t1}) = 0$, o que resulta em $J_{t1} = \Delta_{S-}/3 \approx 0.3335$ para a abordagem efetiva; que é um valor muito próximo da estimativa $J_{t1} = \Delta_{S-}/3 \approx 0.34$ obtida através de diagonalização exata. Uma outra informação relevante contida na Eq. (6.20) é o expoente com o qual o *gap* se anula na transição:

$$\Delta \sim |J - J_{t1}|^{z\nu}, \quad (6.21)$$

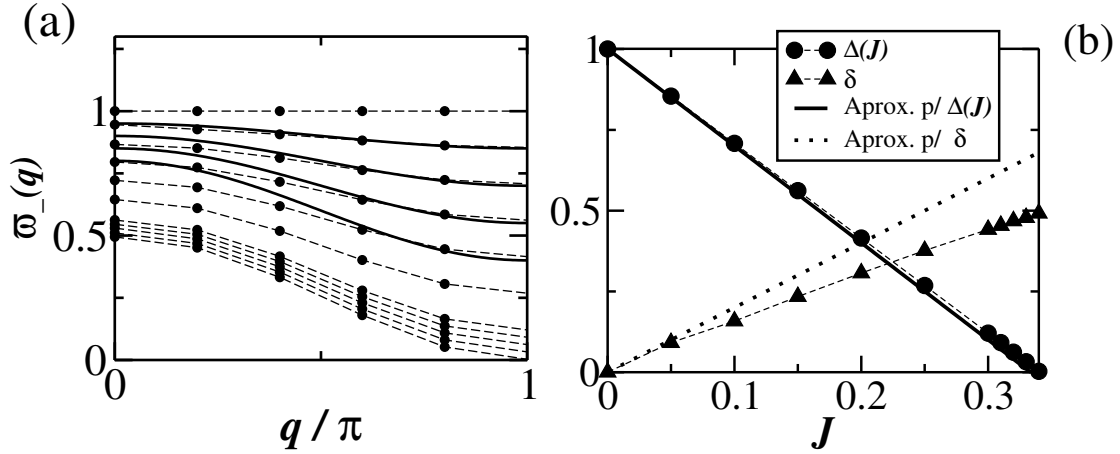


Figura 6.5: (a) Comportamento do modo ferromagnético F2 com o acoplamento J calculado através de diagonalização exata em um sistema de 10 células ($\bullet$) e da aproximação discutida no texto (linha sólida); de cima para baixo encontramos as curvas para $J = 0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30, 0.31, 0.32, 0.33, 0.34, 0.341, 0.342, 0.343$ e 0.344 . (b) Variação com J do *gap* $\Delta(J)$ entre o estado fundamental e o modo ferromagnético, bem como a largura de banda δ do modo F2.

onde z é o expoente dinâmico da transição e ν é o expoente com o qual o comprimento de correlação diverge na transição. Comparando as Eqs. (6.20) e (6.21), bem como o perfil do resultado exato da Fig. 6.5(b), encontramos $z\nu = 1$. Resultado idêntico foi encontrado por Raposo e Coutinho-Filho [29] e Yang [105] nos contextos dos modelos σ não-linear com termo de Wess-Zumino ferromagnético e Luttinger ferromagnético, próximo aos pontos críticos quânticos, respectivamente. Além disso, Sachdev e Senthil [102] encontram que $z\nu$ é igual a 1 para a transição da fase ferromagnética quantizada para a fase *canted* em um modelo de rotores quânticos. Uma questão interessante é a relação entre as transições que ocorrem pela variação do campo magnético em sistemas de spins na região de platôs na curva $m(H)$ e a condensação de Bose em sistemas de bósons interagente [106], uma argumentação introduzida

por Affleck [107] no estudo da cadeia antiferromagnética de spins 1. Apesar da transição que encontramos não estar relacionada à variação de um campo magnético, a relação $z\nu = 1$ é idêntica à encontrada na transição do isolante de Mott para a fase superfluida em um sistema de bósons [104]. De fato, a relação das fases exibidas pelo nosso modelo com todas essas idéias é uma questão que será aprofundada no futuro.

