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

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

MODELO DE HUBBARD ESTENDIDO NA CADEIA AB2

por

Diego Alejandro Cogollo Aponte

Dissertação 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 Mestre em Física.

Banca Examinadora:
Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho (Orientador-UFPE)
Prof. Antônio Murilo Santos Macêdo (DF – UFPE)
Prof. Marcelo Leite Lyra (DF - UFAL)

Recife - PE, Brasil
Setembro - 2005

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

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 Dissertação de Mestrado

Diego Alejandro Cogollo Aponte

MODELO DE HUBBARD ESTENDIDO NA CADEIA AB2

A Banca Examinadora composta pelos Professores Maurício Domingues Coutinho Filho (Presidente e Orientador), Antônio Murilo Santos Macêdo, todos da Universidade Federal de Pernambuco e Marcelo Leite Lyra do Departamento de Física da Universidade Federal de Alagoas, consideram o candidato:

( ) Aprovado com Distinção (X) 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 em primeiro de setembro de 2005.

Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho
Presidente e Orientador

Prof. Antônio Murilo Santos Macêdo

Prof. Marcelo Leite Lyra

A Dios.

A mi Madre.

A mis hermanos.

Al buhito.

A Colombia.

Al general Bolivar.

AGRADECIMENTOS

A CNPQ pelo apoio financiero.

Ao professor Maurício pela confiança, apoio, e orientação.

A Renê pela imensa ajuda.

A la flaca por la colaboracion y cariño.

Al turco por los almuerzos de 3 *reales*

A mi tia Ana

A Meus colegas do laboratorio, Mario Enrique e o sehor Sandoildo.

Resumo

Nesta dissertação estudamos o hamiltonianano estendido de Hubbard através do método de diagonalização exata de Lanczos, em condição de contorno periódica, com foco na caracterização das propriedades magnéticas e de condução do estado fundamental da cadeia quântica AB2, nos diferentes regimes (forte, intermediário, fraco) de repulsão coulombiana local U e inter-sítio V, em semi-preenchimento da banda. Seguindo o mesmo procedimento caracterizamos o estado fundamental para a cadeia linear, comparando nossos resultados testes com aqueles já reportados na literatura. A inclusão da interação V, não considerada em estudos anteriores na cadeia AB2, deu origem a um novo diagrama de fases no plano (U,V), o qual exibe uma similitude não trivial com o diagrama obtido para a cadeia linear. No regime de acoplamento coulombiano U$\gtrsim$5t e para V$\lesssim$U/4, nosso sistema está numa fase ferrimagnética ($FERRI$), com a carga homogeneamente distribuída em cada sub-rede, e magnetizações locais $< S_A^z > \cong$ -0.25 e $< S_B^z > \cong$ 0.75. Para V$\gtrsim$U/4, o sistema se encontra em uma fase *onda de densidade de carga com ordem ferromagnética* ($ODCF$), tal que $< S_A^z >$ =0 e $< S_B^z >$ =0.5, exibindo um defeito na distribução de carga. No regime de acoplamento coulombiano U$\lesssim$5t, o sistema exibe uma fase intermediária com correlação magnética tipo $Espiral$. Neste regime o spin salta do valor 1/2 por célula unitária, na fase $FERRI$, para zero na fase $Espiral$, e de zero ao valor de 1/2 por célula unitária na fase $ODCF$. Nossa análise de escala de tamanho finito indica que as duas transições são de primeira ordem no campo de spin. Examinamos também a natureza das fases mencionadas com respeito às propriedades de condução, assim como a ocorrência de um ponto multi-crítico na linha V$\approx$U/4 para U$\approx$5t.

Abstract

In this Dissertation we study the extended Hubbard Hamiltonian using the exact Lanczos method of diagonalization, with periodic boundary conditions, focusing on the characterization of magnetic and conduction properties of the ground state of the AB2 chain in different regimes of local U and inter site V Coulombian repulsion and half-filled band. Following the same procedure we characterize the ground state of the linear chain, comparing our results with those already reported in the literature. The inclusion of the interaction V, not considered in previous studies on the AB2 chain, gave origin to a new phase diagram in the (U,V) plane, which exhibits a non trivial similarity with the one obtained for the linear chain. In the regime U $\gtrsim$ 5t and for V $\lesssim$ U/4, our system is in a phase with homogeneous charge distribution in both sub lattices, *FERRI*, and local spin averages $< S_A^z > \cong$ -0.25 and $< S_B^z > \cong$ 0.75. For V $\gtrsim$ U/4 the system is in a phase (*ODCF*) such that $< S_A^z >$ =0 and $< S_B^z >$ =0.5 exhibiting a charge defect. In the regime U $\lesssim$ 5t the system presents an intermediary phase with magnetic correlation of spiral type, with spin jumps of 1/2 by unitary cell in the *FERRI* phase to zero in the spiral phase, and from zero to 1/2 by unitary cell in the *ODCF* phase. Our finite size scaling analysis indicates that the two transitions are of first order in the spin field. We also examine the nature of the phases mentioned with repect to the conduction properties, as well as the ocurrence of a multicritical point in the line V $\approx$ U/4 for U $\approx$ 5t.

Conteúdo

Introdução **1**

1 O MODELO DE HUBBARD **4**

1.1 Hamiltoniano 4

1.2 Observáveis e Simetrias 7

1.2.1 Simetria Partícula Buraco 8

2 Teoria de grupos **12**

2.1 Introdução 12

2.2 Representações 13

2.2.1 Teorema da Grande Ortogonalidade 14

3 Diagonalização do modelo de Hubbard estendido em aglomerados atômicos simples **17**

3.1 Dímero 17

3.2 Trímero 22

3.3 Triângulo 33

4 Cadeia Linear **48**

5 Resultados **58**

5.1 Cadeia AB2 58

6 Conclusões **77**

A O ALGORITMO DE LANCZOS **79**

B SIMETRIA CARACTERÍSTICA DA CADEIA AB2 **83**

Referências Bibliográicas **85**

Lista de Figuras

1 Cadeia AB2 do tipo metal ligante. 1

2 Cadeia do tipo AB. 2

3 Estado ferrimagnético da cadeia AB2 no regime V=0 e semi-preenchimento da banda. 3

3.1 dímero 17

3.2 trímero 22

3.3 triângulo 34

4.1 Esquema das fases do dímero. 50

4.2 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=40t e N=12,8,6. O regime de acoplamento coulombiano é forte e a transição de primeira ordem no limite termodinâmico. 51

4.3 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=20t e N=12,8,6. O regime de acoplamento coulombiano é forte e a transição de primeira ordem no limite termodinâmico. 51

4.4 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=12t e N=12,8,6. Para este regime de acoplamento coulombiano intermediário, a transição é de primeira ordem no limite termodinâmico. 52

4.5 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=6t e N=12,8,6. Para este regime de acoplamento coulombiano intermediário a transição é de primeira ordem no limite termodinâmico. Observe a diminuição da magnitude da descontinuidade de $< d >$ na transição quando U diminui. 53

4.6 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=3t e N=12,8,6. O regime de acoplamento coulombiano é fraco, a parte vertical na vizinhança de V=U/2 desaparece, e a inclinação da curva depende do número de sítios da cadeia. Para este valor de U temos uma transição de fase contínua no limite termodinâmico. 53

4.7 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=2t e N=12,8,6. O regime de acoplamento coulombiano é fraco, a inclinação da curva depende do número de sítios da cadeia. Para este valor de U temos uma transição de fase contínua no limite termodinâmico 54

4.8 Δ<d> no limite termodinâmico. Vemos que para U$\gtrsim$ 6t, Δ<d> tem um valor finito e diferente de zero, logo, nesta região a transição de fase é de primeira ordem. Para U=3t, e U=2t, Δ<d> é zero no limite termodinâmico, logo, a transição é contínua. 55

4.9 Diagrama de fases para a cadeia linear, N=12. O ponto tricrítico está na região 3t<U<6t. Para V$\lesssim$U/2 o sistema apresenta uma fase SDW. Para V$\gtrsim$U/2 o sistema apresenta uma fase CDW. No regime de acoplamento coulombiano fraco a transição é contínua, e no regime de acoplamento coulombiano forte a transição é de primeira ordem. 56

4.10 Diagrama de fases no plano (U,V) para a cadeia linear obtido na referência [20]. A linha grossa representa a BOW. Na nossa análise não estudamos o significado da linha horizontal. 56

4.11 Diagrama de fases no plano (U,V) para a cadeia linear obtido na referência [22]. Não detalhe as duas linhas que cortam o eixo U. 57

5.1 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=40t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é forte e a transição de primeira ordem no campo de carga no limite termodinâmico. A densidade de partículas é representada por funções descontínuas na vizinhança do ponto V=U/4. 59

5.2 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=20t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é forte e a transição de primeira ordem no campo de carga no limite termodinâmico. A densidade de partículas é representada por funções descontínuas na vizinhança do ponto V=U/4. 59

5.3 U=40t. O spin total permanece constante após a transição, e $S^2(\pi)$ tende ao valor de S^2 pois na fase ODCF os sítios A estão desocupados. 61

5.4 U=20t. O spin total permanece constante após a transição, e $S^2(\pi)$ tende ao valor de S^2 pois na fase ODCF os sítios A estão desocupados. 62

5.5 Fase ferrimagnética para U=40t e V=2,5. Na figura a) apresentamos o spin local e a carga local para a cadeia de N=18 sítios. Cada número na horizontal representa um sítio da rede, iniciando pelo sítio A da primeira célula com o número 1, e os sítios B_1 e B_2 da mesma célula com o número 2. Na figura b), são apresentadas as mesmas quantidades para a cadeia de N=12 sítios. Note que nesta fase o estado fundamental encontra-se no sub-espaço de simetrias $(-)^{N_c}$. 62

5.6 Fase ferrimagnética para U=20t e V=1. Na figura *a*), apresentamos o spin local e a carga local para a cadeia de N=18 sítios. Cada número na horizontal representa um sítio da rede, iniciando pelo sítio A da primeira célula com o número 1, e os sítios B_1 e B_2 da mesma célula com o número 2. Na figura *b*), são apresentadas as mesmas quantidades para a cadeia de N=12 sítios. Note que nesta fase o estado fundamental encontra-se no sub-espaço de simetrias (-)^{N_c}. 63

5.7 Fase de ODCF para U=40t e V=15. Na figura *a*), apresentamos o spin local e a carga local para a cadeia de N=18 sítios. Vemos o defeito de carga gerado nesta fase, ou seja, as quatro cargas acumuladas na primeira célula unitária nos sítios B_1 e B_2. Na figura *b*), são apresentadas as mesmas quantidades para a cadeia de N=12 sítios. Vemos também o defeito de carga gerado na primeira célula. Nesta fase o estado fundamental encontra-se no sub-espaço de simetrias (+)(-)$^{N_c-1}$, quebrando com a simetria de translação global da cadeia. 63

5.8 Fase de ODCF para U=20t e V=13. Na figura *a*), apresentamos o spin local e a carga local para a cadeia de N=18 sítios. Vemos o defeito de carga gerado nesta fase, ou seja, as quatro cargas acumuladas na primeira célula unitária nos sítios B_1 e B_2. Na figura *b*), são apresentadas as mesmas quantidades para a cadeia de N=12 sítios. Vemos também o defeito de carga gerado na primeira célula. Nesta fase o estado fundamental encontra-se no sub-espaço de simetrias (+)(-)$^{N_c-1}$, quebrando com a simetria de translação global da cadeia. 64

5.9 Esquema da fase de ODCF. Na figura a) apresentamos um esquema do estado fundamental. Neste esquema os spins *down*, apresentados em vermelho, estão compartindo-se entre a célula na que são apresentados e as suas células vizinhas. Na figura b) apresentamos um esquema do primeiro estado excitado de spin da cadeia, um dos spins *down* é levado a outro sítio com spin invertido. 65

5.10 *Gap* de spin em função de V no regime de acoplamento coulombiano forte. Para V=0, $\Delta_S \cong 1.76$J. Após a transição, $\Delta_S \cong$ 4V-U. 65

5.11 $\mid Z \mid$ em função de V, para U=40t. Observe que $\mid Z \mid$ aumenta quando o tamanho do sistema aumenta. Nas duas fases o sistema apresenta características de um isolante. 67

5.12 $\mid Z \mid$ em função de V, para U=20t. Observe que $\mid Z \mid$ aumenta quando o tamanho do sistema aumenta. Nas duas fases o sistema apresenta características de isolante. 67

5.13 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=8t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é intermediário e a transição de primeira ordem no campo de carga no limite termodinâmico. Observe a diminuição da magnitude da descontinuidade de $< d >$ na transição quando U diminui. 68

5.14 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=7t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é intermediário e a transição de primeira ordem no campo de carga no limite termodinâmico. Para este valor de U, a descontinuidade diminui ainda mais. . . 68

5.15 U=8t. Para N=12 o spin salta do valor de Lieb, na fase $FERRI$, a zero na fase intermediária; e de zero ao valor de Lieb na fase de $ODCF$. As duas transições são de primeira ordem no campo de spin. Para N=18 o sistema não apresenta esta transição no spin. 69

5.16 U=7t. Para N=12 e N=18 o spin salta do valor de Lieb na fase $FERRI$ a zero na fase intermediária, e de zero ao valor de Lieb na fase de $ODCF$. As duas transições são de primeira ordem no campo de spin. Entretanto, verificamos a forte tendência da não existência da fase intermediária no limite termodinâmico. . 69

5.17 Largura da fase intermediária ΔV, para os diferentes regimes de interação coulombiana. Para U=7t e U=5t prevê-se que no limite termodinâmico esta fase não existe. 70

5.18 Ocorrência da fase intermediária em função de U. Prevê-se que para U$\gtrsim$5t esta fase já não exista no limite termodinâmico. . . . 71

5.19 Fator de estrutura magnética na fase intermediária. O máximo da função em q=$2\pi/N_c$ mostra que a fase é do tipo $Espiral$. . . 71

5.20 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=3t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é fraco. Sugerimos que, no limite termodinâmico, a transição $FERRI$-$Espiral$ é contínua no campo de carga, enquanto a transição $Espiral$-$ODCF$ é de primeira ordem. As pequenas descontinuidades são indicadas com setas, preta para N=12 e vermelha para N=18; veja que o tamanho da descontinuidade diminui quando tamanho da rede aumenta. 72

5.21 Descontinuidade Δ<d> na transição $FERRI$-$Espiral$. Vemos que para estes valores de U, Δ<d> é zero no limite termodinâmico. Prevê-se uma transição contínua no campo de carga. 73

5.22 Descontinuidade Δ<d> na transição *Espiral-ODCF*. Vemos que para estes valores de U, Δ<d> é diferente de zero no limite termodinâmico. Prevê-se uma transição de primeira ordem no campo de carga. 73

5.23 U=3t. N=12 e N=18. O spin salta do valor de Lieb na fase *FERRI* a zero na fase *Espiral*, e de zero ao valor de Lieb na fase de *ODCF*. As duas transições são de primeira ordem no campo de spin. 74

5.24 Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=2t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é fraco. Sugerimos que, no limite termodinâmico, a transição *FERRI-Espiral* é contínua no campo de carga, enquanto a transição *Espiral-ODCF* é de primeira ordem. As pequenas descontinuidades são indicadas com setas, preta para N=12 e vermelha para N=18; veja que o tamanho da descontinuidade diminui quando tamanho da rede aumenta. 75

5.25 U=2t. N=12 e N=18. O spin salta do valor de Lieb na fase ferrimagnética a zero na fase *Espiral*, e de zero ao valor de Lieb na fase de ODCF. As duas transições são de primeira ordem no campo de spin. 75

5.26 Diagrama de fases para a cadeia AB2, N=18. Na região V$\lesssim$ U/4 a cadeia apresenta uma fase *FERRI*. A fase magnética intermediária é *Espiral*, que se estende até U$\approx$5t no limite termodinâmico. Para V$\gtrsim$ U/4 o sistema apresenta uma fase de *onda de densidade de carga* (*ODCF*). A natureza do ponto multicrítico dependerá da ordem da transição *Espiral-ODCF*. . 76

Introdução

Neste trabalho estamos particularmente interessados em caracterizar o estado fundamental da cadeia AB2, (veja Figura 1), cuja topologia é de interesse no contexto de polímeros ferrimagnéticos e *oxocuprates* [1]. Esta cadeia tem sido estudada pelo modelo de Hubbard e t-J [2, 3, 18, 23], Heisenberg quântico [5, 18], Heisenberg clássico e Ising [6]. O Hamiltoniano de Hubbard estendido que será introduzido no capítulo 1 apresenta três termos: um termo cinético $-t$, chamado termo de *hopping*, que é a amplitude de probabilidade de tunelamento dos elétrons entre sítios primeiros vizinhos da rede, uma interação coulombiana intra-atômica ou local U, e uma interação coulombiana entre elétrons primeiros vizinhos V. Esta última interação não foi considerada em estudos anteriores na cadeia AB2.

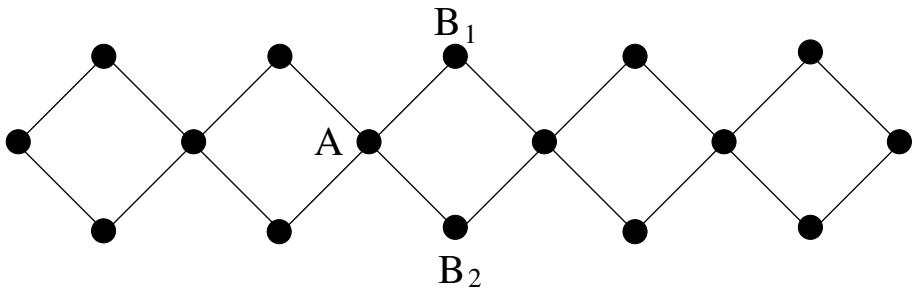

Figura 1: Cadeia AB2 do tipo metal ligante.

Usando técnicas de teoria de grupos, as quais iremos expor no capítulo 2, diagonalizamos o hamiltoniano de Hubbard estendido para aglomerados atômicos simples, como o dímero, o trímero e o triângulo, estendendo os resul-

tados obtidos por Macêdo [11]. Esta diagonalização é apresentada no capítulo 3 como preliminar ao estudo feito para a cadeia AB2.

A inclusão da interação V no hamiltoniano de Hubbard dá origem a novas fases para a cadeia AB2. O seu diagrama de fases no plano (U,V) apresenta uma semelhança não-trivial com o diagrama do modelo de Hubbard estendido da cadeia AB (ou linear), veja Figura 2.

Figura 2: Cadeia do tipo AB.

No capítulo 4 apresentamos nossos resultados teste obtidos para a cadeia linear. Em semi-preenchimento da banda, ela apresenta uma transição de fase quântica de onda de densidade de spin a onda de densidade de carga (SDW-CDW) [9, 12, 20, 21, 22]; no regime de acoplamento coulombiano fraco, a transição é contínua, e no regime de acoplamento coulombiano forte a transição é de primeira ordem. O ponto tricrítico estimamos estar na região 3t<U<6t. Uma nova fase (BOW, bond order wave na nomenclatura inglesa) é evidenciada como o produto da dimerização dos spins [12, 20, 21, 22]. Durante aproximadamente 21 anos procura-se determinar o diagrama de fases deste sistema, tarefa não trivial que ainda hoje é objetivo de pesquisa.

Nossa motivação inicial para este trabalho foi estudar a estabilidade da fase ferrimagnética evidenciada no regime V=0 (veja Figura 3), e esboçar o diagrama de fases no plano (U,V) da cadeia AB2, diagonalizando o hamiltoniano de Hubbard estendido através do algoritmo de Lanczos para diferentes regimes de acoplamento coulombiano U (forte, intermediário, e fraco). As propriedades desta cadeia estão fortemente relacionadas à topologia da célula unitária e à forte correlação eletrônica.

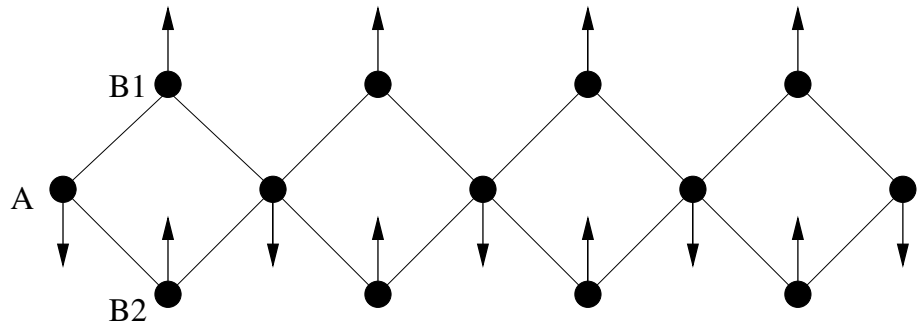

Figura 3: Estado ferrimagnético da cadeia AB2 no regime V=0 e semi-preenchimento da banda.

