UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO

INSTITUTO DE FÍSICA

TIRAS DE CARGA E SUPERCONDUTIVIDADE

Thiago Miranda Tunes

Orientadora: Prof. Dr^{a}. Thereza Cristina de Lacerda Paiva

Co-orientador : Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda

Fevereiro - 2009

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO

INSTITUTO DE FÍSICA

Tiras de Carga e supercondutividade

Thiago Miranda Tunes

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Mato Grosso como requisitos necessários a obtenção do título de Mestre em Física

Banca examinadora:

Drª. Thereza Cristina de Lacerda Paiva (Orientadora, UFRJ)

Dr. Alberto Sebastião de Arruda (Co-orientador, UFMT)

Dr. Marcello Barbosa da Silva Neto (Examinador externo, UFRJ)

Dr. Harold Sócrates Blas Achic (Examinador interno, UFMT)

Fevereiro - 2009

Não há saber mais ou saber menos, há saberes diferentes.

Dê-me Senhor agudeza para entender, capacidade para reter, método e faculdade para aprender, sutileza para interpretar, graça em abundância para falar. Dê-me Senhor acerto ao começar, direção ao progredir e perfeição ao concluir.

São Tomás de Aquino

Agradecimentos

Agradeço a todos que de forma direta ou indireta, contribuiram durante todo este trabalho, e em especial

- A Deus, por estar sempre ao meu lado.
- Aos meus pais, Elizabete Tunes e Anatanel Tunes, e meus irmãos, Diego Tunes e Jefferson Tunes, por sempre estarem ao meu lado, me apoiando com palavras de perseverança e incentivos.
- A minha avó, Alexandrina N. De Miranda (in memorian), pelo exemplo de pessoa, por ter sempre acreditado em mim, e estar sempre presente nas minhas decisões.
- A minha orientadora Thereza Paiva, e ao meu co-orientador Alberto Arruda, pela disponibilidade e paciência nos momentos de dúvidas, durante todo o trabalho.
- Ao professor Raimundo Rocha dos Santos, pela disponiblidade e paciência, pelas discussões e sugestões para o trabalho.
- Enfim, a todos colegas do mestrado.

Conteúdo

Lista de Figuras **vi**

Resumo **x**

Abstract **xii**

1 Introdução **1**

2 Cupratos supercondutores **3**

2.1 Introdução 3

2.2 Fenomenologia e estrutura dos cupratos 6

2.2.1 Dopagem por buracos 7

2.2.2 Dopagem por elétrons 10

2.3 Stripes 12

2.3.1 Modelagem de stripes 15

3 O Modelo **19**

3.1 Introdução 19

3.2 Hamiltoniana para uma banda 20

3.3 Casos limites do modelo 21

3.3.1 Limite não-interagente $U = 0$ 21

3.3.2 Limite de $U \gg t$ 22

4 Monte Carlo Quântico **24**

4.1 Cálculos preliminares 24

4.2 Simulação 28

4.3 Variáveis de interesse 29

5 Resultados **32**

5.1 Análise do magnetismo 33

5.2 Análise da supercondutividade 37

5.3 Análise das propriedades de transporte 43

6 Conclusões **52**

Bibliografia **54**

Lista de Figuras

2.1 Evolução cronológica dos cupratos supercondutores. Extraído da Ref. [4] 5

2.2 Reservatório de cargas. Extraída da Ref. [6] 6

2.3 Estrutura da Perovskita. As esferas vermelhas são átomos de oxigênio, e a azuis-escuras e as verdes-azuladas são cátions menores e maiores do metal, respectivamente. Extraída da Ref. [7] 8

2.4 Diagrama genérico dos cupratos supercondutores 9

2.5 Estrutura cristalina do $La_{2-x}Ba_xCuO_4$. Extraída da referência [6] 10

2.6 Diagrama da fases para $La_{2-x}Ba_xCuO_4$. Extraída da referência [6] 11

2.7 Estrutura cristalina $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$. Extraído da referência [6] 12

2.8 Diagrama de fase do $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ dopado por elétrons (à esquerda) com $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ dopado por buracos (à direita). Extraído da referência [11] 13

2.9 Figura esquemática de uma fase ordenada de stripes. As setas representam a ordem magnética dos spins e as regiões mais escurecidas a densidade de carga local. Extraída da referência [13] 14

2.10 Dependência da temperatura de transição com a densidade eletrônica por sítio n no, limite de $U/t = 0$ para diferentes valores da anisotropia. Tem-se que $t = 1$eV e T_c expressa em K. Extraído da referência [24], na qual n é a densidade de elétrons com uma determinada polarização de spin. 16