6.4 Transições em J_{t2} e J_{t3}

Na Fig. 6.6(a) exibimos o fator de estrutura magnético $S(q)$ [Eq. (5.6)] para valores de acoplamento $0.5 \leq J \leq 1$, o qual demonstra que correlações incomensuráveis se desenvolvem no sistema para $J > J_{t2}$ com $J_{t2} \sim 0.44$; um fato que também foi evidenciado por F_A e F_B , expostos nas Figs. 6.2(a) e 6.2(b). O valor de q para o qual $S(q)$ é máximo, $q_{\max}$, é apresentado na Fig. 6.6(b). O comportamento de $q_{\max}$ indica que para $J \sim 0.83$, o sistema se encontra em uma fase com o dobro do período da fase ferrimagnética. Além disso, os fatores de estrutura F_A e F_{B_1} mostrados na Fig. 6.6(c) sugerem um arranjo antiferromagnético interno às três sub-redes e a função de correlação exposta na Fig. 6.2(c) indica que os sítios B_1 e B_2 de uma mesma célula apresentam fortes correlações antiferromagnéticas para $J > 0.83$. Ademais, os nossos resultados mostram que em toda a região $J_{t2} < J < 1$ o *gap* de spin é nulo. Baseados nesses fatos, chamamos a fase que se estabelece para $J_{t3} < J < 1.0$ de fase de cadeias antiferromagnéticas acopladas e acreditamos que a Fig. 6.6(d) ilustre adequadamente esta fase.

Desta maneira, vemos que as transições que estão ocorrendo em J_{t2} e J_{t3} são do tipo comensurável-incomensurável. Transições desta natureza em geral acarretam a