Para U>0, finito, V=0, e semi-preenchimento da banda, o teorema de Lieb prevê para a cadeia AB2 um spin total igual a:

$$S = \frac{|N_A - N_B|}{2} = \frac{N}{6}, \tag{1}$$

ou spin 1/2 por célula unitária. Este resultado foi confirmado por técnicas numéricas tais como Hartree-Fock(HF), Monte Carlo quântico [2] e diagonalização exata [2, 18, 23]. No capítulo 5 apresentamos nossos resultados obtidos para a cadeia AB2. Fazendo uma análise de tamanho finito caracterizaremos as diferentes transições de fase exibidas pelo sistema (no campo de carga e de spin) nos diferentes regimes de interação coulombiana U, e em semi-preenchimento da banda. Para U$\gtrsim$ 5t e V$\lesssim$U/4 o sistema está numa fase tipo $FERRI$, e para V$\gtrsim$U/4 o sistema posui elétrons nos sítios B ferromagneticamente correlacionados numa fase *onda de densidade de carga com ordem ferromagnética* ($ODCF$). No regime de acoplamento coulombiano fraco, U$\lesssim$ 5t, o sistema exibe uma fase intermediária que posui correlação magnética tipo $Espiral$. Neste capítulo reportaremos a similitude entre os diagramas de fases no plano (U,V) de nosso sistema com o diagrama obtido na referência [22] para a cadeia linear.

Capítulo 1

O MODELO DE HUBBARD

1.1 Hamiltoniano

Um sistema de N_e elétrons interagentes numa rede cristalina pode ser representado pelo seguinte hamiltoniano [11]:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \tag{1.1}$$

onde

$$\hat{H}_0 = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + V(\vec{x}_i) \tag{1.2}$$

é a soma da energia cinética dos N_e elétrons da rede com a energia devido ao potencial periódico gerado pelos núcleos atômicos, e

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \frac{e^2}{|\vec{X}_i - \vec{X}_j|} \tag{1.3}$$

é a energia de repulsão coulombiana entre os elétrons.

Nossa base no espaço de Hilbert é um conjunto completo de funções de uma partícula, centradas em cada um dos N sítios da rede, denominadas funções de Wannier, que admitiremos ser de um só tipo:

$$\phi_{\vec{\lambda}}(\vec{r}-\vec{\lambda}) =< \vec{r}|\vec{\lambda} >, \tag{1.4}$$

onde $\vec{\lambda}$ representa o sítio da rede. A condição de normalização é:

$$< \vec{\lambda}|\vec{\lambda'} > \;\; = \;\; \delta_{\vec{\lambda}\vec{\lambda'}}. \tag{1.5}$$

Usando a relação de clausura [10]:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{\lambda}\vec{\mu}} |\vec{\lambda} >< \vec{\lambda}|\hat{H}_0|\vec{\mu} >< \vec{\mu}|. \tag{1.6}$$

Onde os elementos de matriz $< \vec{\lambda}|\hat{H}_0|\vec{\mu} >=t_{\vec{\lambda}\vec{\mu}}$, para $\vec{\lambda} \neq \vec{\mu}$, são as chamadas integrais de *hopping*, e a sua interpretação física é uma amplitude de probabilidade de tunelamento dos elétrons entre sítios da rede. Os elementos diagonais $< \vec{\lambda}|\hat{H}_0|\vec{\lambda} > = \epsilon_0$ determinam o centro de gravidade dos estados eletrônicos. Nossa escolha é ϵ_0=0, de modo que

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{\lambda}\neq\vec{\mu}} t_{\vec{\lambda}\vec{\mu}}|\vec{\lambda} >< \vec{\mu}|, \tag{1.7}$$

onde

$$t_{\vec{\lambda}\vec{\mu}} = \int \phi^*_{\vec{\lambda}}(\vec{R})\hat{H}_0\phi_{\vec{\mu}}(\vec{R})d\vec{R}. \tag{1.8}$$

Usando operadores de segunda quantização

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{\lambda}\neq\vec{\mu},\sigma} t_{\vec{\lambda}\vec{\mu}}\, C^{\dagger}_{\vec{\lambda}\sigma} C_{\vec{\mu}\sigma}, \tag{1.9}$$

onde $C^{\dagger}_{\vec{\lambda}\sigma}(C_{\vec{\lambda}\sigma})$ cria(destrói) um elétron no sítio $\vec{\lambda}$ com componente de spin σ

e satisfazem as seguintes relações de anticonmutação:

$$\{C^{\dagger}_{i\sigma}C_{j\sigma'}\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'},$$
$$\{C_{i\sigma}C_{j\sigma'}\} = \{C^{\dagger}_{i\sigma}C^{\dagger}_{j\sigma'}\} = 0. \tag{1.10}$$

A segunda parte do hamiltoniano que representa a interação elétron elétron é determinada por integrais do tipo $< \vec{\lambda}\vec{\mu}|\frac{1}{R}|\vec{v}\vec{p} >$:

$$\int \phi^{*}_{\vec{\lambda}}(\vec{R})\phi^{*}_{\vec{\mu}}(\vec{R}')\frac{e^2}{|\vec{R}-\vec{R}'|}\phi_{\vec{v}}(\vec{R})\phi_{\vec{p}}(\vec{R}')d\vec{R}d\vec{R}'. \tag{1.11}$$

Usando a relação de clausura, temos

$$\hat{H}_1 = \sum_{\vec{\lambda}\vec{\mu}\vec{v}\vec{p}} |\vec{\lambda}\vec{\mu} >< \vec{\lambda}\vec{\mu}|\frac{1}{R}|\vec{v}\vec{p} >< \vec{v}\vec{p}|, \tag{1.12}$$

e em segunda quantização,

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2}\sum_{\vec{\lambda}\vec{\mu}\vec{v}\vec{p},\sigma\sigma'} < \vec{\lambda}\vec{\mu}|\frac{1}{R}|\vec{v}\vec{p} > C^{\dagger}_{\vec{\lambda}\sigma}\, C^{\dagger}_{\vec{\mu}\sigma'}\, C_{\vec{p}\sigma'}\, C_{\vec{v}\sigma}. \tag{1.13}$$

Dado o caráter localizado das funções de Wannier (1.4), na interação coulombiana entre os elétrons o termo dominante é a integral $< \vec{\mu}\vec{\mu}|\frac{1}{R}|\vec{\mu}\vec{\mu} >$, ou seja a interação coulombiana intra-atômica ou local U:

$$U = \frac{1}{2}\int \phi^{*}_{\vec{\mu}}(\vec{R})\,\phi^{*}_{\vec{\mu}}(\vec{R}')\frac{e^2}{|\vec{R}-\vec{R}'|}\phi_{\vec{\mu}}(\vec{R})\phi_{\vec{\mu}}(\vec{R}')\,d\vec{R}\,d\vec{R}'. \tag{1.14}$$

Além disso, se consideramos apenas orbitais tipo s, que podem acomodar no maximo dois elétrons, temos finalmente em segunda quantização

$$\hat{H}_1 = U\sum_{\vec{\lambda}}^{N} n_{\vec{\lambda}\uparrow}n_{\vec{\lambda}\downarrow}, \tag{1.15}$$

onde $n_{\vec{\lambda}\uparrow}$ é o operador número de elétrons no sítio $\vec{\lambda}$ com spin $\uparrow$ ($n_{\vec{\lambda}\uparrow}$=$C^{\dagger}_{\vec{\lambda}\uparrow}C_{\vec{\lambda}\downarrow}$).

Podemos considerar também a interação coulombiana entre elétrons de sítios primeiros vizinhos. Em segunda quantização, esta parte do hamiltoniano se escreve

$$\hat{H}'_1 = V \sum_{<\vec{\lambda}\vec{\mu}>} n_{\vec{\lambda}} n_{\vec{\mu}}, \tag{1.16}$$

onde V representa a magnitude da interação coulombiana e $<\vec{\lambda}\vec{\mu}>$ representa a soma entre primeiros vizinhos. Esta interação é independente da componente z dos spins nos sítios primeiros vizinhos, pois eles não estão obrigados a cumprir o princípio de exclusão de Pauli. Rotulando os sítios da rede por i e j em vez de $\vec{\lambda}$ e $\vec{\mu}$, o hamiltoniano total se escreve na forma:

$$\hat{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} C^{\dagger}_{i\sigma} C_{j\sigma} + U \sum_{i=1}^{N} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{<ij>} n_i n_j. \tag{1.17}$$

Quando o termo de hopping inclui apenas primeiros vizinhos, temos $t_{ij} = -t$; o hamiltoniano abaixo é conhecido como modelo de Hubbard estendido:

$$\hat{H} = -t \sum_{<ij>\sigma} C^{\dagger}_{i\sigma} C_{j\sigma} + U \sum_{i=1}^{N} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{<ij>} n_i n_j. \tag{1.18}$$

1.2 Observáveis e Simetrias

O parâmetro fundamental do Modelo de Hubbard é o numero total de elétrons que ocupam a rede [18]; este parâmetro é autovalor do operador

$$N_e = \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}). \tag{1.19}$$

Uma quantidade de importância é a densidade de elétrons na rede, $\rho = (\frac{N_e}{N})$. Como

$$[H, N_e] = 0, \tag{1.20}$$

N_e é uma quantidade conservada. Além de N_e temos a conservação do spin total e da componente z (simetria SU(2)):

$$[H, S^z] = [H, S^2] = 0. \tag{1.21}$$

Temos também

$$S^z = \frac{1}{2}\sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) = \sum_i S_i^z, \tag{1.22}$$

$$S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2, \tag{1.23}$$

$$S^x = \sum_i S_i^x \; ; \; S^y = \sum_i S_i^y, \tag{1.24}$$

$$S_i^x = \frac{1}{2}(S_i^+ + S_i^-) \; ; \; S_i^y = \frac{1}{2i}(S_i^+ - S_i^-), \tag{1.25}$$

$$S_i^+ = C_{i\uparrow}^\dagger C_{i\downarrow} \; ; \; S_i^- = C_{i\downarrow}^\dagger C_{i\uparrow}, \tag{1.26}$$

$$\begin{aligned} S_i^x &= \frac{1}{2}(C_{i\uparrow}^\dagger C_{i\downarrow} + C_{i\downarrow}^\dagger C_{i\uparrow}), \\ S_i^y &= \frac{1}{2i}(C_{i\uparrow}^\dagger C_{i\downarrow} - C_{i\downarrow}^\dagger C_{i\uparrow}), \end{aligned} \tag{1.27}$$

onde $S_i^+ (S_i^-)$ é o operador levantamento (abaixamento), que aumenta (diminui) S^z de uma unidade [10].

Então, para o Modelo de Hubbard, o conjunto de observáveis que comutam é { H, N_e, S^z, S^2 }, sendo possível diagonalizá-los mutuamente.

1.2.1 Simetria Partícula Buraco

A simetria partícula buraco é uma ferramenta que permite obter o espectro de energias do hamiltoniano no regime $\rho > 1$, conhecendo-se as energias no regime $\rho < 1$ [18]. Do ponto de vista de partículas, os estados do sistema são obtidos

a partir da ação do operador de criação $C^{\dagger}_{i\sigma}$ no estado $|0>$, interpretado como vácuo. Ao operar $C^{\dagger}_{i\sigma}$ em $|0>$, estamos criando uma partícula no sítio i com componente de spin σ. Na visão de buraco, o estado $|0>$ representa o máximo preenchimento, e o estado com $N_e = 2N$ representa o estado de vácuo $|\tilde{0}>$, sendo N o número de sítios da rede. Nessa ordem o sistema pode se representar como uma composição de N_e elétrons ou

$$2N - N_e = \tilde{N} \tag{1.28}$$

buracos.

A transformação que preserva S^z entre ambas as representações é

$$C_{i,-\sigma} \longrightarrow b^{\dagger}_{i\sigma}. \tag{1.29}$$

Vamos fazer a transformação partícula buraco para as redes bipartidas linear e AB2. Uma rede bipartida é aquela que pode ser separada em dois conjuntos disjuntos A e B de modo que: $t_{ij} \neq 0$ se i $\in$ A e j $\in$ B, ou i $\in$ B e j $\in$ A; t_{ij}= 0 se i e j pertencem ao mesmo subconjunto.

Nestas redes bipartidas vamos fazer a seguinte transformação particula buraco:

$$\begin{aligned} C_{i,-\sigma} &\longrightarrow b^{\dagger}_{i\sigma}\,, se\, i \in A, \\ C_{i,-\sigma} &\longrightarrow -b^{\dagger}_{i\sigma}\,, se\, i \in B. \end{aligned} \tag{1.30}$$

Sob esta operação, para uma cadeia linear, o hamiltoniano (1.18) transforma-

se em:

$$\begin{aligned}\hat{H}_b &= t\sum_{<ij>\sigma} b_{i\sigma}b^{\dagger}_{j\sigma} + U\sum_i b_{i\downarrow}b^{\dagger}_{i\downarrow}b_{i\uparrow}b^{\dagger}_{i\uparrow} \\ &+ V\sum_i (b_{i\downarrow}b^{\dagger}_{i\downarrow} + b_{i\uparrow}b^{\dagger}_{i\uparrow})(b_{i+1\downarrow}b^{\dagger}_{i+1\downarrow} + b_{i+1\uparrow}b^{\dagger}_{i+1\uparrow}). \qquad (1.31)\end{aligned}$$

Usando as relações de anticomutação (1.10), temos [15]:

$$\begin{aligned}\hat{H}_b &= -t\sum_{<ij>\sigma} b^{\dagger}_{j\sigma}b_{i\sigma} + U\sum_i (1-\tilde{n}_{i\downarrow})(1-\tilde{n}_{i\uparrow}) \\ &+ V\sum_i (2-\tilde{n}_{i\downarrow}-\tilde{n}_{i\uparrow})(2-\tilde{n}_{i+1\downarrow}-\tilde{n}_{i+1\uparrow}), \\ \hat{H}_b &= -t\sum_{<ij>\sigma} b^{\dagger}_{j\sigma}b_{i\sigma} + U\sum_i \tilde{n}_{i\uparrow}\tilde{n}_{i\downarrow} + V\sum_i \tilde{n}_i\tilde{n}_{i+1} + U(N-\tilde{N}) \\ &+ 4V(N-\tilde{N}), \qquad (1.32)\end{aligned}$$

onde $\tilde{n}_i$ é o operador número total de buracos no sitio i.

Para a cadeia bipartida AB2 o hamiltoniano (1.18) transforma-se em

$$\begin{aligned}\hat{H}_b &= -t\sum_{<ij>\sigma} b^{\dagger}_{j\sigma}b_{i\sigma} + U\sum_i \tilde{n}_{i\uparrow}\tilde{n}_{i\downarrow} + V\{\sum_\ell \tilde{n}_{A\ell}(\tilde{n}_{B1\ell}+\tilde{n}_{B2\ell}) + \tilde{n}_{A\ell}(\tilde{n}_{B1\ell-1}+\tilde{n}_{B2\ell-1})\} + \\ &U(N-\tilde{N}) + V(16N_c - 4\tilde{N} - 4\tilde{n}_A), \qquad (1.33)\end{aligned}$$

onde ℓ *é* o indice da célula unitária da cadeia e $\tilde{n}_A$ o operador número total de buracos nos sítios A. Vemos que o termo que inclui U fica da mesma forma ao da rede linear, pois é uma interação local. Como os buracos A não são uma constante de movimento, então podemos ver que esta cadeia não apresenta a dita simetria.

Sejam $|-t, U, V, N_e>$, os autoestados do hamiltoniano (1.18), isto é,

$$\hat{H}|-t, U, V, N_e> \;=\; E_{N_e}(-t, U, V)|-t, U, V, N_e> . \qquad (1.34)$$

Projetando (1.32) em $|-t, U, V, N_e>$, teremos:

$$\hat{H}_b|-t, U, V, N_e> \; = E_{\tilde{N}}(-t, U, V) + U(N_e - N) + 4V(N_e - N). \quad (1.35)$$

Como a física do sistema pode ser descrita através de partículas ou buracos, obtemos para a cadeia linear

$$E_{N_e}(-t, U, V) = E_{\tilde{N}}(-t, U, V) + U(N_e - N) + 4V(N_e - N), \quad (1.36)$$

Capítulo 2

Teoria de grupos

2.1 Introdução

Um grupo matemático é um conjunto de elementos que satisfazem as seguintes propriedades [7]:

I) O produto de elementos do grupo pertence ao grupo: se R_1, $R_2 \in$ G então $R_1.R_2$=$R_3 \in$ G .

II) No grupo existe o elemento identidade: E.R=R.E=R

III) A multiplicação é associativa: $R_1(R_2R_3)$=$(R_1R_2)R_3$.

IV) Cada elemento tem um inverso ou recíproco: R^{-1} é o inverso de R logo deve satisfazer R.R^{-1}=R^{-1}R=E.

Neste trabalho estamos interessados no grupo de simetrias do hamiltoniano de Hubbard para aglomerado atômicos:

i) O grupo de simetrias do hamiltoniano é um conjunto de transformações que levam o hamiltoniano nele mesmo.

ii) O número de elementos do grupo de simetria é denominado ordem do grupo e vai ser representado pela letra h.

Os grupos de simetria do hamiltoniano de Hubbard para o dímero, o trímero e o triângulo incluem as seguintes operações de simetria: a identi-

dade, que denotaremos por E; reflexões, que denotaremos por σ e rotações de um ângulo $\frac{2\pi}{N}$ denotadas por C_N.

2.2 Representações

A forma mais comum de representar as diversas operações de simetria pertencentes a um grupo é a forma matricial. Estas matrizes devem ter a mesma tabela de multiplicação do grupo; a ordem das matrizes é igual à dimensão da representação.

Denotaremos a matriz associada à operação R na i-ésima representação irredutível por D^i(R) e D^i_{mn}(R) o elemento de matriz m-n na i-ésima representação irredutível de dimensão ℓ_i. O produto de duas operações de simetria é o produto matricial das matrizes associadas:

$$R_3 = R_1.R_2 \Rightarrow D(R_3) = D(R_1)D(R_2) \Rightarrow D_{ij}(R_3) = \sum_k D_{ik}(R_1)D_{kj}(R_2). \tag{2.1}$$

É importante ressaltar que existe uma representação comum a todos os grupos de simetria na qual todas as operações são representadas pelo número 1, como veremos na diagonalização de nossos aglomerados. Esta representação é chamada unidade. Uma definição importante é a de caractere de uma operação; definido como o traço da matriz $D^i(R)$:

$$\chi_i(R) = Tr(D^i(R)) = \sum_k D^i_{kk}(R). \tag{2.2}$$

Dentro do grupo de simetria do hamiltoniano existem operações que podem se relacionar mediante uma transformação de tipo unitário $U^{-1}R_1$U=R_2, onde U é uma matriz unitária ($U^\dagger$=U^{-1}). Estes tipos de operações de simetria pertencem a uma mesma classe; dentro do grupo de simetrias do hamiltoniano encontramos diferentes tipos de classes. É importante ressaltar que o traço é

invariante sob uma transformação unitária, isso faz com que todas as operações de uma mesma classe tenham o mesmo traço dentro da i-ésima representação irredutível.

Nosso objetivo é tornar a representação matricial do hamiltoniano de Hubbard numa forma bloco diagonal, na qual podemos diagonalizar separadamente em cada um dos sub-espaços.

2.2.1 Teorema da Grande Ortogonalidade

O teorema da Grande Ortogonalidade é expressado na seguinte forma:

$$\sum_{R\in G}(D^i_{mn}(R))^*(D^j_{m'n'}) = \frac{h}{\sqrt{\ell_i\ell_j}}\delta_{ij}\delta_{mm'}\delta_{nn'}. \tag{2.3}$$

Se i é igual a j temos:

$$\sum_{R\in G}(D^i_{mn}(R))^*(D^i_{m'n'}) = \frac{h}{\ell_i}\delta_{mm'}\delta_{nn'}. \tag{2.4}$$

Uma consequência do teorema da grande ortogonalidade é

$$\sum_i \ell_i^2 = h, \tag{2.5}$$

que é de grande utilidade no teste de nossas escolhas. Uma outra consequência importante do teorema da grande ortogonalidade é que o número de representações irredutíves de um grupo é igual ao número de classes.

Podemos tambén encontrar uma relação de grande ortogonalidade para os caracteres:

$$\begin{aligned}(\chi^i(R))^*\chi^j(R) &= \sum_k(D^i_{kk}(R))^*\sum_s(D^j_{ss}(R)),\\ (\chi^i(R))^*\chi^j(R) &= \sum_{ks}(D^i_{kk}(R)^*(D^j_{ss}(R)),\end{aligned} \tag{2.6}$$

onde para poder fazer uso do teorema (2.3) vamos somar sob todas as operações do grupo, isto é,

$$\begin{aligned}
\sum_{R\in G}(\chi^i(R))^*(\chi^j(R)) &= \sum_{ks}\sum_{R\in G}(D^i_{kk}(R))^*(D^j_{ss}(R)),\\
\sum_{R\in G}(\chi^i(R))^*(\chi^j(R)) &= \sum_{ks}\frac{h}{\ell_i}\delta_{ij}\delta_{ks},
\end{aligned} \tag{2.7}$$

pois na i-ésima representação k e s coincidem ℓ_i vezes.