2.11 Dependência da temperatura de transição com a densidade eletrônica por sítio n no limite de $U/t \to \infty$ para diferentes valores de anisotropia. Extraído da referência [24] 17

3.1 Superfície de Fermi para uma rede bidimensional quadrada com hopping entre primeiros vizinhos. Os preenchimentos da banda correspondem a $\rho = 0.25$, 0.5,...,1.5 começando da superfície mais interna. Note que a superfície de Fermi sofre um encaixamento "*nesting*" na banda semi-cheia. Extraída da referência [34] 22

4.1 Representação esquemática das fatias temporais l , N é o tamanho linear da rede 26

5.1 Fator de estrutura magnético como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 1$. 33

5.2 Extrapolação para $S(\pi, \pi)$ para $U = 4$ e diferentes parâmetros anisotrópicos. Para cada r, a intersecção com o eixo vertical nos fornece a estimativa da magnetização da sub-rede a temperatura zero. 34

5.3 Fator de estrutura magnético como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$. 36
5.4 s-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 1$. 37
5.5 sx-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 1$. 38
5.6 d-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 1$. 39
5.7 s-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$. 40
5.8 sx-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$. 41
5.9 d-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$. 42
5.10 Extrapolação para s-wave para $U = 4$ e diferentes parâmetros anisotrópicos. Para cada r, a intersecção com o eixo vertical nos fornece a estimativa do do valor do gap supercondutor a temperatura zero. 43
5.11 Extrapolação para sx-wave para $U = 4$ e diferentes parâmetros anisotrópicos. Para cada r, a intersecção com o eixo vertical nos fornece a estimativa do do valor do gap supercondutor a temperatura zero. 44
5.12 Extrapolação para d-wave para $U = 4$ e diferentes parâmetros anisotrópicos. Para cada r, a intersecção com o eixo vertical nos fornece a estimativa do do valor do gap supercondutor a temperatura zero. 46
5.13 Condutividade como função da temperatura para $r = 1$ e $L = 10$. 47

5.14 Condutividade na direções x e y como função da temperatura para $L = 10$ e $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$ 50
5.15 Densidade de estados para uma partícula. 51
5.16 Densidade de estados no nível de Fermi como função da temperatura para $r = 1$, $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$, e $L = 10$. . . 51

Resumo

Tiras de carga e supercondutividade

Thiago Miranda Tunes

Orientadora: Thereza Cristina de Lacerda Paiva

Resumo da Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal de Mato - Grosso, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Física (M.Sc.).

Acredita-se que as tiras de carga (*stripes*) sejam um possível mecanismo que conduz à transição supercondutora nos cupratos. Neste trabalho consideramos o modelo de Hubbard repulsivo sobre uma rede quadrada, em que o hopping anisotrópico (i.e., $t_y = r\, t_x,\ r < 1$) favorece eletronicamente o movimento ao longo de uma direção. Uma análise de campo médio feita anteriormente para modelo encontrou para uma densidade eletrônica fixa, distante da banda semi-cheia, que a temperatura crítica supercondutora pode ser aumentada por até três ordens de grandeza; os raios de hopping considerados foram $r = 0.1$, 0.01 e 0.001. Através de simulação de Monte Carlo Quântico (QMC), investigamos diversas propriedades físicas do modelo, tais como o fator de estrutura magnético em $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$, o fator de estrutura para três diferentes estados de par (s-wave, d-wave e extended s-wave); examinamos também as propriedades de transporte, tais como o comportamento da condutividade (ao longo das direções x e y) e a densidade de estados no nível

de Fermi. Como uma primeira aproximação para o problema temos considerado somente o caso da banda semi-cheia, desta maneira não há problema do sinal no QMC. Calculamos as quantidades acima para tamanhos de rede que variam de $L = 18$ até 16, realizadas de maneira confiável através da análise de escala de tamanho finito para extrair o comportamento da magnetização da sub-rede e o gap supercondutor (ambos no estado fundamental, através da escala de Huse) com anisotropia. Examinamos também o caso isotrópico, $r = 1$, para comparação. Encontramos que o estado fundamental antiferromagnético presente no caso isotrópico ($r = 1$) não é mais a ordem dominante paras as anisotropias aqui consideradas, $r = 0.1$, 0.01 e 0.001; o gap supercondutor a temperatura zero desaparece em todos os casos, semelhante para o caso isotrópico. Enquanto que para $r = 1$ a condutividade é isotrópica, como deveria; encontramos que o hopping anisotrópico diminui a condutividade na direção favorecida (x); a densidade de estados no nível de Fermi segue padrões semelhantes.