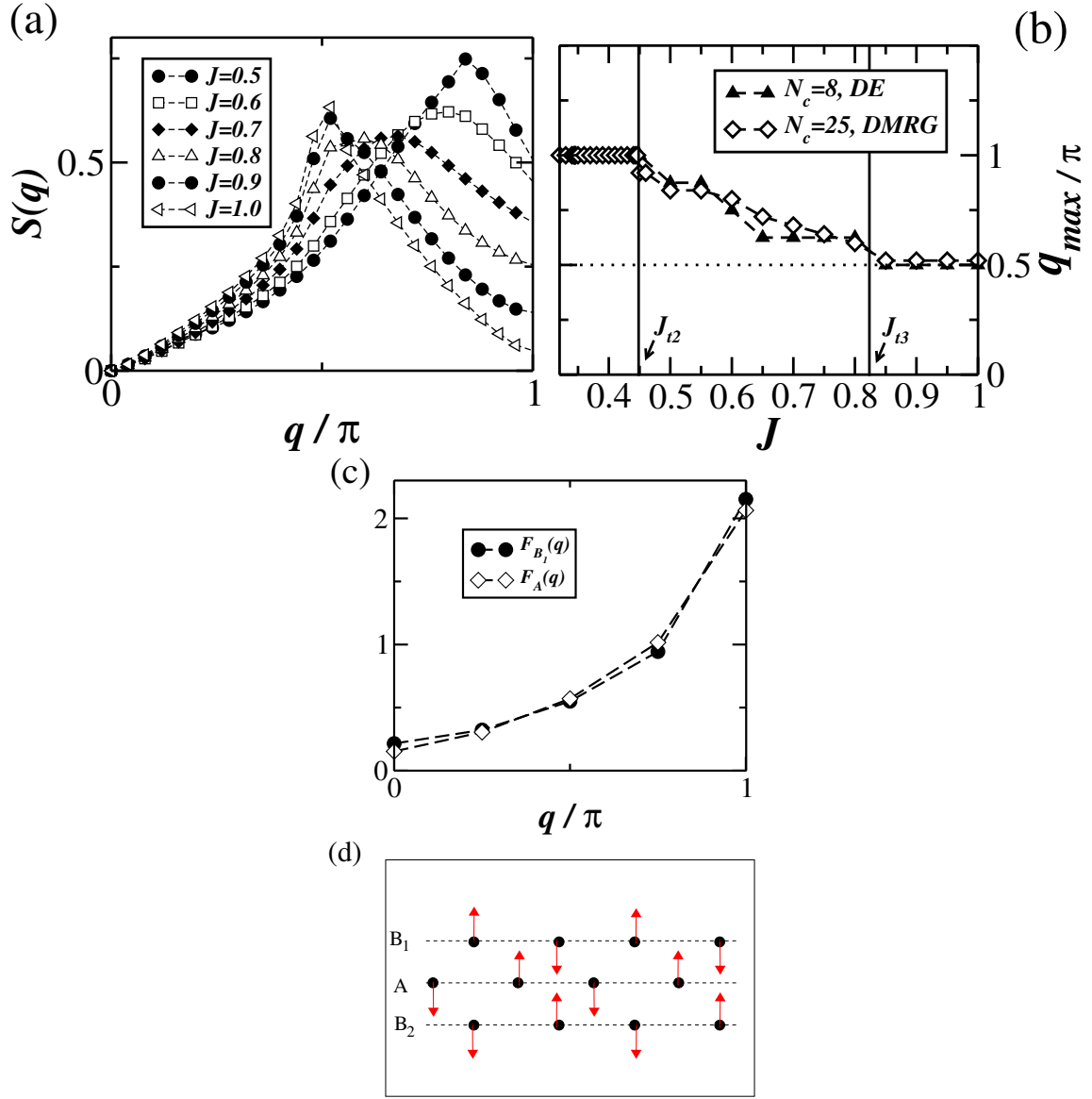


Figura 6.6: (a) Cálculo de DMRG do fator de estrutura magnético $S(q)$ em uma cadeia com $N_c = 25$ para os valores de J indicados. (b) Picos em $S(q)$ em função de J ; na legenda, o termo DE indica que o cálculo foi realizado através de diagonalização exata. (c) Cálculo de diagonalização exata para as quantidades indicadas em um sistema com $N_c = 8$ e $J = 0.9$. (d) Ilustração do estado fundamental na fase com três cadeias antiferromagnéticas acopladas.

presença de um *ponto de desordem* [108] no lado comensurável da transição ¹. Esta é uma questão que tentaremos abordar no futuro.

6.5 Sumário e Conclusões

Neste capítulo observamos a instabilidade do estado ferrimagnético de Lieb quanto à introdução de um padrão específico de interações competitivas no modelo de Heisenberg sobre a cadeia AB_2 . Três pontos de transição foram identificados no modelo: $J_{t1} \approx 0.34$, $J_{t2} \approx 0.44$ e $J_{t3} \approx 0.83$. A transição em J_{t1} ocorre entre o estado ferrimagnético de Lieb e uma fase *canted*, na qual a ordem ferrimagnética é preservada. Através dos resultados numéricos e de um hamiltoniano efetivo motivado por estes dados, identificamos que a transição contínua em J_{t1} é consequência do estabelecimento no estado fundamental de quase-partículas singleto itinerantes com interações repulsivas. A transição em J_{t2} é de primeira ordem, com o spin total variando de $\approx 0.40S_{Lieb}$ para 0 em J_{t2} . A partir deste valor, estados espirais são encontrados, os quais são estáveis até J_{t3} , onde se verifica uma configuração de três cadeias antiferromagnéticas acopladas.