Se $\chi(R)$ é o traço da operação R numa representação redutível e $\chi^i(R)$ é o traço na i-ésima representação irredutível, temos:

$$\begin{aligned}
\chi(R) &= \sum_i a_i\chi^i(R),\\
\sum_{R\in G}(\chi^j(R))^*\chi(R) &= \sum_i a_i\sum_{R\in G}(\chi^j(R))^*\chi^i(R),\\
\sum_{R\in G}(\chi^j(R))^*\chi(R) &= \sum_i a_i h\delta ij,\\
a_j &= \frac{1}{h}\sum_{R\in G}(\chi^j(R))^*\chi(R).
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Sabemos que numa representação redutível do grupo, a representação irredutível i pode aparecer a_i - vezes. Vamos denotar os estados das representações irredutíves por $|\Psi^i_s>$ onde i representa a i-ésima representação irredutível e s o estado dentro dessa representação. Os $|\Psi^i_s>$ são um conjunto ortonormal de dimensão ℓ_i. Agora, seja R uma operação do grupo

$$\Rightarrow R|\Phi^i_t>=\sum_s D^i_{st}(R)|\Phi^i_s> . \tag{2.9}$$

Multiplicando por $D^j_{s't'}(R)$ e somando em todas as operações do grupo temos:

$$\begin{aligned}
\sum_{R\in G}(D^j_{s't'}(R))^* R|\Phi^i_t> &= \sum_s \sum_{R\in G}(D^j_{s't'}(R))^*(D^i_{st}(R))|\Phi^i_s>, \\
\sum_{R\in G}(D^j_{s't'}(R))^* R|\Phi^i_t> &= \sum_s \frac{h}{\ell_i}\delta_{s's}\delta_{t't}\delta_{ij}|\Phi^i_s>, \\
\sum_{R\in G}(D^j_{s't'}(R))^* R|\Phi^i_t> &= \frac{h}{\ell_i}\delta_{t't}\delta_{ij}|\Phi^i_{s'}>, \qquad (2.10)
\end{aligned}$$

Então,

$$\frac{\ell_j}{h}\sum_{R\in G}(D^j_{s't'}(R))^* R \qquad (2.11)$$

é um operador que projeta estados na j-ésima representação irredutível. Em nosso trabalho vamos usar o operador (2.11) para gerar a base da j-ésima representação irredutível. Nesta base o hamiltoniano adquire a forma bloco diagonal, ou seja, H terá elementos de matriz não nulos somente entre estados da mesma representação irredutível [18].

Capítulo 3

Diagonalização do modelo de Hubbard estendido em aglomerados atômicos simples

3.1 Dímero

Figura 3.1: dímero

Usando técnicas de teoria de grupos, vamos diagonalizar o hamiltoniano do dímero, (veja Figura 3.1), para diferentes densidades eletrônicas. A idéia é estender os resultados obtidos por Macêdo [11], incluindo no hamiltoniano a interação coulombiana entre elétrons de sítios primeiros vizinhos. O dímero é um aglomerado de dois átomos representado pelo seguinte hamiltoniano:

$$\hat{H} = -t \sum_{\sigma} (a_{\sigma}^{\dagger} b_{\sigma} + b_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma}) + U(n_{\uparrow}^{a} n_{\downarrow}^{a} + n_{\uparrow}^{b} n_{\downarrow}^{b}) + V(n^{a} n^{b}). \tag{3.1}$$

Para o dímero temos definidas duas operações de simetria:

$$E\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} ; \sigma_k \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} . \tag{3.2}$$

A tabela de multiplicação do grupo é:

	E	σ_k
E	E	σ_k
σ_k	σ_k	E

Para este grupo, h=2 e o número de classes é 2, então o número de representações irredutíves é dois. Usando (2.5) sabemos que as duas representações A_1 e A_2 são unidimensionais:

	1	1
1	1	1
1	1	1

	1	-1
1	1	-1
-1	-1	1

Note que as duas representações irredutíves têm a mesma tabela de multiplicação que a do grupo; no caso das representações unidimensionais $\chi^i(R)$ coincide com a própria representação. A representação irredutível A_1 é chamada de representação unidade. Para diferentes densidades, vamos agora diagonalizar o hamiltoniano do dímero usando as técnicas do capítulo 2, verificaremos que o tamanho das matrizes a diagonalizar diminui consideravelmente quando o hamiltoniano é levado à forma bloco diagonal:

1) $\mathrm{N}_e = 0\,,\ S^z = 0\,, E = 0.$

2) $\mathrm{N}_e = 1\,,\ S^z = \dfrac{\sigma}{2}.$

A base para o hamiltoniano (3.1) é

$$|1>= a_\sigma^\dagger|0>; |2>= b_\sigma^\dagger|0> . \tag{3.3}$$

Nesta base temos:

$$\sigma_k|1>= |2>; \sigma_k|2>= |1> . \tag{3.4}$$

A tabela de caracteres da representação redutível Γ_1 é

E	σ_k
2	0

Os coeficientes que determinam a dimensão dos sub-espaços A_1 e A_2 (2.8) são

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2}(\chi^{A_1}(E)\chi(E) + \chi^{A_1}(\sigma_k)\chi(\sigma_k)), \\ a_1 &= 1, \\ a_2 &= \frac{1}{2}(\chi^{A_2}(E)\chi(E) + \chi^{A_2}(\sigma_k)\chi(\sigma_k)), \\ a_2 &= 1. \end{aligned} \tag{3.5}$$

Fazendo a soma direta:

$$\Gamma = 1A_1 \oplus 1A_2. \tag{3.6}$$

Os operadores que vão projetar os estados em cada um dos sub-espaços são P^{A_1} e P^{A_2} respectivamente:

$$\begin{aligned} P^{A_1} &= \frac{1}{2}(\chi^{A_1}(E)E + \chi^{A_1}(\sigma_k)\sigma_k) \propto (E + \sigma_k), \\ P^{A_2} &= \frac{1}{2}(\chi^{A_2}(E)E + \chi^{A_2}(\sigma_k)\sigma_k) \propto (E - \sigma_k). \end{aligned} \tag{3.7}$$

No sub-espaço de A_1 temos:

$$|\Psi_1 >= P^{A_1}|1 >= |1 > +|2 > . \tag{3.8}$$

No sub-espaço de A_2:

$$|\Psi_2 >= P^{A_2}|1 >= |1 > -|2 > . \tag{3.9}$$

Operando o hamiltoniano em cada uma das bases dos sub-espaços:

$$\hat{H}|\Psi_1>=-t|\Psi_1>,$$
$$\hat{H}|\Psi_2>=t|\Psi_2>, \tag{3.10}$$

obtemos as autoenergias:

$$E_1=-t,$$
$$E_2=t. \tag{3.11}$$

.

3) $N_e = 2$, $S^z = \sigma$.

Quando V = 0, E = t - t = 0. Para V diferente de 0, temos E=V.

4) $N_e = 2$, $S^z = 0$.

A base para o hamiltoniano (3.1) é

$$|1>=a^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>;|2>=b^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>;|3>=a^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>;|4>=b^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>. \tag{3.12}$$

Nesta base, temos:

$$\sigma_k|1>=|4>;\sigma_k|2>=|3>;\sigma_k|3>=|2>;\sigma_k|4>=|1>. \tag{3.13}$$

A tabela de caracteres da representação redutível Γ_1 é

E	σ_k
4	0

Os coeficientes de expansão da representação redutível Γ_1 são

$$a_1 = \frac{1}{2}(1.4)=2,$$
$$a_2 = \frac{1}{2}(1.4)=2. \tag{3.14}$$

Fazendo a soma direta

$$\Gamma_1 = 2A_1 \oplus 2A_2. \tag{3.15}$$

Os operadores de projeção são

$$\begin{aligned} P^{A_1} &\propto (E + \sigma_k), \\ P^{A_2} &\propto (E - \sigma_k). \end{aligned} \tag{3.16}$$

No sub-espaço de A_1, temos,

$$|\Psi_1 >= P^{A_1}|1 >= |1 > +|4 >; \quad |\Psi_2 >= P^{A_1}|2 >= |2 > +|3 > . \tag{3.17}$$

No sub-espaço de A_2:

$$|\Psi_3 >= P^{A_2}|1 >= |1 > -|4 >; \quad |\Psi_4 >= P^{A_2}|2 >= |2 > -|3 > . \tag{3.18}$$

Operando o hamiltoniano em cada uma das bases dos sub-espaços:

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Psi_1 > &= -2t|\Psi_2 > +U|\Psi_1 >, \\ \hat{H}|\Psi_2 > &= -2t|\Psi_1 > +V|\Psi_2 >, \\ \hat{H}|\Psi_3 > &= U|\Psi_3 >, \\ \hat{H}|\Psi_4 > &= V|\Psi_4 > . \end{aligned} \tag{3.19}$$

Diagonalizando no sub-espaço de A_1, temos as seguintes autoenergias:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{V+U}{2} + \frac{\sqrt{V^2+U^2-2UV+16t^2}}{2}, \\ E_2 &= \frac{V+U}{2} - \frac{\sqrt{V^2+U^2-2UV+16t^2}}{2}. \end{aligned} \tag{3.20}$$

E no sub-espaço A_2:

$$\begin{aligned} E_3 &= U, \\ E_4 &= V. \end{aligned} \tag{3.21}$$

3.2 Trímero

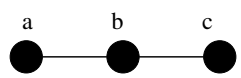

Figura 3.2: trímero

O trímero é um aglomerado de três átomos, (veja Figura 3.2), representado pelo seguinte hamiltoniano:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma}(a_{\sigma}^{\dagger}b_{\sigma} + b_{\sigma}^{\dagger}a_{\sigma} + b_{\sigma}^{\dagger}c_{\sigma} + c_{\sigma}^{\dagger}b_{\sigma}) + U(n_{\uparrow}^{a}n_{\downarrow}^{a} + n_{\uparrow}^{b}n_{\downarrow}^{b} + n_{\uparrow}^{c}n_{\downarrow}^{c}) + V(n^{a}n^{b} + n^{b}n^{c}). \tag{3.22}$$

As operações de simetria são

$$E\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}; \sigma_k \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ b \\ a \end{pmatrix}. \tag{3.23}$$

O grupo de simetria é igual ao do dímero, logo a tabela de multiplicação do grupo e as representações irredutíves são iguais.

Novamente vamos a diagonalizar o hamiltoniano de Hubbard usando as técnicas do capítulo 2. No trímero poderemos reduzir matrizes quadradas de

até dimensão 9:

1) $\mathrm{N}_e = 0\,,\ S^z = 0\,, E = 0.$

2) $\mathrm{N}_e = 1\,,\ S^z = \dfrac{\sigma}{2}.$

A base para o hamiltoniano (3.22) é

$$|1>= a_\sigma^\dagger|0>; |2>= b_\sigma^\dagger|0>; |3>= c_\sigma^\dagger|0> . \tag{3.24}$$

Nesta base, temos,

$$\sigma_k|1>= |3>; \sigma_k|2>= |2>; \sigma_k|3>= |1> . \tag{3.25}$$

A tabela de caracteres da representação redutível Γ_1 é

E	σ_k
3	1

Os coeficientes de expansão da representação redutível Γ_1 são

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2}(1.3 + 1.1) = 2, \\ a_2 &= \frac{1}{2}(1.3 - 1.1) = 1. \end{aligned} \tag{3.26}$$

Fazendo a soma direta, temos,

$$\Gamma_1 = 2A_1 \oplus 1A_2, \tag{3.27}$$

e os operadores de projeção são

$$\begin{aligned} P^{A_1} &\propto (E + \sigma_k), \\ P^{A_2} &\propto (E - \sigma_k). \end{aligned} \tag{3.28}$$

No sub-espaço de A_1,

$$|\Psi_1>= P^{A_1}|1>= |1>+|3>; |\Psi_2>= P^{A_1}|2>= 2|2> . \tag{3.29}$$

No sub-espaço de A_2:

$$|\Psi_3>= P^{A_2}|1>= |1>-|3> . \tag{3.30}$$

Operando o hamiltoniano em cada uma das bases dos sub-espaços:

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Psi_1> &= -2t|\Psi_2>, \\ \hat{H}|\Psi_2> &= -t|\Psi_1>, \\ \hat{H}|\Psi_3> &= 0. \end{aligned} \tag{3.31}$$

Diagonalizando no sub-espaço de A_1, temos as seguintes autoenergias:

$$\begin{aligned} E_1 &= \sqrt{2}t, \\ E_2 &= -\sqrt{2}t. \end{aligned} \tag{3.32}$$

No sub-espaço de A_2, temos,

$$E_3 = 0. \tag{3.33}$$

3) $\mathrm{N}_e = 2$, $S^z = \sigma$.

A base para o hamiltoniano (3.22) é

$$|1>= a^\dagger_\sigma b^\dagger_\sigma|0>; |2>= a^\dagger_\sigma c^\dagger_\sigma|0>; |3>= b^\dagger_\sigma c^\dagger_\sigma|0> . \tag{3.34}$$

Nesta base, temos,

$$\sigma_k|1>= -|3>; \sigma_k|2>= -|2>; \sigma_k|3>= -|1> . \tag{3.35}$$

A tabela de caracteres da representação redutível Γ_1 é:

E	σ_k
3	-1

e os coeficientes de expansão da representação redutível Γ_1 são

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2}(1.3 - 1.1) = 1, \\ a_2 &= \frac{1}{2}(1.3 + 1.1) = 2. \end{aligned} \tag{3.36}$$

Fazendo a soma direta,

$$\Gamma_1 = 1A_1 \oplus 2A_2. \tag{3.37}$$

e os operadores de projeção são

$$\begin{aligned} P^{A_1} &\propto (E + \sigma_k), \\ P^{A_2} &\propto (E - \sigma_k). \end{aligned} \tag{3.38}$$

No sub-espaço de A_1,

$$|\Psi_1 >= P^{A_1}|1 >= |1 > -|3 > . \tag{3.39}$$

No sub-espaço de A_2:

$$\begin{aligned} |\Psi_2 > &= P^{A_2}|2 >= |2 > +|2 > \propto |2 >, \\ |\Psi_3 > &= P^{A_2}|1 >= |1 > +|3 > . \end{aligned} \tag{3.40}$$

Operando o hamiltoniano em cada uma das bases dos sub-espaços, obtemos:

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Psi_1 > &= V|\Psi_1 >, \\ \hat{H}|\Psi_2 > &= -t|\Psi_3 >, \\ \hat{H}|\Psi_3 > &= -2t|\Psi_2 > +V|\Psi_3 > . \end{aligned} \tag{3.41}$$

No sub-espaço A_1 temos a autoenergia:

$$E_1 = V. \tag{3.42}$$

Diagonalizando no sub-espaço A_2 temos as seguintes autoenergias:

$$\begin{aligned} E_2 &= \frac{V + \sqrt{V^2 + 8t^2}}{2}, \\ E_3 &= \frac{V - \sqrt{V^2 + 8t^2}}{2}. \end{aligned} \tag{3.43}$$

4) $\mathrm{N}_e = 2$, $S^z = 0$.

A base para o hamiltoniano (3.22) é

$$\begin{aligned} &|1>= a^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>; \quad |2>= b^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>; \quad |3>= c^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>, \\ &|4>= a^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>; \quad |5>= b^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>; \quad |6>= c^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>, \\ &|7>= a^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0>; \quad |8>= b^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0>; \quad |9>= c^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0> . \end{aligned} \tag{3.44}$$

Nesta base, temos

$$\begin{aligned} &\sigma_k|1>= |9>; \quad \sigma_k|2>= |8>; \quad \sigma_k|3>= |7>, \\ &\sigma_k|4>= |6>; \quad \sigma_k|5>= |5>; \quad \sigma_k|6>= |4>, \\ &\sigma_k|7>= |3>; \quad \sigma_k|8>= |2>; \quad \sigma_k|9>= |1> . \end{aligned} \tag{3.45}$$

A tabela de caracteres da representação redutível Γ_1 é

E	σ_k
9	1

e os coeficientes de expansão da representação redutível Γ_1 são

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2}(1.9 + 1.1) = 5, \\ a_2 &= \frac{1}{2}(1.9 - 1.1) = 4. \end{aligned} \tag{3.46}$$

Fazendo a soma direta,

$$\Gamma = 5A_1 \oplus 4A_2, \tag{3.47}$$

e os operadores de projeção são

$$\begin{aligned} P^{A_1} &\propto (E + \sigma_k), \\ P^{A_2} &\propto (E - \sigma_k). \end{aligned} \tag{3.48}$$

No sub-espaço de A_1,

$$\begin{aligned} |\Psi_5> &= P^{A_1}|1>=|1>+|9>, \\ |\Psi_6> &= P^{A_1}|2>=|2>+|8>, \\ |\Psi_7> &= P^{A_1}|3>=|3>+|7>, \\ |\Psi_8> &= P^{A_1}|4>=|4>+|6>, \\ |\Psi_9> &= P^{A_1}|5>=|5>. \end{aligned} \tag{3.49}$$

No sub-espaço de A_2:

$$\begin{aligned} |\Psi_1> &= P^{A_2}|1>=|1>-|9>, \\ |\Psi_2> &= P^{A_2}|2>=|2>-|8>, \\ |\Psi_3> &= P^{A_2}|3>=|3>-|7>, \\ |\Psi_4> &= P^{A_2}|4>=|4>-|6>. \end{aligned} \tag{3.50}$$

Operando o hamiltoniano em cada uma das bases dos sub-espaços, obtemos:

$$
\begin{aligned}
\hat{H}|\Psi_1> &= -t|\Psi_2> -t|\Psi_4> +U|\Psi_1>, \\
\hat{H}|\Psi_2> &= -t|\Psi_3> -t|\Psi_1> +V|\Psi_2>, \\
\hat{H}|\Psi_3> &= -t|\Psi_2> +t|\Psi_4>, \\
\hat{H}|\Psi_4> &= -t|\Psi_1> +t|\Psi_3> +V|\Psi_4>, \\
\hat{H}|\Psi_5> &= -t|\Psi_6> -t|\Psi_8> +U|\Psi_5>, \\
\hat{H}|\Psi_6> &= -2t|\Psi_9> -t|\Psi_5> -t|\Psi_7> +V|\Psi_6>, \\
\hat{H}|\Psi_7> &= -t|\Psi_6> -t|\Psi_8>, \\
\hat{H}|\Psi_8> &= -2t|\Psi_9> -t|\Psi_5> -t|\Psi_7> +V|\Psi_8>, \\
\hat{H}|\Psi_9> &= -t|\Psi_6> -t|\Psi_8> +U|\Psi_9> . \qquad (3.51)
\end{aligned}
$$

Introduzindo as definições (no sub-espaço A_2):

$$
\begin{aligned}
|\varphi_1> &= |\Psi_2> -|\Psi_4>, \\
|\varphi_2> &= |\Psi_1>, \\
|\varphi_3> &= |\Psi_3>, \\
|\varphi_4> &= |\Psi_2> +|\Psi_4> \qquad (3.52)
\end{aligned}
$$

Obtemos:

$$
\begin{aligned}
\hat{H}|\varphi_1> &= -2t|\varphi_3> +V|\varphi_1>, \\
\hat{H}|\varphi_3> &= -t|\varphi_1>, \\
\hat{H}|\varphi_2> &= -t|\varphi_4> +U|\varphi_2>, \\
\hat{H}|\varphi_4> &= -2t|\varphi_2> +V|\varphi_4> . \qquad (3.53)
\end{aligned}
$$

Diagonalizando no sub-espaço A_2 temos as seguintes autoenergias:

$$\begin{aligned}
E_1 &= \frac{V+\sqrt{V^2+8t^2}}{2}, \\
E_2 &= \frac{V-\sqrt{V^2+8t^2}}{2}, \\
E_3 &= \frac{(V+U)+\sqrt{V^2+U^2+8t^2-2UV}}{2}, \\
E_4 &= \frac{(V+U)-\sqrt{V^2+U^2+8t^2-2UV}}{2}.
\end{aligned} \tag{3.54}$$

Introduzindo as definições(no sub-espaço A_1):

$$\begin{aligned}
|\varphi_1> &= |\Psi_6> -|\Psi_8>, \\
|\varphi_2> &= |\Psi_5> -|\Psi_9>, \\
|\varphi_3> &= |\Psi_6> +|\Psi_8>, \\
|\varphi_4> &= |\Psi_5> +2|\Psi_9>, \\
|\varphi_5> &= |\Psi_7>;
\end{aligned} \tag{3.55}$$

Obtemos:

$$\begin{aligned}
\hat{H}|\varphi_1> &= V|\varphi_1>, \\
\hat{H}|\varphi_2> &= U|\varphi_2>, \\
\hat{H}|\varphi_3> &= -2t|\varphi_4> -2t|\varphi_5> +V|\varphi_3>, \\
\hat{H}|\varphi_4> &= -3t|\varphi_3> +U|\varphi_4>, \\
\hat{H}|\varphi_5> &= -t|\varphi_3> .
\end{aligned} \tag{3.56}$$

Diagonalizando no sub-espaço A_1 temos as seguintes autoenergias:

$$\begin{aligned}
E_5 &= V, \\
E_6 &= U, \\
E_7 &= 2\sqrt{-Q}\cos(\frac{\theta}{3}) + \frac{U+V}{3}, \\
E_8 &= 2\sqrt{-Q}\cos(\frac{\theta+2\pi}{3}) + \frac{U+V}{3}, \\
E_9 &= 2\sqrt{-Q}\cos(\frac{\theta+4\pi}{3}) + \frac{U+V}{3},
\end{aligned} \tag{3.57}$$

onde, E_7, E_8, e E_9 são as soluções da equação de autovalores:

$$E^3 + a_2E^2 + a_1E + a_0 = 0, \tag{3.58}$$

com

$$\begin{aligned}
a_2 &= -(U+V), \\
a_1 &= -(8t^2 - UV), \\
a_0 &= 2t^2U,
\end{aligned} \tag{3.59}$$

e as relações:

$$\begin{aligned}
Q &= -\frac{3(8t^2 - UV) + (U+V)^2}{9}, \\
R &= \frac{9(U+V)(8t^2 - UV) - 54Ut^2 + 2(U+V)^3}{54}, \\
\theta &= \cos^{-1}(\frac{R}{\sqrt{-Q^3}}).
\end{aligned} \tag{3.60}$$

5) $\mathrm{N}_e = 3$, $S^z = \dfrac{3\sigma}{2}$, $E = 2V$.