Abstract

Charge stripes and superconductivity

Thiago Miranda Tunes

Advisor: Thereza Cristina de Lacerda Paiva

Abstract of Thesis presented to Programa de Pós-graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal de Mato - Grosso, as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Physics (M.Sc.)

Charge stripes are believed to be a possible mechanism driving the superconducting transition in the cuprates. In this work we consider a "striped" repulsive Hubbard model on a square lattice, in which anisotropic hopping (i.e., $t_y = r\,t_x,\ r < 1$) favours electronic motion along one direction. Previous mean-field analyses of the model found that for a fixed electronic density away from half filling the superconducting critical temperature could be enhanced up to three orders of magnitude; the hopping ratios considered there were $r = 0.1$, 0.01 and 0.001. By means of Quantum Monte Carlo (QMC) simulations, we investigate several physical properties of the model, such as the magnetic structure factor at $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$, the structure factor for three different pairing states (s-wave, d-wave, and extended-s-wave); we also examine transport properties, such as the temperature behaviour of both the conductivity (along x and y directions) and the density of states at the Fermi level. As a first approach to the problem, we have only considered the case

of a half-filled band; in this way, there are no "minus-sign problems" in QMC. We have calculated the above quantities for even lattice sizes ranging from $L = 8$ to 16, in order to perform reliable finite-size scaling analyses to extract the behaviour of the staggered magnetization and of the superconducting gap (both in the ground state, through the Huse scaling) with anisotropy; we have also examined the isotropic case, $r = 1$, for comparison. We have found that the antiferromagnetic ground state, present in the isotropic case ($r = 1$), is no longer the dominant one for the anisotropies considered here, $r = 0.1$, 0.01 and 0.001; the zero-temperature gap vanishes in all cases, similarly to the isotropic case. While for $r = 1$ the conductivity is isotropic, as it should, we have found that anisotropic hopping decreases the conductivity in the favoured direction (x) as well; the density of states at the Fermi level follows a similar pattern.

Capítulo 1

Introdução

Desde a descoberta da supercondutividade em altas temperaturas nos cupratos, diversas teorias têm sido propostas com a finalidade de explicar o fenômeno para temperaturas superiores às previstas pela teoria BCS [2]. Porém, a explicação deste fenômendo ainda é desconhecida. Sabe-se que os cupratos apresentam planos de cobre e oxigênio [6] (CuO_2) que, após serem dopados por elétrons ou buracos, passam a exibir uma fase supercondutora com alta temperatura crítica. Outro fator fundamental para o surgimento da supercondutividade é desempenhado pelas correlações eletrônicas via interação coulombiana.

Diversos modelos que levam em conta as correlações eletrônicas foram propostos, entre eles o modelo de Hubbard [25], proposto em 1963 com a finalidade de estudar elétrons correlacionados em bandas de energias estreitas. Neste modelo, os elétrons se movem entre os sítios da rede através do termo de hopping, e interagem entre si por meio de repulsão coulombiana, que tende a localizá-los. Portanto, há uma competição entre a itinerância e a localização. Uma das consequências importantes desta competição no caso repulsivo é a transição metal-isolante e o magnetismo.

Voltando à discussão sobre os cupratos, é sabido que em geral apresentam diagramas de fases semelhantes. Na ausência de dopagem, são isolantes e apresentam uma fase antiferromagnética, e, após serem dopados, esta fase desaparece, dando origem à fase supercondutora. Entre estas fases, tem-se indícios de uma fase ainda controvertida, denominada de *stripes* (tiras de cargas)[12, 13, 14, 15, 16]. As *stripes* são regiões com maior concentração de cargas, nas quais as correlações antiferromagnéticas são menores. A grande discussão é quanto aos efeitos causados por estas tiras de cargas nas propriedades supercondutoras, magnéticas e de transporte.

Neste contexto, motivados pelos resultados obtidos na Ref. [24], investigamos aqui os efeitos causados pelas *stripes* nas propriedades acima citadas, usando modelo de Hubbard, através do método de Monte Carlo Quântico [33, 34, 35, 36, 37, 40]. Por se tratar de uma primeira abordagem com este método, nos restringiremos aqui à banda semi-cheia. No capítulo 2 discutiremos as propriedades, estrutura e fenomenologia dos cupratos supercondutores, enquanto que no capítulo 3 trataremos o modelo de Hubbard repulsivo, e discutiremos alguns casos particulares. No capítulo 4 apresentamos o método de Monte Carlo Quântico e detalhes sobre a simulação realizada, e no capítulo 5 apresentamos nossos resultados e discutimos as propriedades supercondutoras, magnéticas e de transporte. Por fim, apresentamos nossas conclusões.