¹Veja também a Ref. [99]

Capítulo 7

Resumo das Conclusões

Neste trabalho estudamos cadeias ferrimagnéticas quânticas através dos modelos de Hubbard, Heisenberg e $t - J$ em cadeias com topologias de célula unitária dos tipos AB_2 e ABC . Para semi-preenchimento da banda, consideramos o efeito da repulsão coulombiana, U , no estado fundamental ferrimagnético de Lieb e em suas excitações magnéticas. Explicitamos os modos de onda de spin e identificamos uma excitação antiferromagnética com *gap*, o qual é responsável por um platô na curva de magnetização em função de um campo magnético externo. Além disso, verificamos que o platô é nulo apenas para $U = 0$, o que demonstra a forte estabilidade da ordem ferrimagnética quanto a variações de U . Em seguida analisamos o efeito de dopagem (δ), através dos modelos de Hubbard e $t - J$, assim como o efeito da inclusão de acoplamentos competitivos no estado ferrimagnético da cadeia AB_2 descrita pelo modelo de Heisenberg. No primeiro caso, verificamos que a fase ferrimagnética demonstra uma fraca estabilidade quanto à introdução de buracos no sistema, sendo estável no máximo até $\delta \sim 0.02$. Sob efeito de dopagem, a cadeia AB_2 exibe um rico diagrama de fases, com a ocorrência de estados espirais, regiões de separação de fases, estados

isolantes do tipo RVB de curto alcance e fases de líquido de Luttinger. O limite U -infinito também foi detalhadamente estudado. Em particular, salientamos a presença do estado ferromagnético de Nagaoka além das fases e estados já mencionados. No segundo caso, efeito de competição ($\equiv J_2$) no modelo de Heisenberg, comprovamos que a fase ferrimagnética de Lieb apresenta uma larga faixa de estabilidade $0 \leq J_2 \lesssim 0.34$ e que o diagrama de fases do modelo exhibe regiões de ordem *canted*, espiral e de cadeias antiferromagnéticas acopladas, com a ocorrência de transições contínuas e de primeira ordem.

Bibliografia

- [1] P. A. Lee, N. Nagaosa, X. G. Wen, Rev. Mod. Phys. **78**, 17 (2006).
- [2] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
- [3] E. Dagotto e T. M. Rice, Science **271**, 618 (1995).
- [4] P. W. Anderson, *The Theory of Superconductivity in the High-Tc Cuprates* (Princeton University Press, Princeton, 1997).
- [5] M. Uehara, T. Nagata, J. Akimitsu, H. Takahashi, N. Môri e K. Kinoshita, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 2764 (1996).
- [6] Y. Hosokoshi, K. Katoh, Y. Nakazawa, H. Nakano, e K. Inoue, J. Am. Chem. Soc. **123**, 7921 (2001); K. L. Yao, H. H. Fu, e Z. L. Liu **135**, 197 (2005).
- [7] A. M. S. Macêdo, M. C. dos Santos, M. D. Coutinho-Filho e C. A. Macêdo, Phys. Rev. Lett. **74**, 1851 (1995).
- [8] A. A. Ovchinnikov e V. N. Spector, Synth. Met. **27**, 615 (1987).
- [9] M. Matsuda, K. Kakurai, A. A. Belik, M. Azuma, M. Takano, e M. Fujita, Phys. Rev. B **71**, 144411 (2005).