6) $\mathrm{N}_e = 3$, $S^z = \dfrac{\sigma}{2}$.

A base para o hamiltoniano (3.22) é

$$
\begin{aligned}
&|1>= a^\dagger_\uparrow b^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>; \quad |2>= a^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>; \quad |3>= b^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>;\\
&|4>= a^\dagger_\uparrow b^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>; \quad |5>= a^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>; \quad |6>= b^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>;\\
&|7>= a^\dagger_\uparrow b^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0>; \quad |8>= a^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0>; \quad |9>= b^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0> . \qquad (3.61)
\end{aligned}
$$

Nesta base, temos:

$$
\begin{aligned}
&\sigma_k|1>= -|9>; \quad \sigma_k|2>= -|8>; \quad \sigma_k|3>= -|7>;\\
&\sigma_k|4>= -|6>; \quad \sigma_k|5>= -|5>; \quad \sigma_k|6>= -|4>;\\
&\sigma_k|7>= -|3>; \quad \sigma_k|8>= -|2>; \quad \sigma_k|9>= -|1> . \qquad (3.62)
\end{aligned}
$$

A tabela de caracteres da representação redutível Γ_1 é

E	σ_k
9	-1

e os coeficientes de expansão da representação redutível Γ_1 são

$$
\begin{aligned}
a_1 &= \frac{1}{2}(1.9 - 1.1) = 4,\\
a_2 &= \frac{1}{2}(1.9 + 1.1) = 5. \qquad (3.63)
\end{aligned}
$$

Fazendo a soma direta,

$$\Gamma = 4A_1 \oplus 5A_2. \qquad (3.64)$$

e os operadores de projeção são

$$
\begin{aligned}
P^{A_1} &\propto (E + \sigma_k),\\
P^{A_2} &\propto (E - \sigma_k). \qquad (3.65)
\end{aligned}
$$

No sub-espaço de A_1, temos,

$$
\begin{aligned}
|\Psi_1> &= P^{A_1}|1>=|1>-|9>, \\
|\Psi_2> &= P^{A_1}|2>=|2>-|8>, \\
|\Psi_3> &= P^{A_1}|3>=|3>-|7>, \\
|\Psi_4> &= P^{A_1}|4>=|4>-|6>. \qquad (3.66)
\end{aligned}
$$

No sub-espaço de A_2:

$$
\begin{aligned}
|\Psi_5> &= P^{A_2}|1>=|1>+|9>, \\
|\Psi_6> &= P^{A_2}|2>=|2>+|8>, \\
|\Psi_7> &= P^{A_2}|3>=|3>+|7>, \\
|\Psi_8> &= P^{A_2}|4>=|4>+|6>, \\
|\Psi_9> &= P^{A_2}|5>=|5>. \qquad (3.67)
\end{aligned}
$$

Operando o hamiltoniano em cada uma das bases dos sub-espaços:

$$
\begin{aligned}
\hat{H}|\Psi_1> &= -t|\Psi_2>-t|\Psi_4>+(U+2V)|\Psi_1>, \\
\hat{H}|\Psi_2> &= -t|\Psi_3>-t|\Psi_1>+U|\Psi_2>, \\
\hat{H}|\Psi_3> &= -t|\Psi_2>+t|\Psi_4>+2V|\Psi_3>, \\
\hat{H}|\Psi_4> &= -t|\Psi_1>+t|\Psi_3>+(U+2V)|\Psi_4>, \\
\hat{H}|\Psi_5> &= -t|\Psi_6>-t|\Psi_8>+(U+2V)|\Psi_5>, \\
\hat{H}|\Psi_6> &= -2t|\Psi_9>-t|\Psi_5>-t|\Psi_7>+U|\Psi_6>, \\
\hat{H}|\Psi_7> &= -t|\Psi_6>-t|\Psi_8>+2V|\Psi_7>, \\
\hat{H}|\Psi_8> &= -2t|\Psi_9>-t|\Psi_5>-t|\Psi_7>+(U+2V)|\Psi_8>, \\
\hat{H}|\Psi_9> &= -t|\Psi_6>-t|\Psi_8>+2V|\Psi_9>. \qquad (3.68)
\end{aligned}
$$

No sub-espaço de A_1, as autoenergias são as raízes da equação de autovalores:

$$E^4 + a_3E^3 + a_2E^2 + a_1E + a_0 = 0, \tag{3.69}$$

com os seguintes coeficientes:

$$\begin{aligned}
a_3 &= (-6V - 3U), \\
a_2 &= (-4t^2 + 12V^2 + 14UV + 3U^2), \\
a_1 &= (12t^2V + 6t^2U - 20UV^2 - 8V^3 - 10VU^2 - U^3), \\
a_0 &= -8t^2V^2 - 10t^2UV - 2t^2U^2 + 4t^4 + 8UV^3 + 8U^2V^2 + 2VU^3 \quad (3.70)
\end{aligned}$$

No sub-espaço de A_2, as autoenergias são as raízes da equação de autovalores:

$$E^5 + a_4E^4 + a_3E^3 + a_2E^2 + a_1E + a_0 = 0, \tag{3.71}$$

com os seguintes coeficientes:

$$\begin{aligned}
a_4 &= -(8V + 3U), \\
a_3 &= -(8t^2 - 24V^2 - 20UV - 3U^2), \\
a_2 &= -(-14t^2U - 40t^2V + 32V^3 + 48UV^2 + 16VU^2 + U^3), \\
a_1 &= -(6t^2U^2 + 64t^2V^2 + 50t^2UV - 48UV^3 - 16V^4 - 28V^2U^2 - 4VU^3), \\
a_0 &= 12Vt^2U^2 + 44t^2UV^2 + 32t^2V^3 - 16UV^4 - 16V^3U^2 - 4V^2U^3. \quad (3.72)
\end{aligned}$$

3.3 Triângulo

O triângulo é um aglomerado de três átomos, (veja Figura 3.3), com condição periódica de contorno, correspondente ao trímero. Este aglomerado é representado pelo seguinte hamiltoniano:

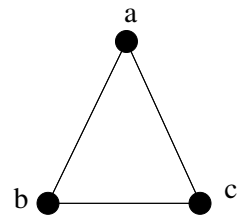

Figura 3.3: triângulo

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\sigma}(a_\sigma^\dagger b_\sigma + a_\sigma^\dagger c_\sigma + b_\sigma^\dagger a_\sigma + b_\sigma^\dagger c_\sigma + c_\sigma^\dagger a_\sigma + c_\sigma^\dagger b_\sigma) \\ &+ U(n_\uparrow^a n_\downarrow^a + n_\uparrow^b n_\downarrow^b + n_\uparrow^c n_\downarrow^c) + V(n^a n^b + n^a n^c + n^c n^b). \end{aligned} \tag{3.73}$$

As operações de simetria são

$$\mathrm{E}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} ;\ \sigma_1 \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ c \\ b \end{pmatrix} ; \sigma_2 \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ b \\ a \end{pmatrix} ; \sigma_3 \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ a \\ c \end{pmatrix} ;$$

$$C_3^2 \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ a \\ b \end{pmatrix} ; C_3 \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ c \\ a \end{pmatrix} . \tag{3.74}$$

Para este grupo de simetrias, temos definidas 3 classes (E, 3σ, 2C), logo temos 3 representações irredutíves. Usando (2.5) sabemos que: ℓ_1=ℓ_2=1, ℓ_3=2. Temos então duas representações unidimensionais e uma bidimensional.

Sabemos que χ_i(R) é igual para todo R que pertence a uma mesma classe, então vamos escrever a tabela de caracteres das classes do triângulo:

	E	3σ	$2C_3$
A_1	1	1	1
A_2	1	-1	1
E_1	2	0	-1

onde A_1 e A_2 são as representações irredutíves unidimensionais e E_1 é a representação bidimensional.

Novamente vamos diagonalizar o hamiltoniano do aglomerado com as técnicas do capítulo 2; neste caso é um trabalho de mais cuidado pela quantidade de operações que existem, mas confirmaremos a utilidade da teoria de grupos para reduzir o tamanho das matrizes.

1) $N_e = 0\,, S^z = 0\,, E = 0.$

2) $N_e = 1\,, S^z = \dfrac{\sigma}{2}.$

A base para o hamiltoniano (3.73) é

$$|1>= a_\sigma^\dagger|0>;\ |2>= b_\sigma^\dagger|0>;\ |3>= c_\sigma^\dagger|0>\,. \tag{3.75}$$

Nesta base, temos,

$$\sigma_1|1>= |1>;\ \sigma_1|2>= |3>;\ \sigma_1|3>= |2>; \tag{3.76}$$

$$C_3|1>= |2>;\ C_3|2>= |3>;\ C_3|3>= |1>\,. \tag{3.77}$$

A tabela de caracteres na representação redutível Γ_1 é

E	3σ	$2C_3$
3	1	0

Os coeficientes de expansão da representação redutível Γ_1 são

$$\begin{aligned}
a_1 &= \frac{1}{6}(\chi^{A_1}(E)\chi(E) + 3\chi^{A_1}(\sigma)\chi(\sigma) + 2\chi^{A_1}(C_3)\chi(C_3)), \\
a_1 &= 1, \\
a_2 &= \frac{1}{6}(\chi^{A_2}(E)\chi(E) + 3\chi^{A_2}(\sigma)\chi(\sigma) + 2\chi^{A_2}(C_3)\chi(C_3)), \\
a_2 &= 0, \\
a_3 &= \frac{1}{6}(\chi^{A_3}(E)\chi(E) + 3\chi^{A_3}(\sigma)\chi(\sigma) + 2\chi^{A_3}(C_3)\chi(C_3)), \\
a_3 &= 1. \qquad (3.78)
\end{aligned}$$

Fazendo a soma direta:

$$\Gamma = 1A_1 \oplus 1E_1, \qquad (3.79)$$

e os operadores de projeção são

$$\begin{aligned}
P^{A_1} &\propto (E + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + C_3 + C_3^2), \\
P^{E_1} &\propto (2E - C_3 - C_3^2). \qquad (3.80)
\end{aligned}$$

No sub-espaço de A_1, temos:

$$|\Psi_1 >= P^{A_1}|1 >= |1 > +|2 > +|3 > . \qquad (3.81)$$

No sub-espaço de E_1:

$$\begin{aligned}
|\Psi_2 > &= P^{E_1}|1 >= 2|1 > -|2 > -|3 >, \\
|\Psi_3 > &= a|\Psi_2 > +bC_3^2|\Psi_2 >, \\
|\Psi_3 > &= |2 > +|3 > . \qquad (3.82)
\end{aligned}$$

Nesta última equação usamos:

$$\begin{aligned} \langle\Psi_3|\Psi_3\rangle &= 1, \\ \langle\Psi_3|\Psi_2\rangle &= 0; \end{aligned} \tag{3.83}$$

Operando o hamiltoniano em cada uma das bases dos sub-espaços:

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Psi_1> &= -2t|\Psi_1>, \\ \hat{H}|\Psi_2> &= t|\Psi_2>, \\ \hat{H}|\Psi_3> &= t|\Psi_3> . \end{aligned} \tag{3.84}$$

Então a autoenergia no sub-espaço A_1 é

$$E_1 = -2t. \tag{3.85}$$

E no sub-espaço de E_1 são

$$\begin{aligned} E_2 &= t, \\ E_3 &= t. \end{aligned} \tag{3.86}$$

3) $\mathrm{N}_e = 2$, $S^z = \sigma$.

A base para o hamiltoniano (3.73) é

$$|1>= a^\dagger_\sigma b^\dagger_\sigma|0>;\ |2>= a^\dagger_\sigma c^\dagger_\sigma|0>;\ |3>= b^\dagger_\sigma c^\dagger_\sigma|0> . \tag{3.87}$$

Nesta base, temos,

$$\sigma_1|1>= |2>;\ \sigma_1|2>= |1>;\ \sigma_1|3>= -|3> . \tag{3.88}$$

$$C_3|1>= |3>;\ C_3|2>= -|1>;\ C_3|3>= -|2> . \tag{3.89}$$

A tabela de caracteres da representação redutível Γ_1 é

E	3σ	$2C_3$
3	-1	0

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{6}(1.3 - 3.1.1 + 2.1.0) = 0, \\ a_2 &= \frac{1}{6}(1.3 + 3.1.1 + 2.1.0) = 1, \\ a_3 &= \frac{1}{6}(2.3 - 3.0.1 - 2.1.0) = 1. \end{aligned} \tag{3.90}$$

Fazendo a soma direta:

$$\Gamma = 1A_2 \oplus 1E_1, \tag{3.91}$$

e os operadores de projeção são

$$\begin{aligned} P^{A_2} &\propto (E - \sigma_1 - \sigma_2 - \sigma_3 + C_3 + C_3^2), \\ P^{E_1} &\propto (2E - C_3 - C_3^2). \end{aligned} \tag{3.92}$$

No sub-espaço de A_2, temos,

$$|\Psi_1 >= P^{A_2}|1 >= |1 > -|2 > +|3 > . \tag{3.93}$$

No sub-espaço de E_1:

$$\begin{aligned} |\Psi_2 > &= P^{E_1}|1 >= 2|1 > +|2 > -|3 >, \\ |\Psi_3 > &= |2 > +|3 >; \end{aligned} \tag{3.94}$$

Operando o hamiltoniano em cada uma das bases dos sub-espaços:

$$\begin{aligned}
\hat{H}|\Psi_1> &= 2t|\Psi_1> +V|\Psi_1>, \\
\hat{H}|\Psi_2> &= -t|\Psi_2> +V|\Psi_2>, \\
\hat{H}|\Psi_3> &= -t|\Psi_3> +V|\Psi_3> . \qquad (3.95)
\end{aligned}$$

O valor da autoenergia no sub-espaço A_2 é

$$E_1 = 2t + V. \qquad (3.96)$$

E no sub-espaço de E_1 são

$$\begin{aligned}
E_2 &= -t + V, \\
E_3 &= -t + V. \qquad (3.97)
\end{aligned}$$

4) $\mathrm{N}_e = 2$, $S^z = 0$

A base para o hamiltoniano (3.73) é

$$\begin{aligned}
&|1>= a^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>; \quad |2>= b^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>; \quad |3>= c^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>; \\
&|4>= a^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>; \quad |5>= b^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>; \quad |6>= c^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>; \\
&|7>= a^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0>; \quad |8>= b^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0>; \quad |9>= c^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0> . \qquad (3.98)
\end{aligned}$$

Nesta base, temos,

$$\begin{aligned}
&\sigma_1|1>= |1>; \quad \sigma_1|2>= |3>; \quad \sigma_1|3>= |2>; \\
&\sigma_1|4>= |7>; \quad \sigma_1|5>= |9>; \quad \sigma_1|6>= |8>; \\
&\sigma_1|7>= |4>; \quad \sigma_1|8>= |6>; \quad \sigma_1|9>= |5>; \qquad (3.99)
\end{aligned}$$

$$C_3^2|1>=|9>;\quad C_3^2|2>=|7>;\quad C_3^2|3>=|8>;$$
$$C_3^2|4>=|3>;\quad C_3^2|5>=|1>;\quad C_3^2|6>=|2>;$$
$$C_3^2|7>=|6>;\quad C_3^2|8>=|4>;\quad C_3^2|9>=|5>. \tag{3.100}$$

A tabela de caracteres da representação redutível Γ_1 é

E	3σ	$2C_3$
9	1	0

e os coeficientes de expansão da representação redutível Γ_1 são

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{6}(1.9+3.1.1+2.1.0)=2, \\ a_2 &= \frac{1}{6}(1.9-3.1.1+2.1.0)=1, \\ a_3 &= \frac{1}{6}(2.9+3.0.1-2.1.0)=3. \end{aligned} \tag{3.101}$$

Fazendo a soma direta:

$$\Gamma = 2A_1 \oplus 1A_2 \oplus 3E_1, \tag{3.102}$$

e os operadores de projeção são

$$\begin{aligned} P^{A_1} &\propto (E+\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+C_3+C_3^2), \\ P^{A_2} &\propto (E-\sigma_1-\sigma_2-\sigma_3+C_3+C_3^2), \\ P^{E_1} &\propto (2E-C_3-C_3^2). \end{aligned} \tag{3.103}$$

No sub-espaço de A_1, temos,

$$\begin{aligned} |\Psi_1> &= P^{A_1}|1>=|1>+|5>+|9>, \\ |\Psi_2> &= P^{A_1}|2>=|2>+|3>+|8>+|4>+|6>+|7>. \end{aligned} \tag{3.104}$$

No sub espaço de A_2:

$$|\Psi_3> \;=\; P^{A_2}|2>=|2>-|3>-|8>-|4>+|6+|7> . \quad (3.105)$$

No sub espaço de E_1 temos a seguinte base [11]:

$$\begin{aligned}
|\Psi_4> &= P^{E_1}|1>=2|1>-|5>-|9>, \\
|\Psi_5> &= 2|6>+2|8>-|2>-|3>-|4>-|7>, \\
|\Psi_6> &= 2|6>-2|8>-|2>-|7>+|4>+|3>, \\
|\Psi_7> &= |5>-|9>, \\
|\Psi_8> &= |4>+|2>-|7>-|3>, \\
|\Psi_9> &= |4>-|3>-|2>+|7> . \qquad (3.106)
\end{aligned}$$

Operando o hamiltoniano em cada uma das bases dos sub-espaços, obtemos:

$$\begin{aligned}
\hat{H}|\Psi_1> &= -2t|\Psi_2>+U|\Psi_1>, \\
\hat{H}|\Psi_2> &= -4t|\Psi_1>+(V-2t)|\Psi_2>, \\
\hat{H}|\Psi_3> &= (V+2t)|\Psi_3>, \\
\hat{H}|\Psi_4> &= t|\Psi_5>+U|\Psi_4>, \\
\hat{H}|\Psi_5> &= 2t|\Psi_4>+(t+V)|\Psi_5>, \\
\hat{H}|\Psi_6> &= (V-t)|\Psi_6>, \\
\hat{H}|\Psi_7> &= -t|\Psi_8>+(V+U)|\Psi_7>, \\
\hat{H}|\Psi_8> &= -2t|\Psi_7>+(t+V)|\Psi_8>, \\
\hat{H}|\Psi_9> &= (V-t)|\Psi_9> . \qquad (3.107)
\end{aligned}$$

No sub-espaço de A_1 temos as seguintes autoenergias:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{U+V-2t+\sqrt{36t^2+V^2+U^2-4tV-2UV+4tU}}{2}, \\ E_2 &= \frac{U+V-2t-\sqrt{36t^2+V^2+U^2-4tV-2UV+4tU}}{2}, \end{aligned} \tag{3.108}$$

enquanto no sub-espaço de A_2 temos:

$$E_3 = 2t + V. \tag{3.109}$$

No sub-espaço de E_1 temos as seguintes autoenergias:

$$\begin{aligned} E_4 &= \frac{V+t+U+\sqrt{V^2+9t^2+2Vt+U^2-2VU-2tU}}{2}, \\ E_5 &= \frac{V+t+U-\sqrt{V^2+9t^2+2Vt+U^2-2VU-2tU}}{2}, \\ E_6 &= V-t, \\ E_7 &= \frac{t+2V+U+\sqrt{9t^2-2Ut+U^2}}{2}, \\ E_8 &= \frac{t+2V+U-\sqrt{9t^2-2Ut+U^2}}{2}, \\ E_9 &= V-t. \end{aligned} \tag{3.110}$$

5) $\mathrm{N}_e = 3\,,\ S^z = \dfrac{3\sigma}{2}\,,\ E = 3V.$

6) $\mathrm{N}_e = 3\,,\ S^z = \dfrac{\sigma}{2}.$

A base para o hamiltoniano (3.73) é

$$\begin{aligned} &|1>= a^\dagger_\uparrow b^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>; \quad |2>= a^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>; \quad |3>= b^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>; \\ &|4>= a^\dagger_\uparrow b^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>; \quad |5>= a^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>; \quad |6>= b^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>; \\ &|7>= a^\dagger_\uparrow b^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0>; \quad |8>= a^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0>; \quad |9>= b^\dagger_\uparrow c^\dagger_\uparrow c^\dagger_\downarrow|0> . \end{aligned} \tag{3.111}$$

Nesta base, temos:

$$\begin{aligned}
&\sigma_1|1>=|2>; \quad \sigma_1|2>=|1>; \quad \sigma_1|3>=-|3>;\\
&\sigma_1|4>=|8>; \quad \sigma_1|5>=|7>; \quad \sigma_1|6>=-|9>;\\
&\sigma_1|7>=|5>; \quad \sigma_1|8>=|4>; \quad \sigma_1|9>=-|6>.
\end{aligned} \tag{3.112}$$

$$\begin{aligned}
&C_3^2|1>=-|8>; \quad C_3^2|2>=-|9>; \quad C_3^2|3>=|7>;\\
&C_3^2|4>=-|2>; \quad C_3^2|5>=-|3>; \quad C_3^2|6>=|1>;\\
&C_3^2|7>=-|5>; \quad C_3^2|8>=-|6>; \quad C_3^2|9>=|4>.
\end{aligned} \tag{3.113}$$

A tabela de caracteres da representação redutível Γ_1 é

E	3σ	$2C_3$
9	-1	0

e os coeficientes de expansão da representação redutível Γ_1 são

$$\begin{aligned}
a_1 &= \frac{1}{6}(1.9 - 3.1.1 + 2.1.0) = 1,\\
a_2 &= \frac{1}{6}(1.9 + 3.1.1 + 2.1.0) = 2,\\
a_3 &= \frac{1}{6}(2.9 - 3.0.1 - 2.1.0) = 3.
\end{aligned} \tag{3.114}$$

Fazendo a soma direta:

$$\Gamma = 1A_1 \oplus 2A_2 \oplus 3E_1, \tag{3.115}$$

e os operadores de projeção são

$$\begin{aligned}
P^{A_1} &\propto (E + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + C_3 + C_3^2),\\
P^{A_2} &\propto (E - \sigma_1 - \sigma_2 - \sigma_3 + C_3 + C_3^2),\\
P^{E_1} &\propto (2E - C_3 - C_3^2).
\end{aligned} \tag{3.116}$$

No sub-espaço de A_1 temos:

$$|\Psi_1> \;=\; P^{A_1}|1>=|1>+|2>+|6>-|4>-|8>-|9>\,. \quad (3.117)$$

No sub-espaço de A_2:

$$\begin{aligned} |\Psi_2> &= P^{A_2}|1>=|1>+|4>+|6>+|9>-|2>-|8>, \\ |\Psi_3> &= P^{A_2}|3>=|3>+|7>-|5>\,. \end{aligned} \quad (3.118)$$

No sub-espaço de E_1 [11]:

$$\begin{aligned} |\Psi_8> &= P^{E_1}(|1>+|9>)=2|1>+2|9>+|8>+|2>-|4>-|6>, \\ |\Psi_9> &= P^{E_1}|5>=2|5>+|7>+|3>, \\ |\Psi_7> &= C_3|\Psi_8>=|2>+|4>+|6>+|8>, \\ |\Psi_5> &= P^{E_1}(|9>-|1>)=2|9>+|2>-|4>-2|1>+|6>-|8>, \\ |\Psi_4> &= C_3|\Psi_5>=|2>+|4>-|6>-|8>, \\ |\Psi_6> &= C_3|\Psi_9>=7>-|3>\,. \end{aligned} \quad (3.119)$$

Operando o hamiltoniano em cada uma das bases dos sub-espaços:

$$\begin{aligned}
\hat{H}|\Psi_1> &= (U+2V)|\Psi_1>, \\
\hat{H}|\Psi_2> &= (U+2V)|\Psi_2>, \\
\hat{H}|\Psi_3> &= 3V|\Psi_3>, \\
\hat{H}|\Psi_4> &= t|\Psi_5> +(U+2V)|\Psi_4>, \\
\hat{H}|\Psi_5> &= 3t|\Psi_4> +6t|\Psi_6> +(U+2V)|\Psi_5>, \\
\hat{H}|\Psi_6> &= t|\Psi_5> +3V|\Psi_6>, \\
\hat{H}|\Psi_7> &= -2t|\Psi_9> +(U+2V)|\Psi_7> -t|\Psi_8>, \\
\hat{H}|\Psi_8> &= -3t|\Psi_7> +(U+2V)|\Psi_8>, \\
\hat{H}|\Psi_9> &= -3t|\Psi_7> +3V|\Psi_9> . \qquad (3.120)
\end{aligned}$$

No sub-espaço de A_1 temos as seguintes autoenergias:

$$E_1 = U+2V. \qquad (3.121)$$

enquanto no sub-espaço de A_2 temos:

$$\begin{aligned}
E_2 &= U+2V, \\
E_3 &= 3V. \qquad (3.122)
\end{aligned}$$

No sub-espaço de E_1:

$$\begin{aligned}
E_4 &= 2\sqrt{-Q}\cos(\frac{\theta}{3}) + \frac{U+V}{3}, \\
E_5 &= 2\sqrt{-Q}\cos(\frac{\theta+2\pi}{3}) + \frac{U+V}{3}, \\
E_6 &= 2\sqrt{-Q}\cos(\frac{\theta+4\pi}{3}) + \frac{U+V}{3}, \qquad (3.123)
\end{aligned}$$

que são soluções da equação de autovalores:

$$E^3 + a_2E^2 + a_1E + a_0 = 0, \tag{3.124}$$

onde

$$\begin{aligned} a_2 &= -(7V + 2U), \\ a_1 &= -(9t^2 - 10UV - 16V^2 - U^2), \\ a_0 &= 6t^2U + 21t^2V - 3VU^2 - 12UV^2 - 12V^3, \end{aligned} \tag{3.125}$$

e as relações:

$$\begin{aligned} Q &= -\frac{3(9t^2 - 10UV - 16V^2 - U^2) - (7V + 2U)^2}{9}, \\ R &= \frac{9(7V + 2U)(9t^2 - 10UV - 16V^2 - U^2) - 27(6t^2U + 21t^2V - 3VU^2 - 12UV^2 - 12V^3)}{54} \\ &+ \frac{2(7V + 2U)^3}{54}, \\ \theta &= \cos^{-1}(\frac{R}{\sqrt{-Q^3}}). \end{aligned} \tag{3.126}$$

As outras três autoenergias são

$$\begin{aligned} E_7 &= 2\sqrt{-Q}\cos(\frac{\theta}{3}) + \frac{U + V}{3}, \\ E_8 &= 2\sqrt{-Q}\cos(\frac{\theta + 2\pi}{3}) + \frac{U + V}{3}, \\ E_9 &= 2\sqrt{-Q}\cos(\frac{\theta + 4\pi}{3}) + \frac{U + V}{3}, \end{aligned} \tag{3.127}$$

que são soluções da equação de autovalores:

$$E^3 + a_2E^2 + a_1E + a_0 = 0, \tag{3.128}$$

com

$$
\begin{aligned}
a_2 &= -(7V + 2U), \\
a_1 &= -(9t^2 - 10UV - 16V^2 - U^2), \\
a_0 &= 6t^2U + 21t^2V - 3VU^2 - 12UV^2 - 12V^3, \qquad (3.129)
\end{aligned}
$$

e as relações:

$$
\begin{aligned}
Q &= -\frac{3(9t^2 - 10UV - 16V^2 - U^2) - (7V + 2U)^2}{9}, \\
R &= \frac{9(7V + 2U)(9t^2 - 10UV - 16V^2 - U^2) - 27(6t^2U + 21t^2V - 3VU^2 - 12UV^2 - 12V^3)}{54} \\
&+ \frac{2(7V + 2U)^3}{54}, \\
\theta &= \cos^{-1}\left(\frac{R}{\sqrt{-Q^3}}\right). \qquad (3.130)
\end{aligned}
$$

Capítulo 4

Cadeia Linear

Neste capítulo vamos apresentar e discutir nossos resultados testes obtidos através da diagonalização exata do modelo de Hubbard estendido para a cadeia linear em semi-preenchimento da banda. Nesta cadeia caracterizamos o estado fundamental e esboçamos seu diagrama de fases no plano (U,V). Os tamanhos das cadeias para os quais diagonalizamos o hamiltoniano foram N=12,8,6.

Durante mais de duas décadas foram feitos esforços para entender as propriedades do estado fundamental da cadeia linear. É bem estabelecido que para $V \lesssim U/2$ o sistema exibe uma fase de onda de densidade de spin (SDW, *spin density wave* na nomenclatura inglesa), enquanto que para $V \gtrsim U/2$ uma fase de densidade de onda de carga (CDW, *charge density wave* na nomenclatura inglesa) é observada. A transição de fase em $V \approx U/2$ é contínua para acoplamento coulombiano fraco, e de primeira ordem para acoplamento coulombiano forte.

Em nosso estudo caracterizamos a transição de fase SDW-CDW para os diferentes regimes de U. Esta análise já foi feita por diferentes métodos: monte carlo quântico [9, 22], *density matrix renormalization group*, (DMRG) [20, 21], e diagonalização exata [12]. Alguns deles serão comparados com os nossos resultados.

Para estabelecer um entendimento básico do mecanismo responsável pela

referida transição de fase, podemos fazer alusão ao dímero [21], tratado no capítulo 3. No caso N_e=2 ou ρ=1 e U=40t o estado fundamental está representado por

$$|\Psi_{gs}>=\{\frac{4}{40-V+\sqrt{1616-80V+V^2}}|\Psi_1>\}+|\Psi_2>, \tag{4.1}$$

com

$$\begin{aligned}|\Psi_1>&=a^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>+b^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>,\\ |\Psi_2>&=b^\dagger_\uparrow a^\dagger_\downarrow|0>+a^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow|0>.\end{aligned} \tag{4.2}$$

Vamos agora definir a dupla ocupação no estado fundamental:

$$<d>=\frac{1}{N}\sum_i <n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}>. \tag{4.3}$$

Podemos analisar os coeficientes de expansão do estado fundamental obtendo os seguintes resultados: no limite V >> U, temos,

$$|\Psi_{gs}>\propto|\Psi_1>, \tag{4.4}$$

que é uma superposição de dois estados com $<d>$=0.5; no limite V $\rightarrow$ 0,

$$|\Psi_{gs}>\propto|\Psi_2>, \tag{4.5}$$

que é uma superposição de dois estados com $<d>$=0.
Na Figura 4.1 estão representadas as duas fases do dímero.

Para determinar a ordem da transição, nós vamos adotar o método da referência [20], examinando a derivada da energia por sítio do estado fundamental com respeito a U. Usando o teorema de Hellman-Feynman [20], podemos demonstrar que esta derivada está dada pelo valor esperado da dupla ocupação

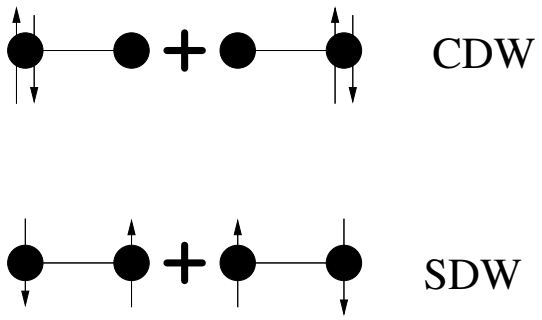

Figura 4.1: Esquema das fases do dímero.

$< d >$ no estado fundamental.

Nas Figuras 4.2 e 4.3, apresentamos a dupla ocupação $< d >$ versus V para U=40t e U=20t, na vizinhança do ponto V=U/2, para os diferentes tamanhos da cadeia. Para U=40t, N=12 e N=8, $< d >$ salta de zero ao valor 0.5 abruptamente. Para N=6, $< d >$ faz uma passagem menos abrupta entre ditos valores. Claramente para U=40t temos uma transição de primeira ordem, e a forma da curva para N=6 é interpretada como uma consequência do tamanho da rede. Para U=20t vemos que $< d >$ segue representada por uma função descontínua na vizinhança do ponto V=U/2. Na Figura 4.3 podemos ver que $< d >$ não chega ao valor 0.5, o que é justificado por uma maior competição entre U e V, mas para este valor de U seguimos tendo uma transição de primeira ordem.

Existe uma forma qualitativa de entender a transição de fase no regime de forte acoplamento [9]. Para U e V grandes podemos desprezar o efeito de t. Logo, podemos imaginar o estado fundamental como um conjunto de pares ocupando sítios alternados da rede com energia total E=NU/2, ou todos os sítios da rede com simples ocupação e com uma energia total E=NV. Então, a transição vai ocorrer em V=U/2.

Nas Figuras 4.4 e 4.5 apresentamos $< d >$ versus V para U=12t e U=6t, novamente na vizinhança do ponto V=U/2. Podemos ver que para N=12 e N=8, $< d >$ segue representado por uma função descontínua na vizinhança

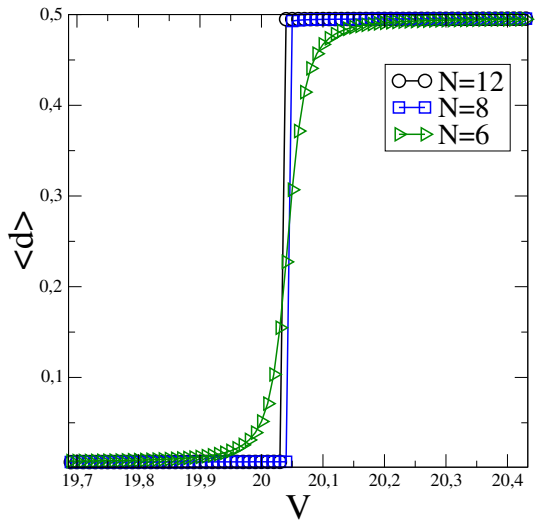

Figura 4.2: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=40t e N=12,8,6. O regime de acoplamento coulombiano é forte e a transição de primeira ordem no limite termodinâmico.

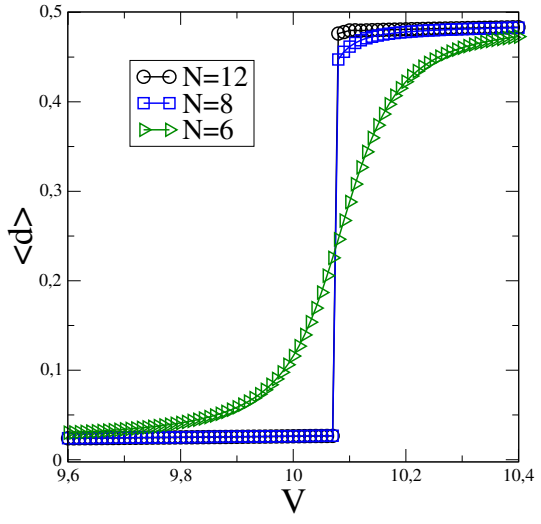

Figura 4.3: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=20t e N=12,8,6. O regime de acoplamento coulombiano é forte e a transição de primeira ordem no limite termodinâmico.

de V=U/2. Para N=6 vemos que $< d >$ segue representado por uma função contínua. Nós damos preferência à análise para N=12 e N=8, pois são valores mais próximos ao limite termodinâmico. Logo, para estes valores de U, a transição ainda é de primeira ordem.

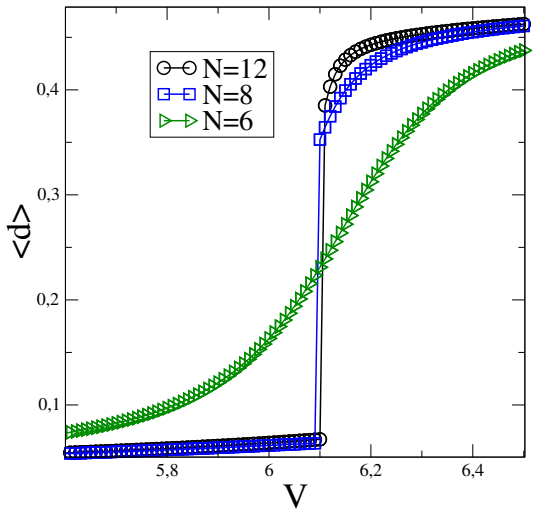

Figura 4.4: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=12t e N=12,8,6. Para este regime de acoplamento coulombiano intermediário, a transição é de primeira ordem no limite termodinâmico.

Uma ultima análise é feita para U=3t e U=2t. Nas Figuras 4.6 e 4.7, observamos que a função já não apresenta uma descontinuidade bem definida na vizinhança de V=U/2, e que a inclinação e a *aparente* descontinuidade diminuem com o número de sítios da cadeia. Além disso, na medida que U diminui, a inclinação da curva diminui para um N fixo. Logo, para estes valores de U, evidenciamos uma transição SDW-CDW contínua.

O ponto tricrítico, no qual a transição muda de contínua para primeira ordem, foi analisado por diferentes técnicas [9, 20, 22, 19]. Com nosso estudo teste podemos sugerir que ele está na região 3t<U<6t.

Na Figura 4.8 apresentamos a forma semi-quantitativa de evidenciar a ordem da transição. Analisamos a magnitude da descontinuidade da dupla

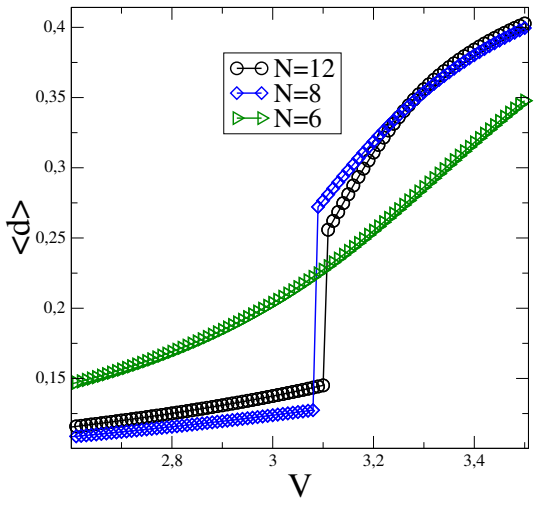

Figura 4.5: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=6t e N=12,8,6. Para este regime de acoplamento coulombiano intermediário a transição é de primeira ordem no limite termodinâmico. Observe a diminuição da magnitude da descontinuidade de $< d >$ na transição quando U diminui.

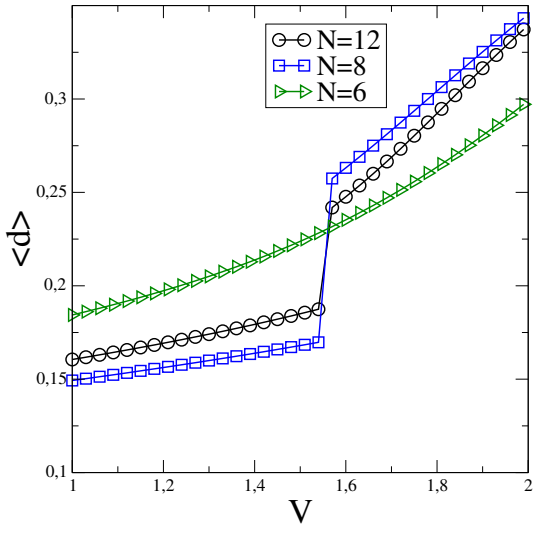

Figura 4.6: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=3t e N=12,8,6. O regime de acoplamento coulombiano é fraco, a parte vertical na vizinhança de V=U/2 desaparece, e a inclinação da curva depende do número de sítios da cadeia. Para este valor de U temos uma transição de fase contínua no limite termodinâmico.

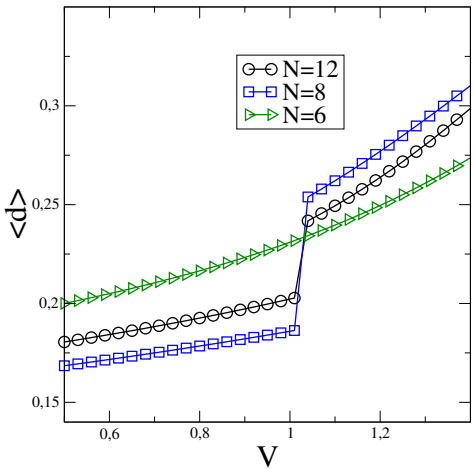

Figura 4.7: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=2t e N=12,8,6. O regime de acoplamento coulombiano é fraco, a inclinação da curva depende do número de sítios da cadeia. Para este valor de U temos uma transição de fase contínua no limite termodinâmico

ocupação, Δ<d>, para os diferentes regimes de interação coulombiana U. Esperamos que no regime de acoplamento coulombiano fraco a magnitude da descontinuidade, Δ<d>, tenda a zero no limite termodinâmico (valores negativos de Δ<d> no limite (1/N)$\rightarrow$0, utilizando a hipótese de escala linear com 1/N). Estes resultados sugerem que para U=3t e U=2t temos uma transição de fase contínua. Para U=6t, no limite de acoplamento coulombiano intermediário, os resultados sugerem que a descontinuidade apresenta um valor finito no limite termodinâmico. Logo, vamos ter uma transição de fase de primeira ordem para U$\geq$ 6t.

Na tabela abaixo apresentamos os valores de $V_c(U)$ para diferentes tentativas de caracterização da transição SDW-CDW, incluindo a nossa.