-
- [10] J. B. Anderson, E. Kostiner, e F. A. Ruszala, J. Solid State Chem. **39**, 29 (1981).
- [11] M. Drillon *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **128**, 83 (1993).
- [12] A. A. Belik, A. Matsuo, M. Azuma, K. Kindo, e M. Takano, J. Solid State Chem. **178**, 709 (2005).
- [13] A. Boukhari, A. Moqine, e S. Flandrois, Mat. Res. Bull. **21**, 395 (1986).
- [14] H. Effenberger, J. Solid State Chem. **142**, 6 (1999).
- [15] F. C. Alcaraz e A. L. Malvezzi, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 767 (1997).
- [16] R. R. Montenegro-Filho e M. D. Coutinho-Filho, Physica A **357**, 173 (2005).
- [17] S. Yamamoto, S. Brehmer e H.-J. Mikeska, Phys. Rev. B **57**, 13610 (1998); N. B. Ivanov, Phys. Rev. B **62**, 3271 (2000); S. Yamamoto, Phys. Rev. B **69**, 64426 (2004).
- [18] M. A. Martín-Delgado, J. Rodriguez-Laguna, e G. Sierra, Phys. Rev. B **72**, 104435 (2005).
- [19] G. Sierra, M. A. Martín-Delgado, S.R. White, D. J. Scalapino e J. Dukelsky, Phys. Rev. B **59**, 7973 (1999).
- [20] Y. V. Korshak, T. V. Medvedera, A. A. Ovchinnikov e V. N. Spector, Nature **326**, 370 (1987).
- [21] M. Takahashi, P. Turek, Y. Nakazawa, M. Tamura, K. Nozawa, D. Shiomi, M. Ishikawa, e M. Kinoshita, Phys. Rev. Lett. **67**, 746 (1991).
-

-
- [22] R. R. Montenegro-Filho e M. D. Coutinho-Filho, Phys. Rev. B (2006), no prelo.
- [23] G.-S. Tian e T.-H. Lin, Phys. Rev. B **53**, 8196 (1996).
- [24] C. P. de Melo e S. A. F. Azevedo, Phys. Rev. B **53**, 16258 (1996).
- [25] S.-D. Liang, Z. D. Wang, Q. Wang e S.-Q. Shen, Phys. Rev. B **59**, 3321 (1999).
- [26] C. Vitoriano, F. B. de Brito, E. P. Raposo e M. D. Coutinho-Filho, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **374**, 185 (2002).
- [27] T. Nakanishi e S. Yamamoto, Phys. Rev. B **65**, 214418 (2002).
- [28] E. P. Raposo e M. D. Coutinho-Filho, Phys. Rev. Lett. **78**, 4853 (1997).
- [29] E. P. Raposo e M. D. Coutinho-Filho, Phys. Rev. B **59**, 14384 (1999).
- [30] M. H. Oliveira, M. D. Coutinho-Filho e E. P. Raposo, Phys. Rev. B **72**, 214420 (2005).
- [31] C. Vitoriano, M. D. Coutinho-Filho e E. P. Raposo, J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 9049 (2002).
- [32] Y. Watanabe e S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 3086 (1999).
- [33] Z. Fang, Z. L. Liu e K. L. Yao, Phys. Rev. B **49**, 3916 (1994).
- [34] Y. F. Duan e K. L. Yao, Phys. Rev. B **63**, 134434 (2001).
- [35] W. Z. Wang, Z. L. Liu e K. L. Yao, Phys. Rev. B **55**, 12989 (1997).
- [36] W. Z. Wang, Phys. Rev. B **73**, 35118 (2006).
-

-
- [37] H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo e T. Idehara, *Physica B* **329-333**, 967 (2003).
- [38] H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai e H. Ohta, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 227201 (2005).
- [39] E. Dagotto, T. Hotta, A. Moreo, *Phys. Rep.* **344**, 1 (2001).
- [40] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **79**, 350 (1950).
- [41] M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).
- [42] H. Bethe, *Ann. Phys.* **3**, 133 (1929).
- [43] J. H. Van Vleck, em *The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities*, capítulo XI. Oxford Univ. Press, London and New York, 1932.
- [44] J. Huheey, A. E. Keiter e R. L. Keiter, *Inorganic Chemistry*, Harper Collins College, New York, 1993.
- [45] P. W. Anderson, em *Magnetism*, editado por G. T. Rado e H. Suhl (Academic, New York), Vol I (1963).
- [46] H. A. Kramers, *Physica* **1**, 182 (1934).
- [47] J. Kanamori, *J. Phys. Chem. Solids* **10**, 87 (1959).
- [48] J. B. Goodenough, *Phys. Rev.* **100**, 564 (1955).
- [49] Y. Mizuno, T. Tohyama, S. Maekawa, T. Osafune, N. Motoyama, H. Eisaki e S. Uchida, *Phys. Rev. B* **57**, 5326 (1998).
- [50] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **115**, 2 (1959).
-