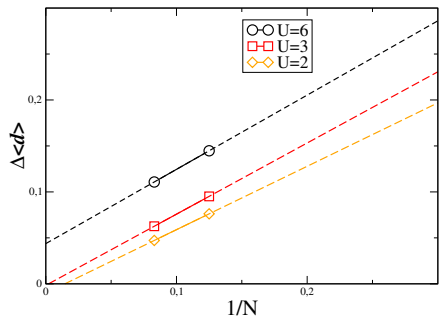

Figura 4.8: Δ<d> no limite termodinâmico. Vemos que para U$\gtrsim$ 6t, Δ<d> tem um valor finito e diferente de zero, logo, nesta região a transição de fase é de primeira ordem. Para U=3t, e U=2t, Δ<d> é zero no limite termodinâmico, logo, a transição é contínua.

U	V_c(nosso trabalho)	V_c(Ref [21])	V_c(Ref [20])	V_c(Ref [9])
2	1.03	1.046(2)	1.125	1.15
3	1.56	1.578(9)	1.640	1.675
6	3.10	3.129(7)	3.155	3.158
12	6.10	6.111(1)	6.115	
20	10.07			
40	20.03			

Com os dados obtidos podemos apresentar na Figura 4.9 nosso diagrama de fases no plano (U,V). Note que neste diagrama de fases apresenta-se só a transição SDW-CDW. É importante ressaltar que nos últimos anos se abriu um debate sobre a existência de outra fase (BOW, *bond order wave* na nomenclatura inglesa), que é o resultado da dimerização dos spins da rede [16, 17, 19, 20, 21, 22], mas a sua localização no diagrama de fases ainda é motivo de controvérsia e não trivial de caracterizar.

Na Figura 4.10 apresentamos o diagrama de fases obtido na referência [20]. Observe que nesta referência a BOW existe sobre a linha de coexistência, na região 4t$\lesssim$U$\lesssim$8t.

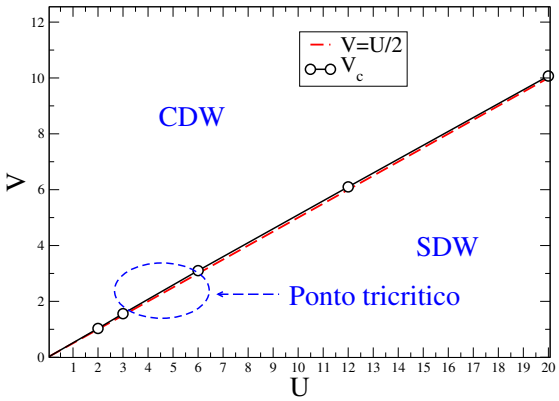

Figura 4.9: Diagrama de fases para a cadeia linear, N=12. O ponto tricrítico está na região 3t<U<6t. Para V$\lesssim$U/2 o sistema apresenta uma fase SDW. Para V$\gtrsim$U/2 o sistema apresenta uma fase CDW. No regime de acoplamento coulombiano fraco a transição é contínua, e no regime de acoplamento coulombiano forte a transição é de primeira ordem.

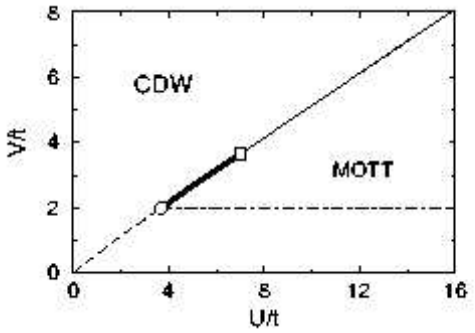

Figura 4.10: Diagrama de fases no plano (U,V) para a cadeia linear obtido na referência [20]. A linha grossa representa a BOW. Na nossa análise não estudamos o significado da linha horizontal.

Na Figura 4.11 apresentamos o diagrama de fases obtido na referência [22]. Veja que neste estudo a BOW existe acima do valor de U no qual a ordem da transição muda de contínua a primeira ordem, concordando com a referência [20]. Mas a BOW também existe abaixo deste valor de U. É evidente que não é trivial esboçar este diagrama de fases e que ainda é hoje motivo de pesquisa.

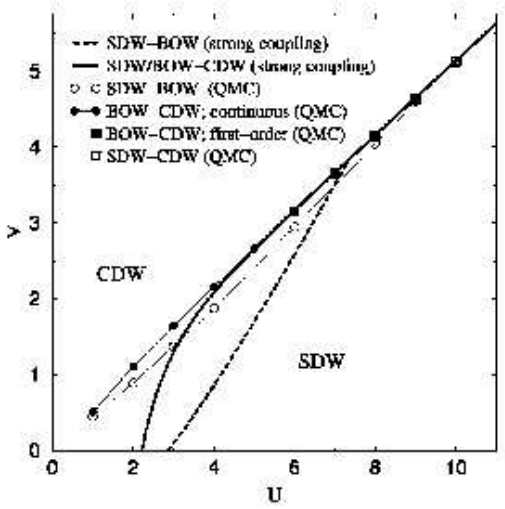

Figura 4.11: Diagrama de fases no plano (U,V) para a cadeia linear obtido na referência [22]. Não detalhe as duas linhas que cortam o eixo U.

Capítulo 5

Resultados

5.1 Cadeia AB2

Neste capítulo vamos apresentar e discutir os resultados obtidos através da diagonalização exata do modelo de Hubbard estendido para a cadeia bipartida AB2 em semi-preenchimento da banda, e para diferentes regimes de interação coulombiana U. Nesta cadeia, caracterizamos o estado fundamental e esboçamos seu diagrama de fases no plano (U,V). Os tamanhos das cadeias estudadas foram N=12 e N=18.

Nas Figuras 5.1 e 5.2 apresentamos a dupla ocupação $< d >$, e a densidade de partículas nos sítios A e B, $< n_A >$ e $< n_B >$, respectivamente, versus V, para U=40t e U=20t. Na vizinhança do ponto V=U/4, $< d >$ apresenta uma descontinuidade. Da mesma forma, a densidade de partículas nos sítios A e B é representada por funções descontínuas na vizinhança de dito ponto. Claramente, para estes valores de U, vemos que o estado fundamental apresenta uma transição de fase de primeira ordem no campo de carga.

Podemos fazer uma análise qualitativa para entender a transição. Neste regime, U e V são muito maiores que t. Quando t for zero e V<<U/4, o estado fundamental tem todos os sítios da rede com simples ocupação, energia

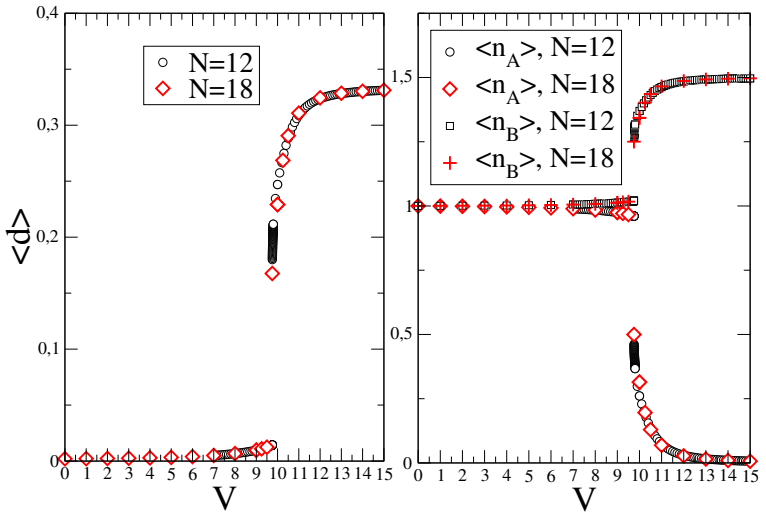

Figura 5.1: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=40t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é forte e a transição de primeira ordem no campo de carga no limite termodinâmico. A densidade de partículas é representada por funções descontínuas na vizinhança do ponto V=U/4

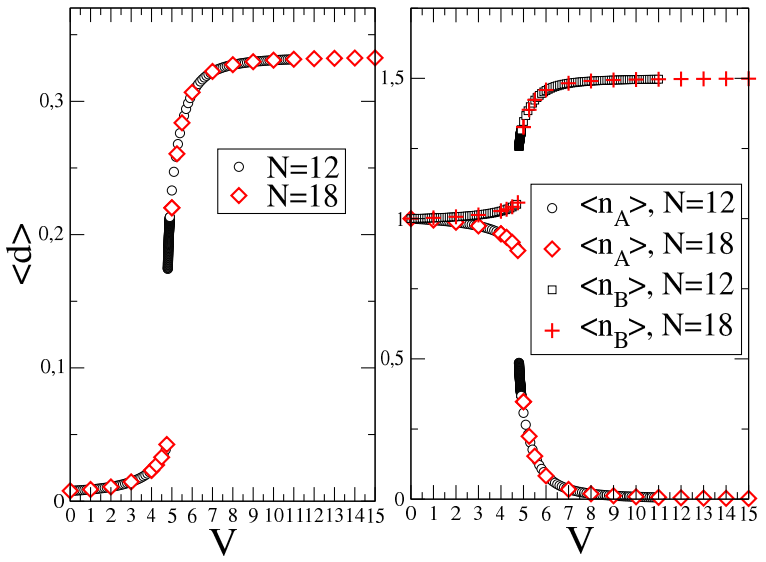

Figura 5.2: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=20t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é forte e a transição de primeira ordem no campo de carga no limite termodinâmico. A densidade de partículas é representada por funções descontínuas na vizinhança do ponto V=U/4.

E=4VN_c, e sem ordenamento magnético. Quando V>>U/4, o estado fundamental tem uma dupla ocupação por célula unitária, sem ter ordenamento magnético, e com energia E=N_cU. Logo, a transição vai ocorrer em V≈U/4. Quando t for diferente de zero, e para V=0, os spins correlacionam-se de forma a adquirir uma ordem ferrimagnética ($FERRI$) de longo alcance, ou seja, seus parâmetros de ordem ferromagnético e antiferromagnético (AF), representados por $< S^2 >/N_c$ e $< S^2(\pi) >/N_c$, respectivamente, são não nulos [23], onde

$$< S^2(\pi) >= \sum \epsilon_i \epsilon_j \vec{S}_i.\vec{S}_j \, , \, \epsilon_i = 1 \, se \, i \in A \, , -1 \, se \, i \in B, \tag{5.1}$$

$$< S^2 >= \sum \vec{S}_i.\vec{S}_j. \tag{5.2}$$

Note nas Figuras 5.3 e 5.4 que $< S^2 >$ e $< S^2(\pi) >$ são quase constantes na medida que V aumenta de zero até o valor de V≈U/4. Logo, podemos afirmar que na região 0≤V$\lesssim$U/4 o sistema está numa fase $FERRI$.

Quando t for diferente de zero, e V$\gtrsim$ U/4, vamos ter N_c duplas ocupações nos sítios B, sendo que duas delas agrupam-se numa célula unitária formando um defeito de carga, e N_c simples ocupações também nos sítios B. Estes N_c elétrons desemparelhados estão correlacionados ferromagneticamente, o que faz que a cadeia esteja novamente numa fase com o spin de Lieb. Nas Figuras 5.3 e 5.4, vemos que para V$\gtrsim$U/4 o parâmetro de ordem (AF) tende ao valor do parâmetro ferromagnético. Isto pode-se explicar observando que nas Figuras 5.1 e 5.2, a densidade de partículas nos sítios A nesta região tende a zero. Logo, não temos correlação entre as duas sub-redes.

É importante ressaltar que a criação do defeito na carga gera uma quebra da simetria global de translação da cadeia. Na fase $FERRI$, o sistema encontra-se no sub-espaço de simetrias (-)^{N_c} (veja apêndice B), com a carga homogeneamente distribuída em cada sub-rede, e magnetizações $< S_A^z > \cong$ -0.25 e $< S_B^z > \cong$ 0.75 (veja Figuras 5.5, 5.6). Após a transição, o sistema

encontra-se no sub-espaço de simetrias (+)(-)$^{N_c-1}$ (veja apêndice B), com magnetizações $< S_A^z >$ =0 e $< S_B^z >$ =0.5, ou seja, a ordem (AF) foi suprimida, como podemos ver nas Figuras 5.7, 5.8. Doravante vamos chamar esta fase de *onda de densidade de carga com ordem ferromagnética* ($ODCF$).

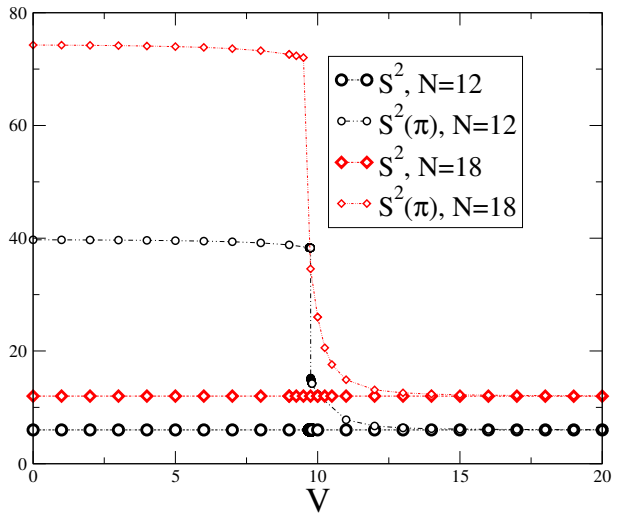

Figura 5.3: U=40t. O spin total permanece constante após a transição, e $S^2(\pi)$ tende ao valor de S^2 pois na fase ODCF os sítios A estão desocupados.

Na Figura 5.9, apresentamos um possível esquema da fase de $ODCF$ e de seu primeiro estado excitado de spin. Observamos a quebra de simetria global de translação como uma consequência do defeito na carga. No caso V=0, e no regime de acoplamento coulombiano forte, o *gap* de spin é [23]

$$\Delta_S \quad \cong \quad 1,76J, \tag{5.3}$$

onde J=$4t^2$/U. Logo, para U=40t e U=20t, temos $\Delta_S \cong 0.176$ e $\Delta_S \cong 0.352$, respectivamente, (veja Figura 5.10). No caso V $\neq$ 0, e V$\gtrsim$U/4, o *gap* de spin

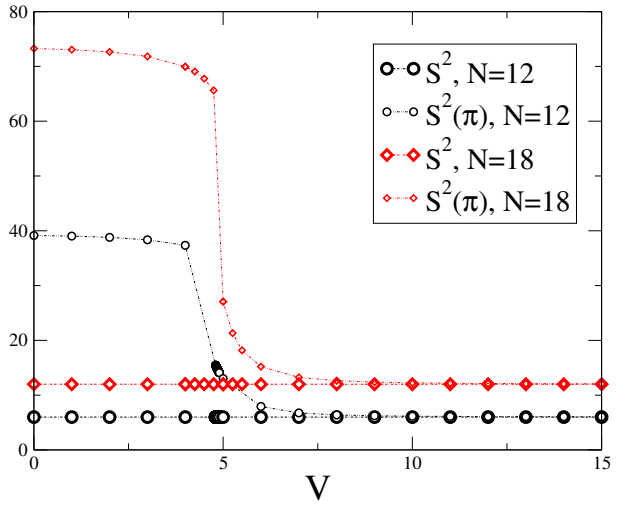

Figura 5.4: U=20t. O spin total permanece constante após a transição, e $S^2(\pi)$ tende ao valor de S^2 pois na fase ODCF os sítios A estão desocupados.

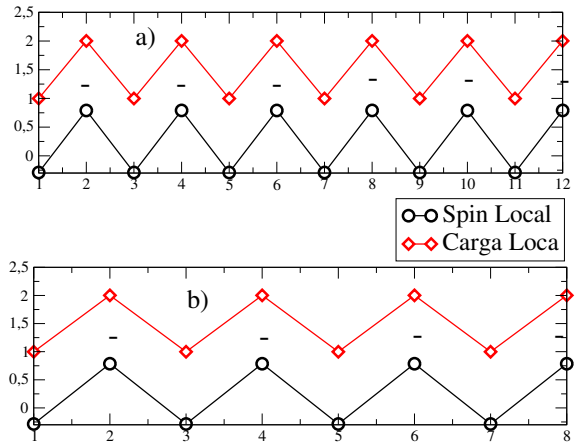

Figura 5.5: Fase ferrimagnética para U=40t e V=2,5. Na figura a) apresentamos o spin local e a carga local para a cadeia de N=18 sítios. Cada número na horizontal representa um sítio da rede, iniciando pelo sítio A da primeira célula com o número 1, e os sítios B_1 e B_2 da mesma célula com o número 2. Na figura b), são apresentadas as mesmas quantidades para a cadeia de N=12 sítios. Note que nesta fase o estado fundamental encontra-se no sub-espaço de simetrias $(-)^{N_c}$.

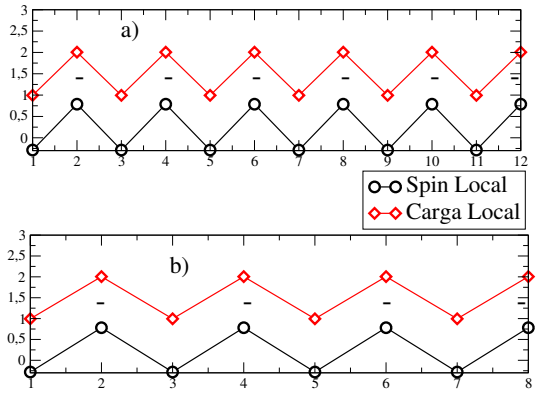

Figura 5.6: Fase ferrimagnética para U=20t e V=1. Na figura a), apresentamos o spin local e a carga local para a cadeia de N=18 sítios. Cada número na horizontal representa um sítio da rede, iniciando pelo sítio A da primeira célula com o número 1, e os sítios B_1 e B_2 da mesma célula com o número 2. Na figura b), são apresentadas as mesmas quantidades para a cadeia de N=12 sítios. Note que nesta fase o estado fundamental encontra-se no sub-espaço de simetrias (-)^{N_c}.

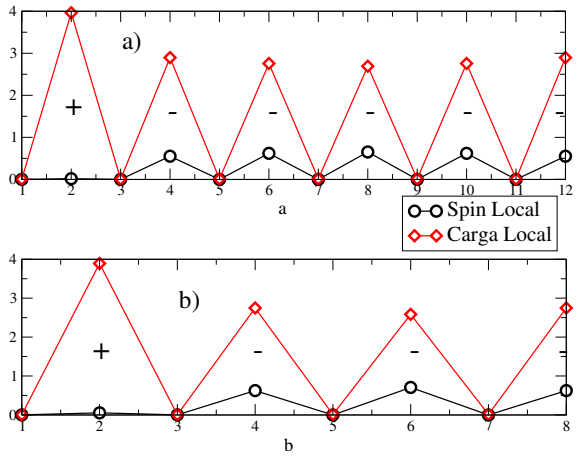

Figura 5.7: Fase de ODCF para U=40t e V=15. Na figura a), apresentamos o spin local e a carga local para a cadeia de N=18 sítios. Vemos o defeito de carga gerado nesta fase, ou seja, as quatro cargas acumuladas na primeira célula unitária nos sítios B_1 e B_2. Na figura b), são apresentadas as mesmas quantidades para a cadeia de N=12 sítios. Vemos também o defeito de carga gerado na primeira célula. Nesta fase o estado fundamental encontra-se no sub-espaço de simetrias (+)(-)$^{N_c-1}$, quebrando com a simetria de translação global da cadeia.

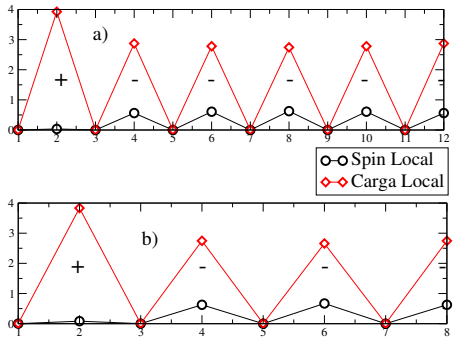

Figura 5.8: Fase de ODCF para U=20t e V=13. Na figura *a*), apresentamos o spin local e a carga local para a cadeia de N=18 sítios. Vemos o defeito de carga gerado nesta fase, ou seja, as quatro cargas acumuladas na primeira célula unitária nos sítios B_1 e B_2. Na figura *b*), são apresentadas as mesmas quantidades para a cadeia de N=12 sítios. Vemos também o defeito de carga gerado na primeira célula. Nesta fase o estado fundamental encontra-se no sub-espaço de simetrias $(+)(-)^{N_c-1}$, quebrando com a simetria de translação global da cadeia.

pode ser representado pela função linear

$$\Delta_S \cong 4V - U, \tag{5.4}$$

como pode-se deduzir dos esquemas do estado fundamental e do primeiro estado excitado de spin da fase de $ODCF$. Esta função representa a energia necessária para levar a cadeia a um estado com spin uma unidade maior.

Várias quantidades podem ser definidas para se analisar as características de transporte de um sistema eletrônico no limite termodinâmico. As mais utilizadas são o *gap* de carga, Δ_c=E(N$_e$+1)+E(N$_e$-1)-2E(N$_e$), onde E(N$_e$) é a energia do estado fundamental de N$_e$ elétrons, e o peso de Drude [8]

$$D = \frac{N_c}{2}\frac{\partial^2 E(\phi)}{\partial \phi^2}, \tag{5.5}$$

onde ϕ é o fluxo magnético através do sistema fechado em forma de anel. Recentemente [13, 14], uma quantidade relacionada com o valor esperado do

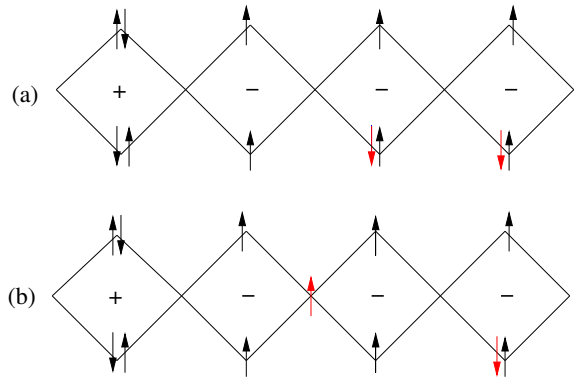

Figura 5.9: Esquema da fase de ODCF. Na figura a) apresentamos um esquema do estado fundamental. Neste esquema os spins *down*, apresentados em vermelho, estão compartindo-se entre a célula na que são apresentados e as suas células vizinhas. Na figura b) apresentamos um esquema do primeiro estado excitado de spin da cadeia, um dos spins *down* é levado a outro sítio com spin invertido.

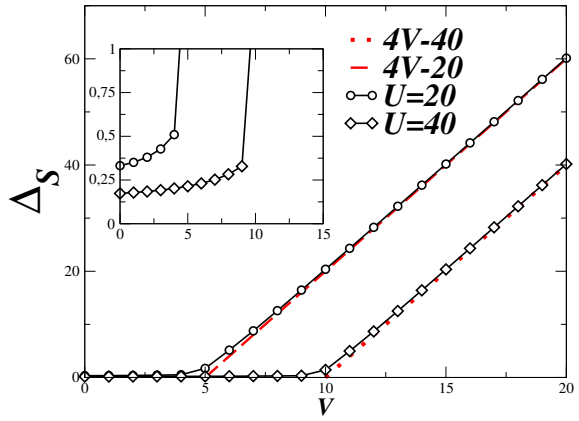

Figura 5.10: *Gap* de spin em função de V no regime de acoplamento coulombiano forte. Para V=0, $\Delta_S \cong 1.76$J. Após a transição, $\Delta_S \cong$ 4V-U.

operador de posição e com a polarização (característica de isolantes) do sistema

$$Z^q =< \Psi|exp(\frac{i2\pi q \sum_j^{N_c} X_j}{N_c}|\Psi >, \tag{5.6}$$

foi introduzida como um novo critério de medida das características de condução de sistemas eletrônicos. $\sum_j^{N_c} X_j$ é a soma das posições das partículas, e a constante q é tal que N_e/N_c=p/q, onde p e q são inteiros e a fração p/q é irredutível. Para condutores, $\mid Z^q \mid \rightarrow$0 quando N tende a infinito, e em sistemas finitos apresenta valores pequenos. Para um isolante, $\mid Z^q \mid \rightarrow$1 quando N tende a infinito, e em sistemas finitos seus valores são relativamente grandes $\mid Z^q \mid \gtrsim$0.1. Para o comportamento de Z^q em sistemas finitos, veja a referência [13]. No nosso caso, a densidade é 1, logo, temos q=1. Nas Figuras 5.11 e 5.12, vemos que $\mid Z \mid$ cresce com o tamanho do sistema e apresenta valores relativamente grandes, ou seja, o sistema é isolante antes e depois da transição. Note que o efeito de tamanho finito é mais dramático na fase $ODCF$.

Nas Figuras 5.13 e 5.14, apresentamos a dupla ocupação $< d >$, e a densidade de partículas nos sítios A e B, $< n_A >$ e $< n_B >$, respectivamente, versus V, para U=8t e U=7t, na vizinhança do ponto V=U/4. Podemos ver que, para os dois tamanhos da cadeia, todas estas quantidades seguem representadas por funções descontínuas na vizinhança de dito ponto, embora a magnitude da descontinuidade seja menor que no regime de acoplamento coulombiano forte. Isto se justifica por uma maior competição entre U e V. É importante ver que todas estas quantidades ainda independem do número de sítios da cadeia, como acontece para U=20t e U=40t.

Para U=8t, N=12, e para U=7t, N=12, N=18, o sistema apresenta duas transições de fase: uma de primeira ordem no campo de carga (veja Figuras 5.13 e 5.14) e no spin (veja Figuras 5.15 e 5.16), da fase $FERRI$ a uma fase intermediária; e outra transição da fase intermediária à fase de $ODCF$ (veja Figuras 5.15 e 5.16). Para U=8t e N=18 o sistema apresenta só uma transição

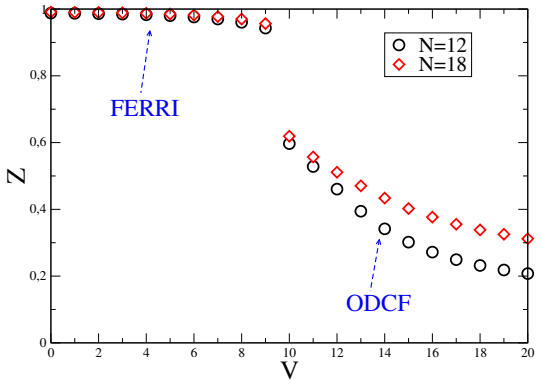

Figura 5.11: $\mid Z \mid$ em função de V, para U=40t. Observe que $\mid Z \mid$ aumenta quando o tamanho do sistema aumenta. Nas duas fases o sistema apresenta características de um isolante.

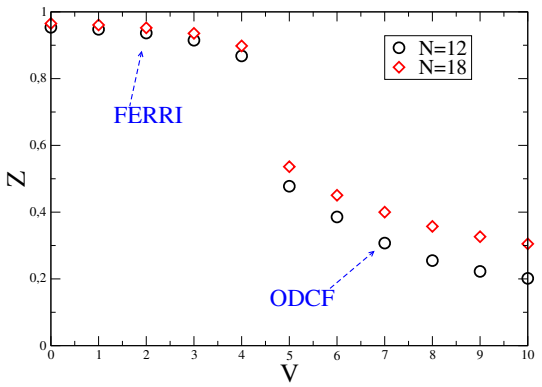

Figura 5.12: $\mid Z \mid$ em função de V, para U=20t. Observe que $\mid Z \mid$ aumenta quando o tamanho do sistema aumenta. Nas duas fases o sistema apresenta características de isolante.

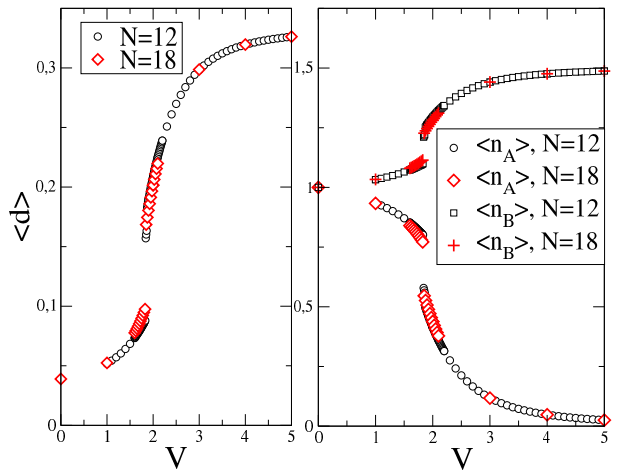

Figura 5.13: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=8t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é intermediário e a transição de primeira ordem no campo de carga no limite termodinâmico. Observe a diminuição da magnitude da descontinuidade de $< d >$ na transição quando U diminui.

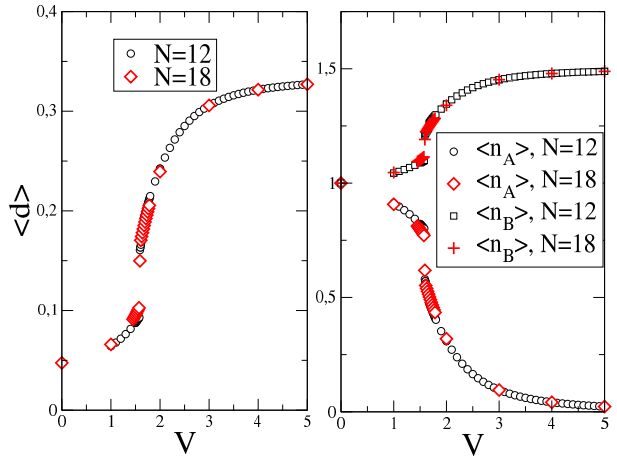

Figura 5.14: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=7t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é intermediário e a transição de primeira ordem no campo de carga no limite termodinâmico. Para este valor de U, a descontinuidade diminui ainda mais.

$FERRI$-$ODCF$ de primeira ordem no campo de carga.

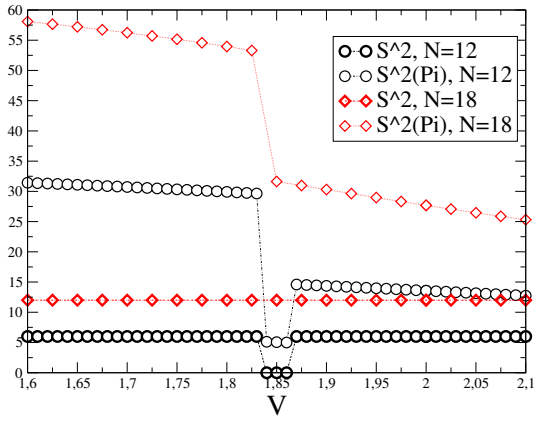

Figura 5.15: U=8t. Para N=12 o spin salta do valor de Lieb, na fase $FERRI$, a zero na fase intermediária; e de zero ao valor de Lieb na fase de $ODCF$. As duas transições são de primeira ordem no campo de spin. Para N=18 o sistema não apresenta esta transição no spin.

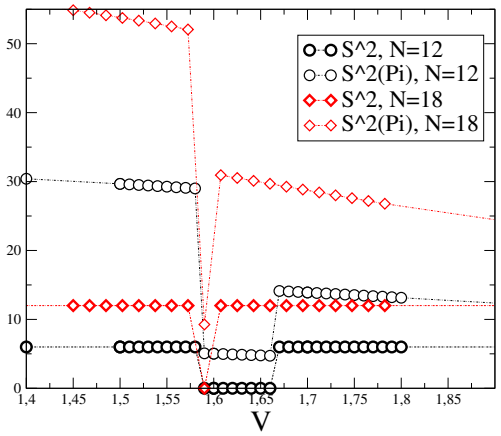

Figura 5.16: U=7t. Para N=12 e N=18 o spin salta do valor de Lieb na fase $FERRI$ a zero na fase intermediária, e de zero ao valor de Lieb na fase de $ODCF$. As duas transições são de primeira ordem no campo de spin. Entretanto, verificamos a forte tendência da não existência da fase intermediária no limite termodinâmico.

Podemos fazer uma análise da ocorrência da fase intermediária usando a mesma forma semi-quantitativa utilizada para a cadeia linear. Desta vez

analisamos a largura da fase, ΔV, no limite termodinâmico, para os diferentes regimes de interação coulombiana U (veja Figura 5.17). Na Figura 5.18 apresentamos ΔV em função de U. Podemos ver que, para U=8t e N=18, a fase intermediária já não existe. Para U=7t e N=18 a fase intermediária é muito pequena, quase zero. Para U=5t e U=4t a largura ΔV diminui de forma notável com o aumento do tamanho do sistema de N=12 a N=18. Para U=3t, U=2t, U=1t, a largura ΔV apresenta certa estabilidade com o aumento do tamanho do sistema. No limite termodinâmico espera-se que a fase intermediária feche em U $\approx$5t.

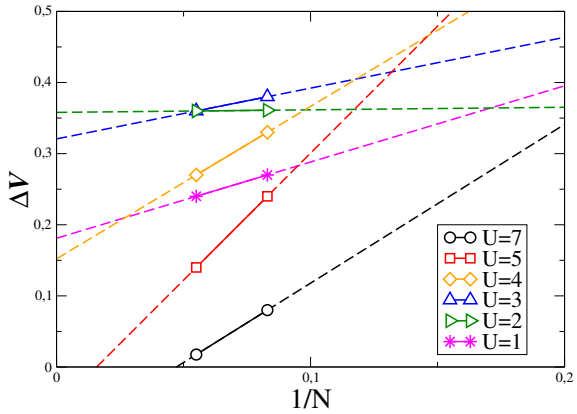

Figura 5.17: Largura da fase intermediária ΔV, para os diferentes regimes de interação coulombiana. Para U=7t e U=5t prevê-se que no limite termodinâmico esta fase não existe.

Para caracterizar a fase intermediária vamos apresentar na Figura 5.19 seu fator de estrutura magnético

$$S(q) = \frac{1}{N_c} \sum_{\ell m} < \vec{S}(\ell).\vec{S}(m) > exp(iq(\ell - m)), \tag{5.7}$$

onde q=$2\pi\ell/$N$_c$, ℓ=0.....N$_c$-1 e $\vec{S}(\ell)$ é o spin total da célula ℓ. Note que $S(q)$ apresenta um máximo em q=$2\pi/$N$_c$, indicando que a fase intermediária é do tipo *Espiral*. Para N$_c$ tendendo a infinito temos q=0. Logo, no limite termodinâmico esta fase poderá apresentar um momento magnético não nulo.

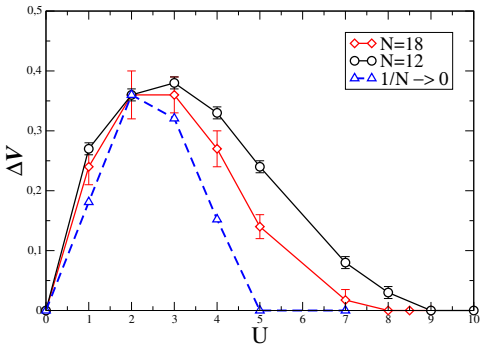

Figura 5.18: Ocorrência da fase intermediária em função de U. Prevê-se que para U$\gtrsim$5t esta fase já não exista no limite termodinâmico.

Doravante vamos chamar a fase intermediária de fase *Espiral*. Além disso, na fase *Espiral*, U=3t, e V=0.78, $\mid Z \mid \approx$0.34 para N=18, e $\mid Z \mid \approx$0.24 para N=12, sendo esta também uma fase isolante.

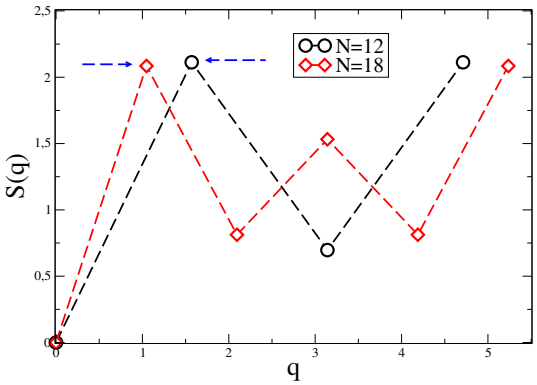

Figura 5.19: Fator de estrutura magnética na fase intermediária. O máximo da função em q=$2\pi/N_c$ mostra que a fase é do tipo *Espiral*.

Na Figura 5.20 apresentamos a dupla ocupação $< d >$ versus V para U=3t, na vizinhança do ponto V=U/4. Na transição de fase *FERRI-Espiral* $< d >$ é representada por uma função descontínua. Na transição *Espiral-ODCF*, $< d >$ apresenta uma pequena descontinuidade que diminui com o tamanho da rede.

Para evidenciar a ordem da transição *FERRI-Espiral* e *Espiral-ODCF* no campo de carga, novamente vamos adotar o critério semi-quantitativo usado para a cadeia linear. Analisamos a magnitude da descontinuidade da dupla ocupação, Δ<d>, no limite termodinâmico, para os diferentes valores de interação coulombiana U no regime fraco (veja Figuras 5.21 5.22). Esta análise semi-quantitativa sugere que, para estes valores de U, a transição de fase *FERRI-Espiral* é contínua no limite termodinâmico. A transição *Espiral-ODCF* preserva ainda pequena descontinuidade de <d> no limite termodinâmico. Logo, podemos sugerir que a transição *Espiral-ODCF* será de primeira ordem, embora a magnitude da descontinuidade e a quantidade de pontos usados na extrapolação faça desta sugestão o ponto inicial de um futuro debate

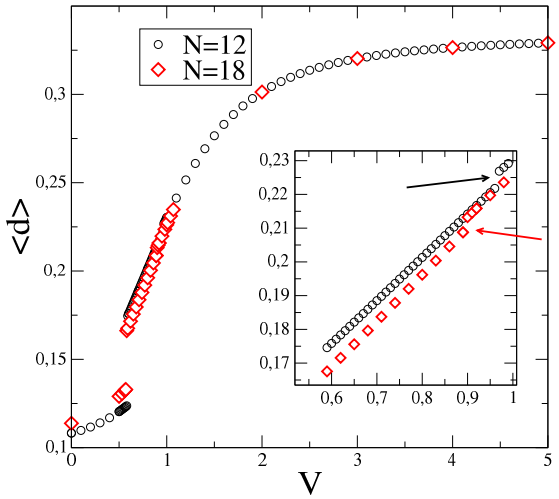

Figura 5.20: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=3t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é fraco. Sugerimos que, no limite termodinâmico, a transição *FERRI-Espiral* é contínua no campo de carga, enquanto a transição *Espiral-ODCF* é de primeira ordem. As pequenas descontinuidades são indicadas com setas, preta para N=12 e vermelha para N=18; veja que o tamanho da descontinuidade diminui quando tamanho da rede aumenta.

Para as transições no campo de spin veja a Figura 5.23. Observamos

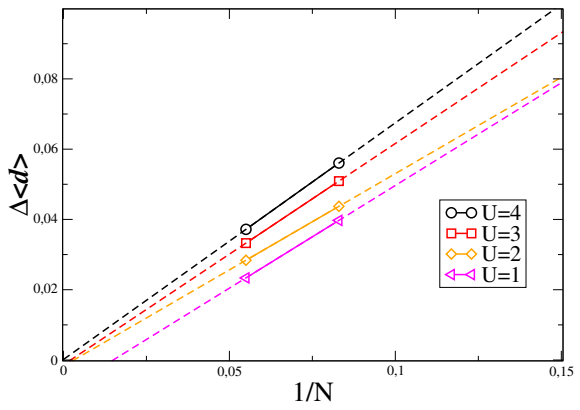

Figura 5.21: Descontinuidade Δ<d> na transição $FERRI$-$Espiral$. Vemos que para estes valores de U, Δ<d> é zero no limite termodinâmico. Prevê-se uma transição contínua no campo de carga.

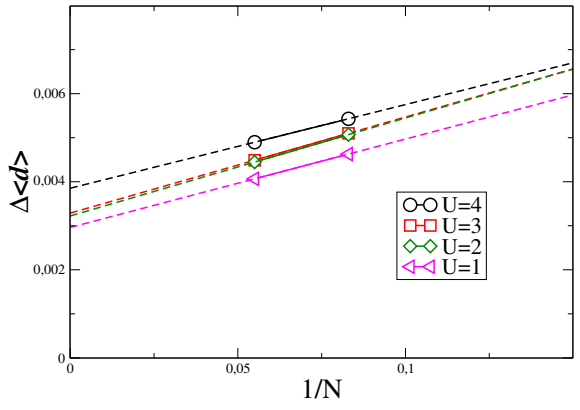

Figura 5.22: Descontinuidade Δ<d> na transição $Espiral$-$ODCF$. Vemos que para estes valores de U, Δ<d> é diferente de zero no limite termodinâmico. Prevê-se uma transição de primeira ordem no campo de carga.

que, para os dois tamanhos da cadeia, o spin salta do valor de Lieb a zero, na transição $FERRI$-$Espiral$, e de zero ao valor de Lieb novamente, na transição $Espiral$-$ODCF$. Estas duas transições são de primeira ordem pois não encontramos um spin intermediário entre o valor de Lieb e zero.

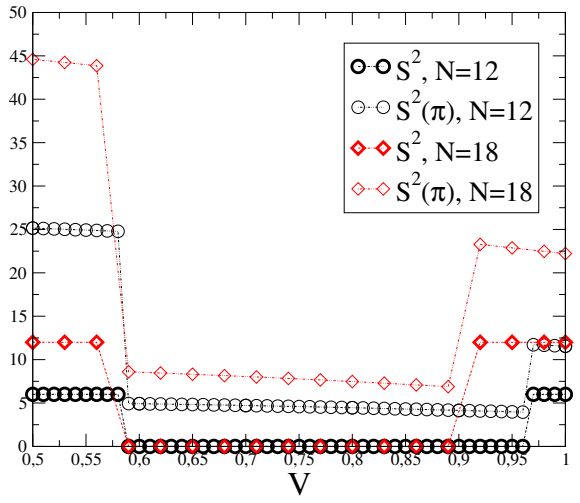

Figura 5.23: U=3t. N=12 e N=18. O spin salta do valor de Lieb na fase $FERRI$ a zero na fase $Espiral$, e de zero ao valor de Lieb na fase de $ODCF$. As duas transições são de primeira ordem no campo de spin.