-
- [51] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A276**, 238 (1963); *ibid* **A277**, 237 (1964); *ibid* **A281**, 401 (1964).
- [52] J. Zaanen, G. A. Sawatzky e J. W. Allen, Phys. Rev. Lett. **55**, 418 (1985).
- [53] F. C. Zhang e T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988).
- [54] C. Lanczos, J. Res. Natl. Bur. Stad. **45**, 255 (1950).
- [55] E. R. Gagliano, E. Dagotto, A. Moreo e F. C. Alcaraz, Phys. Rev. B **34**, 1677 (1986).
- [56] E. R. Gagliano e S. B. Bacci, Phys. Rev. D **36**, 546 (1987).
- [57] E. R. Gagliano e C. A. Balseiro, Phys. Rev. B **38**, 11766 (1988).
- [58] E. R. Gagliano e S. B. Bacci, Phys. Rev. Lett. **62**, 1154 (1989); J. Jaklic and P. Prelovsek, Phys. Rev. B **49**, 5065 (1994).
- [59] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [60] U. Schollwock, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005).
- [61] A. L. Malvezzi, Braz. J. Phys. **33**, 55 (2003).
- [62] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **77**, 3633 (1996).
- [63] E. H. Lieb e D. C. Mattis, Phys. Rev. **125**, 164 (1962).
- [64] E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. **62**, 1201 (1989).
- [65] G.-S. Tian, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 2305 (1994).
- [66] S.-Q. Shen, Z.-M. Qiu e G.-S. Tian, Phys. Rev. Lett. **72**, 1280 (1994).
-

-
- [67] F. B. de Brito, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Pernambuco, 2001. Para a cadeia ABC é encontrada uma solução analítica para $J_{AB} = J_{AC}/2$, neste caso o modo ferromagnético com *gap* é *flat*.
- [68] M. Oshikawa, M. Yamanaka, e I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **78**, 1984 (1997).
- [69] L. Capriotti, F. Becca, S. Sorella e A. Parola, Phys. Rev B **67**, 172404 (2003).
- [70] Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).
- [71] R. Jullien e R. M. Martin, Phys. Rev. B **26**, 6173 (1982).
- [72] R. Resta e S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **82**, 2560 (1999); A. A. Aligia e G. Ortiz, Phys. Rev. Lett. **82**, 370 (1999).
- [73] K. Kusakabe e H. Aoki, Phys. Rev. B **52**, R8684 (1995).
- [74] T. Koma e H. Tasaki, J. Stat. Phys. **76**, 745 (1994).
- [75] R. Arita e H. Aoki, Phys. Rev. B **61**, 12261 (2000).
- [76] S. A. Kivelson, I. P. Bindloss, E. Fradkin, V. Oganessian, J. M. Tranquada, A. Kapitulnik e C. Howald, Rev. Mod. Phys. **75**, 1201 (2003).
- [77] E. Eisenberg, R. Berkovits, David A. Huse, e B. L. Altshuler, Phys. Rev. B **65**, 134437 (2002).
- [78] K. Kusakabe e H. Aoki, Phys. Rev. B **50**, 12991 (1994).
- [79] S. Liang e H. Pang, Europhys. Lett. **32**, 173 (1995); M. Kohno, Phys. Rev. B **56**, 15015 (1997); H. Ueda e T. Idogaki, Phys. Rev. B **69**, 104424 (2004).
- [80] F. Becca e S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **86**, 3396 (2001).
-