Na Figura 5.24 apresentamos a dupla ocupação $< d >$ versus V para U=2t, na vizinhança do ponto V=U/4. Na transição de fase $FERRI$-$Espiral$, $< d >$ é representada por uma função descontínua, a magnitude da descontinuidade diminui com o tamanho da rede e com o valor de U. No limite termodinâmico prevê-se uma transição contínua no campo de carga. Na transição $Espiral$-$ODCF$, $< d >$ apresenta uma pequena descontinuidade, a qual diminui com o tamanho da rede e permanece quase constante com o valor de U. No limite termodinâmico nossa análise de tamanho finito sugere que a transição seja de primeira ordem.

As transições no campo de spin continuam sendo de primeira ordem, como é apresentado na Figura 5.25.

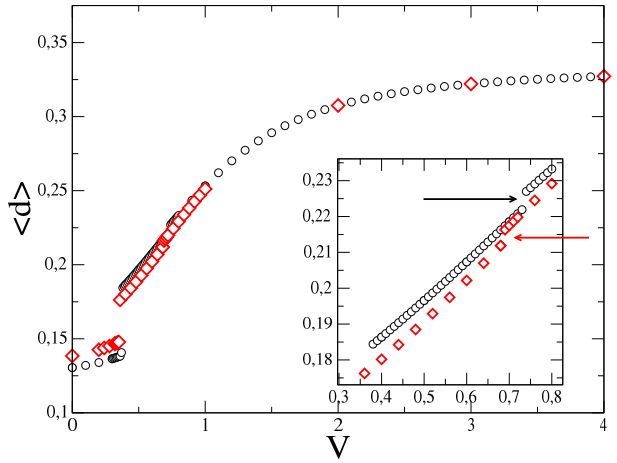

Figura 5.24: Dupla ocupação $< d >$ versus V para U=2t e N=12,18. O regime de acoplamento coulombiano é fraco. Sugerimos que, no limite termodinâmico, a transição *FERRI-Espiral* é contínua no campo de carga, enquanto a transição *Espiral-ODCF* é de primeira ordem. As pequenas descontinuidades são indicadas com setas, preta para N=12 e vermelha para N=18; veja que o tamanho da descontinuidade diminui quando tamanho da rede aumenta.

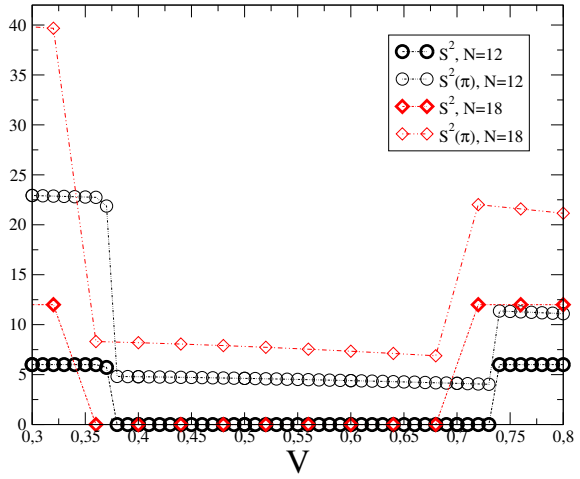

Figura 5.25: U=2t. N=12 e N=18. O spin salta do valor de Lieb na fase ferrimagnética a zero na fase *Espiral*, e de zero ao valor de Lieb na fase de ODCF. As duas transições são de primeira ordem no campo de spin.

Com os dados obtidos podemos finalmente apresentar nosso diagrama de fases no plano (U,V) (veja Figura 5.26). Veja a similitude deste diagrama com o diagrama de fases obtido para a cadeia linear na referência [22]. Com nosso estudo podemos sugerir que o ponto multicrítico está na região 4t≤U≤6t. É mais evidente a existência da fase intermediária em nosso sistema pois sofre uma transição de fase no campo de spin.

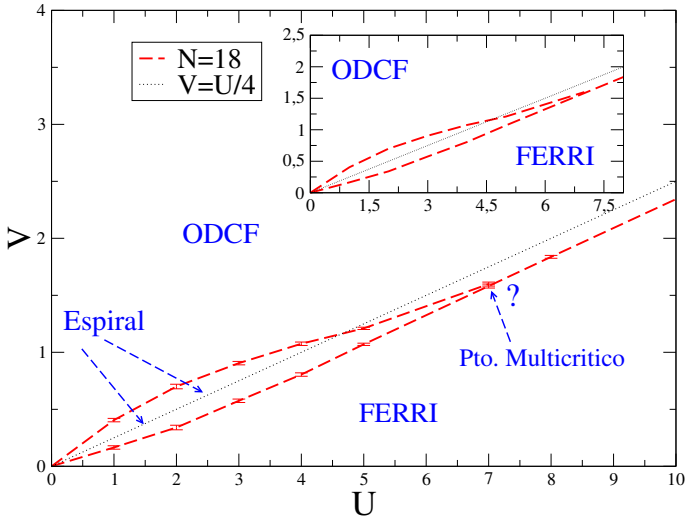

Figura 5.26: Diagrama de fases para a cadeia AB2, N=18. Na região V$\lesssim$ U/4 a cadeia apresenta uma fase $FERRI$. A fase magnética intermediária é $Espiral$, que se estende até U≈5t no limite termodinâmico. Para V$\gtrsim$ U/4 o sistema apresenta uma fase de *onda de densidade de carga* ($ODCF$). A natureza do ponto multicrítico dependerá da ordem da transição $Espiral$-$ODCF$.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho estudamos as propriedades magnéticas e de condução (fase metálica ou isolante) do estado fundamental da cadeia quântica AB2, com motivação experimental em polímeros ferrimagnéticos e *oxocuprates*, diagonalizando o hamiltoniano estendido de Hubbard nos diferentes regimes de interação coulombiana U.

Para U $\gtrsim$ 5t e V $\lesssim$ U/4, verificamos que o sistema está numa fase *ferrimagnética* ($FERRI$) com spin total 1/2 por célula unitária, carga homogeneamente distribuída em cada sub-rede, magnetizações locais $< S_A^z > \cong$ -0.25 e $< S_B^z > \cong$ 0.75 e gap de spin $\Delta_S \cong$ 1.76J, em concordância com o cálculo da Ref. [23] no limite Heisenberg, onde J=$4t^2$/U. Logo, para U=40t e U=20t, temos $\Delta_S \cong$ 0.176 e $\Delta_S \cong$ 0.352, respectivamente. Para analisar as propriedades de transporte de nosso sistema eletrônico estudamos a quantidade complexa Z. Na fase $FERRI$ $\mid Z \mid \approx$1 quando N aumenta, caracterizando uma fase isolante. Para V $\gtrsim$ U/4, o sistema se encontra em uma fase *onda de densidade de carga com ordem ferromagnética* ($ODCF$), com $< S_A^z > =$0 e $< S_B^z > =$0.5, exibindo um defeito na distribução de carga como consequência da quebra de simeria global de translação da cadeia. Nesta fase o *gap* de spin pode ser representado pela função linear $\Delta_S \cong$ 4V-U, como pode ser deduzido a partir de uma imagem intuitiva do estado fundamental. Para N=12 e N=18

a quantidade complexa $\mid Z \mid$ é $\gtrsim 0.25$, e cresce com N, indicando que o sistema é isolante. Para estes valores de U ($\gtrsim$ 5t), o estado fundamental apreseta uma transição de fase $FERRI$-$ODCF$ de primeira ordem no campo de carga, evidenciada pela descontinuídade do valor médio da dupla ocupação <d>.

Par U $\lesssim$ 5t, o sistema exibe uma fase intermediária com correlação magnética tipo $Espiral$. Neste regime o spin muda do valor 1/2 por célula unitária (Lieb) na fase $FERRI$, para zero na fase $Espiral$, e de zero ao valor 1/2 por célula unitária na fase $ODCF$. Nossa análise de escala de tamanho finito indica que as duas transições são de primeira ordem no campo de spin. Para U=3t e V=0.78, $\mid Z \mid \approx 0.34$ para N=18, e $\mid Z \mid \approx 0.24$ para N=12. Logo, a fase $Espiral$ também é uma fase isolante. No limite termodinâmico a transição $FERRI$-$Espiral$ é contínua no campo de carga e estimamos que a transição $Espiral$-$ODCF$ seja de primeira ordem, embora a magnitude da descontinuidade, Δ<d>, e a quantidade de pontos usados na extrapolação faça desta sugetão o ponto inicial de um futuro trabalho. Com nosso estudo podemos afirmar que o ponto multicritico situa-se na região 4t$\leq$U$\leq$6t e a sua natureza dependerá da ordem da transição $Espiral$-$ODCF$. Finalmente, salientamos que o diagrama de fases obtido para nosso sistema apresenta uma similitude não-trivial com o diagrama do modelo de Hubbard estendido da cadeia linear.

Apêndice A

O ALGORITMO DE LANCZOS

Faremos uma pequena referência ao algoritmo de Lanczos usado na diagonalização de nossas cadeias [4]. O algoritmo representa uma mudança de base para o hamiltoniano d-dimensional. Os novos estados serão representados por $\{|0>, |1>, |2> .....|d-1>\}$, gerados a partir do estado arbitrário $|0>$, com $<0|0>=1$. A base de H está formada pelos autoestados $\{|\epsilon_0>, |\epsilon_1>, |\epsilon_2> .....|\epsilon_d>\}$, com $\epsilon_0 < \epsilon_1 < \epsilon_2.....$ Nesta base,

$$|0>=\sum_i a_i|\epsilon_i> . \tag{A.1}$$

Para contornar o problema definimos:

$$|1>=\frac{1}{\beta_1}(H|0>+\alpha|0>), \tag{A.2}$$

com β_1 constante de normalização, e α fazendo com que

$$<1|1>=\frac{1}{|\beta_1|^2}(<H^2>_0+\alpha^2+2\alpha<H>_0) \tag{A.3}$$

seja mínimo, e com $< i|H^n|i >=< H^n >$. Derivando $< 1|1 >$ com respeito a α temos:

$$\begin{aligned} \alpha &= - < H >_0 = \alpha_0, \\ |1> &= \frac{1}{\beta_1}(H|0> - < H >_0 |0>), \\ |\beta_1|^2 &= < H^2 >_0 - \alpha_0^2. \end{aligned} \tag{A.4}$$

Se $\beta 1 \in \Re$, então $\beta 1 = \sqrt{< H >_0^2 - \alpha_0^2} = < 0|H|1 >$.

Continuando nosso processo de criar estados ortogonais, temos:

$$|2> = \frac{1}{\beta_2}(H|1> - \alpha|1> - \beta|0>). \tag{A.5}$$

Com a condição de que $< 2|2 >$ seja mínimo, obtemos:

$$\begin{aligned} \beta &= \beta_1, \\ \alpha &= < H >_1 = \alpha_1, \\ \beta_2 &= < 2|H|1 > . \end{aligned} \tag{A.6}$$

Se $\beta 2 \in \Re$, então:

$$|2> = \frac{1}{\beta_2}((H - < H >_1)|1> - \beta_1|0>). \tag{A.7}$$

Seguindo com o procedimento, $|3>$ vai ser:

$$|3> = \frac{1}{\beta_3}((H - < H >_2)|2> - \beta_2|1> + \gamma|0>). \tag{A.8}$$

Usando os resultados obtidos para os autovetores $|1>$ e $|2>$, e minimizando o produto $< 3|3 >$, podemos ver que γ=0. Então $|3>$ só será expandido em

termos de $|1>$ e $|2>$. Para o i-ésimo vetor, teremos a seguinte dependência:

$$|i>=\frac{1}{\beta_i}((H-\alpha_i)|i-1>-\beta_{i-2}), \tag{A.9}$$

com

$$\begin{aligned}\alpha_i &= <i|H|i>,\\ \beta_i &= <i-1|H|i>,\end{aligned} \tag{A.10}$$

terminando este processo quando todo o espaço de Hilbert seja coberto. Na base de lanczos, H terá a seguinte representação matricial tridiagonal:

$$\begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & ... & 0 \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & 0 & 0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & 0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 0 & \beta_3 & \alpha_3 & \beta 4 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 0 & 0 & ... & ... & ... & ... & 0 \end{pmatrix}$$

Na i-ésima interação, H terá uma representação tridiagonal de dimensão $i+1$ com um polinômio característico $P_i(x)$. A relação de recorrência para ditos polinômios é:

$$P_i(x)=(x-\alpha_i)P_{i-1}(x)-\beta_i^2 P_{i-2}(x). \tag{A.11}$$

Se no passo $i-1$ e $i-2$ a menor energia for igual, dentro da precisão desejada, quer dizer, $P_{i-1}(\epsilon_0)=0=P_{i-2}(\epsilon_0)$, então ϵ_0 também será a menor raiz de P_i e de todos os outros polinômios seguintes [18]. Assim, se estamos interessados no estado fundamental, é só gerar a base até que a menor energia da matriz nos últimos dois passos tenha convergido para um único valor. Usando os polinômios também podemos calcular os autoestados de H:

$$|i>=\frac{1}{\Pi_{k=0}^{i}\beta_k}P_i(H)|0>, \tag{A.12}$$

com $P_0(H)$=1, e

$$< \epsilon_j | i >= \frac{1}{\Pi_{k=0}^{i} \beta_k} P_i(\epsilon_j) < \epsilon j | 0 > \tag{A.13}$$

a componente do autoestado de energia ϵj na direção $|i>$. Teremos todas as componentes proporcionais a $< 0|\epsilon_j >$, ou seja, o estado não normalizado é:

$$|\epsilon_j >= \sum_{i=0}^{d-1} \frac{1}{\Pi_{k=0}^{i} \beta_k} P_i(\epsilon_j) |0> . \tag{A.14}$$

Se a energia converge no passo d_0, todos os polinômios com $i \geq d_0$ serão nulos. Portanto, quando a menor energia convergir, não precisamos de mais nenhum estado da base para sabermos o estado fundamental.

Apêndice B

SIMETRIA CARACTERÍSTICA DA CADEIA AB2

Como já vimos no capítulo 1, o hamiltoniano do modelo de Hubbard estendido comuta com os operadores {N_e, S^x, S^y, S^z e S^2}, para qualquer tipo de rede. Portanto podemos diagonalizar o hamiltoniano por subespaços com N_e e S^z fixos (como foi feito no capítulo 3). A grande dificuldade em se lidar com o modelo de Hubbard consiste no crescimento exponencial do espaço de Hilbert com o número de sítios do sistema, dimensão=4^N. Se diagonalizamos o hamiltoniano por blocos com N_e e S^z fixos, a dimensão do espaço de Hilbert será

$$dim(N_\uparrow, N_\downarrow) = \frac{(N!)^2}{N_\downarrow! N_\uparrow! (N - N_\uparrow)! (N - N_\downarrow)!}, \tag{B.1}$$

onde N_e=($N_\uparrow$+$N_\downarrow$) e S^z = ($N_\uparrow$ - $N_\downarrow$)/2. Para ρ=1 em um sistema com 18 sítios, teremos dim≈2,4x10^9, não existindo máquinas capazes de realizar essa diagonalização em um intervalo de tempo útil para nossos propósitos. Os resultados desta dissertação foram obtidos graças à utilização de uma simetria

local característica da cadeia AB2: invariância do hamiltoniano pela troca dos sítios B numa mesma célula. Essa operação de troca possui dois autovalores, +1 (sítios B com paridade par) e -1 (sítios B com paridade ímpar). Nós diagonalizamos o hamiltoniano por subespaços dos possíveis arranjos de paridade entre as células. No texto, denotamos um arranjo com m células de paridade par e N_c-m com paridade ímpar por $(+)^m(-)^{N_c-m}$. Além disso, alguns destes arranjos estão ligados através do operador de translação. Desta forma, só precisamos relizar o cálculo em um destes subespaços, visto que o hamiltoniano é translacionalmente invariante. A dimensão de cada um dos sub-espaços diagonalizados para N=18 é dim$\approx$20-40x10^6.

Bibliografia

[1] See, *e.g.*, J. Silvestre and R. Hoffman, Inorg. Chem. **24**, 4108, (1985); M. Drillon *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **128**, 83 (1993); J. Karpinski *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 3626 (1998); P. Horsch, M. Sofin, M. Mayr, and M. Jansen, Phys. Rev. Lett. **94**, 076403 (2005); H. Kikuchi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 227201 (2005).

[2] A. M. S. Macêdo, M. C. dos Santos, M. D. Coutinho-Filho e C. A. Macêdo, Phys. Rev. Lett.**74**, 1851 (1995).

[3] G. S. Tian and T. H. Lin, Phys. Rev. B **53**, 8196 (1996); G. Sierra, M. A. Mártin-Delgado, S. P. White, D. J. Scalapino, and J. Dukelsky, Phys. Rev. B **59**, 7973 (1999)

[4] C. Lanczos, J. Res. Natl. Bur. Stad.**45**, 255 (1950).

[5] F. C. Alcaraz and A. L. Malvezzi, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 767 (1997); E. P. Raposo and M. D. Coutinho-Filho, Phys. Rev. Lett. **78**, 4853 (1997); E. P. Raposo and M. D. Coutinho-Filho, Phys. Rev. B **59**, 14384 (1999); T. Nakanishi and S. Yamamoto, Phys. Rev. B **65**, 214418 (2002).

[6] C. Vitoriano, M. D. Coutinho-Filho, and E. P. Raposo, J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 9049 (2002); C. Vitoriano, F. B. de Brito, E. P. Raposo, and M. D. Coutinho-Filho, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **374**, 185 (2002).

[7] Hammermesh, M.,1962, *"Group Theory"* (Addison Wesley).

[8] W. Kohn, Phys. Rev. **133**, A 171 (1964)

[9] J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett.**53**, 2327 (1984).

[10] Sakurai, J.J.,1985, *"Modern quantum mechanics"* (Addison Wesley).

[11] Antônio Murilo Santos Macêdo, *"Correlação Eletrônica e Ordem Magnética em Aglomerados Atômicos"*, tese de Mestrado (UFPE), Junho 1990.

[12] J. W. Cannon, R. T. Scalettar, E. Frandkin, Phys. Rev. B. **44**, 5995 (1991).

[13] A.A. Aligia, G. Ortiz, Phys. Rev. Lett.**82**, 2560 (1999).

[14] R. Resta, S. Sorella, Phys. Rev. Lett.**82**, 370 (1999). M. Oshikawa, Phys. Rev. Lett.**90**, 236401 (2003) M. Oshikawa, Phys. Rev. Lett.**84**, 1535 (2000).

[15] H. Q. Lin, D. K. Campbell, R. T. Clay, Chinese Journal of Physics **38** (2000).

[16] M. Nakamura, Phys. Rev. B.**61**, 16377 (2000).

[17] M. Tsuchiizu and A. Furusaki, Phys. Rev. Lett.**88**, 056402 (2002).

[18] Renê Montenegro-Filho, *"Cadeias Quânticas Ferrimagnéticas"*,tese de Mestrado (UFPE), Agosto de 2002.

[19] P. Sengupta, A. W. Sandvik, D. K. Campbell, Phys. Rev. B.**65**, 155113 (2002).

[20] E. Jeckelmann, Phys. Rev. Lett.**89**, 236401 (2002).

[21] G. P. Zhang, Phys. Rev. B. **68**, 153101 (2003).

[22] A. W. Sandvik, L. Balentes, D. K. Campbell, Phys. Rev. Lett.**92**, 236401 (2004).

[23] R. R. Montenegro-Filho and M. D. Coutinho-Filho, Physica A (2005) e referências contidas.

Livros Grátis

(http://www.livrosgratis.com.br)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração
Baixar livros de Agronomia
Baixar livros de Arquitetura
Baixar livros de Artes
Baixar livros de Astronomia
Baixar livros de Biologia Geral
Baixar livros de Ciência da Computação
Baixar livros de Ciência da Informação
Baixar livros de Ciência Política
Baixar livros de Ciências da Saúde
Baixar livros de Comunicação
Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE
Baixar livros de Defesa civil
Baixar livros de Direito
Baixar livros de Direitos humanos
Baixar livros de Economia
Baixar livros de Economia Doméstica
Baixar livros de Educação
Baixar livros de Educação - Trânsito
Baixar livros de Educação Física
Baixar livros de Engenharia Aeroespacial
Baixar livros de Farmácia
Baixar livros de Filosofia
Baixar livros de Física
Baixar livros de Geociências
Baixar livros de Geografia
Baixar livros de História
Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura
Baixar livros de Literatura de Cordel
Baixar livros de Literatura Infantil
Baixar livros de Matemática
Baixar livros de Medicina
Baixar livros de Medicina Veterinária
Baixar livros de Meio Ambiente
Baixar livros de Meteorologia
Baixar Monografias e TCC
Baixar livros Multidisciplinar
Baixar livros de Música
Baixar livros de Psicologia
Baixar livros de Química
Baixar livros de Saúde Coletiva
Baixar livros de Serviço Social
Baixar livros de Sociologia
Baixar livros de Teologia
Baixar livros de Trabalho
Baixar livros de Turismo