-
- [81] V. J. Emery, S. A. Kivelson, e H. Q. Lin, Phys. Rev. Lett. **64**, 475 (1990).
- [82] S. Rommer, S. R. White e D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **61**, 13424 (2000); C. S. Hellberg e E. Manousakis, Phys. Rev. B **61**, 11787 (2000); M. Calandra, F. Becca e S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **81**, 5185 (1998); W. O. Puttika, M. U. Luchini e T. M. Rice, Phys. Rev. Lett. **68**, 538 (1992).
- [83] S. R. White e D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **61**, 6320 (2000).
- [84] M. Ogata, M. U. Luchini, S. Sorella e F. F. Assaad, Phys. Rev. Lett. **66**, 2388 (1991); C. S. Hellberg e E. J. Mele, Phys. Rev. B **48**, 646 (1993).
- [85] C. A. Hayward e D. Poilblanc, Phys. Rev. B **53**, 11721 (1996).
- [86] M. Troyer, H. Tsunetsugu e T. M. Rice, Phys. Rev. B **53**, 251 (1996); T. F. A. Muller e T. M. Rice, Phys. Rev. B **58**, 3425 (1998).
- [87] D. S. Rokhsar e S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. **61**, 2376 (1988).
- [88] A. Gieseckus, Phys. Rev. B **52**, 2476 (1995).
- [89] F. D. M. Haldane, J. Phys. C **14**, 2585 (1981); J. Voit, Rep. Prog. Phys. **58**, 977 (1995).
- [90] W. Kohn, Phys. Rev. **133**, A171 (1964).
- [91] R. M. Fye, M. J. Martins, D. J. Scalapino, J. Wagner, e W. Hanke, Phys. Rev. B **44**, 6909 (1991).
- [92] E. H. Lieb e F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
-

-
- [93] A. Parola e S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **64**, 1831 (1990); H. J. Schulz, Phys. Rev. Lett. **64**, 2831 (1990).
- [94] A. S. F. Tenório, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Pernambuco, 2005.
- [95] A. Honecker e A. Lauchli, Phys. Rev. B **63**, 174407 (2001); T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikihara, Y. Takahashi, M. Kaburagi, J. Phys. Chem. Solids **62**, 125 (2001).
- [96] K. Sano e K. Takano, J. Phys. Soc. jpn. **69**, 2710 (2000); K. Okamoto, T. Tonegawa, Y. Takahashi e M. Kaburagi, J. Phys.: Condens. Matter **11**, 10485 (1999); K. Takano, K. Kubo e H. Sakamoto, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 6405 (1996).
- [97] H. Niggemann, G. Uimin e J. Zittartz, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 5217 (1998); H. Niggemann, G. Uimin e J. Zittartz, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 9031 (1997).
- [98] Ch. Waldtmann, H. Kreutzmann, U. Schollwock, K. Maisinger e H.-U. Everts, Phys. Rev. B **62**, 9472 (2000).
- [99] N. B. Ivanov, J. Richter e U. Schollwock, Phys. Rev. B **58**, 14456 (1998).
- [100] V. R. Chandra, D. Sen, N. B. Ivanov e J. Richter, Phys. Rev. B **69**, 214406 (2004).
- [101] N. B. Ivanov e J. Richter, Phys. Rev. B **69**, 214420 (2004); *ibid.*, Phys. Rev. B **73**, 132407 (2006).
-

-
- [102] S. Sachdev e T. Senthil, *Annals of Physics* **251**, 76 (1996).
- [103] J.-B. Fouet, F. Mila, D. Clarke, H. Youk, O. Tchernyshyov, P. Fendly, R. M. Noack, *Phys. Rev. B* **73**, 214405 (2006).
- [104] T. Giamarchi e A. M. Tsvelik, *Phys. Rev. B* **59**, 11398 (1999).
- [105] K. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 66401 (2004).
- [106] M. P. A. Fisher, P. B. Weichmann, G. Grinstein, D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989).
- [107] I. Affleck, *Phys. Rev. B* **43**, 3215 (1991); *ibid.*, *Phys. Rev. B* **41**, 6697 (1990).
- [108] A. Kolezhuk, R. Roth e U. Schollwöck, *Phys. Rev. B* **55**, 8928 (1998) e referências citadas.