Capítulo 2

Cupratos supercondutores

2.1 Introdução

O fenômeno da supercondutividade foi observado pela primeira vez em 1911 por Kamerlingh Onnes [1], três anos depois da primeira liquefação do hélio. Onnes estudou a variação da resistência elétrica do mercúrio com a temperatura. Os resultados obtidos mostraram que a resistência elétrica desaparecia quando resfriado a 4K; ou seja, abaixo desta temperatura o mercúrio se tornava um supercondutor, permitindo a condução de corrente elétrica sem resistência e sem perdas. Em 1933, Walther Meissner e Robert Ochsenfeld, mostraram que um supercondutor submetido a um campo magnético externo era capaz de excluir o fluxo magnético de seu interior, desde que este não ultrapassasse um campo magnético crítico H_c, acima do qual a supercondutividade era destruída; esse fenômeno é conhecido como Efeito Meissner. Mas como explicar os mecânismos que levam à supercondutividade?

Em 1957, Bardeen, Cooper e Schrieffer (BCS) [2] propuseram uma teoria para explicar a supercondutividade. Esta teoria é baseada na abertura de

Fórmula química	T_c(K)
$HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+\delta}$	133
$Tl_2Ca_2Ba_2Cu_3O_{10}$	125
$YBa_2Cu_3O_7$	92
$Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$	89
$La_{2-x}Sr_xCaCuO_6$	60
$La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$	39
$Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_4$	24
$BaPb_{1-x}Bi_xO_3$	13

Tabela 2.1: Cupratos supercondutores com as respectivas temperaturas. Dados extraídos da referência [6]

um gap no espectro, eliminando estados que seriam acessíveis aos processos dissipativos, como espalhamentos por fônons e impurezas. O gap aparece devido à formação de estados ligados de pares de elétrons; a interação atrativa tem origem no fato de que a repulsão Coulombiana é blindada devido à interação entre os elétrons e os fônons. A interação via fônons impõe um limite nas temperaturas críticas da ordem de 30K. No entanto, em 1986, Alex Muller e George Bednorz, descobriram a supercondutividade em cerâmicas de óxidos de cobre (cupratos), mais especificamente no composto $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ que apresentava uma temperatura crítica acima de 30K [3].

Essa descoberta causou uma reviravolta no rumo da supercondutividade, uma vez que tal fenômeno se manifestou em um material que até então era considerado um isolante, isto é, um péssimo condutor; além disso, ninguém havia ponderado que tais materiais pudessem atingir uma temperatura crítica superior à dos metais. Como explicar o fato de alguns materiais possuírem uma temperatura superior a 30K?

Após a descoberta do primeiro cuprato supercondutor, começou uma corrida para explicar o fenômeno da supercondutividade em altas temperaturas, e descobrir novos materiais que apresentassem temperaturas críticas superiores às do $La_{2-x}Ba_xCuO_4$. Em 1988, foi a vez dos compostos BiCaSrCuO e TiCaBaCuO que eram supercondutores com temperaturas críticas de 110K e 135K, respectivamente. Em 1993, se deu a descoberta da supercondutividade num composto à base de Hg-Ca-Ba-CuO com T_c de aproximadamente de 135K. A tabela (2.1) exibe alguns cupratos supercondutores com suas respectivas temperaturas críticas. Na figura (2.1) mostramos a evolução cronológica da temperatura crítica.

Figura 2.1: Evolução cronológica dos cupratos supercondutores. Extraído da Ref. [4]

Ainda hoje não existe um consenso sobre uma teoria microscópica concreta que permita entender os mecanismos responsáveis pela supercondutividade em altas temperaturas (HTSC) [5, 6]. Sabe-se que este fenômeno está atrelado à forte correlação eletrônica, e que a supercondutividade ocorre nos planos de cobre e oxigênio que, quando dopados por elétrons ou buracos, passam a exibir uma fase supercondutora com alta temperatura crítica.

O fenômeno da HTCS tem atraído o interesse da comunidade científica, a fim de que sejam esclarecidos os mecanismos, de modo que os gargalos para aplicações tecnológicas possam ser resolvidos. A seguir discutiremos algumas propriedades básicas dos cupratos supercondutores, tais como estrutura, processo de dopagem, e a fase de *stripes*.

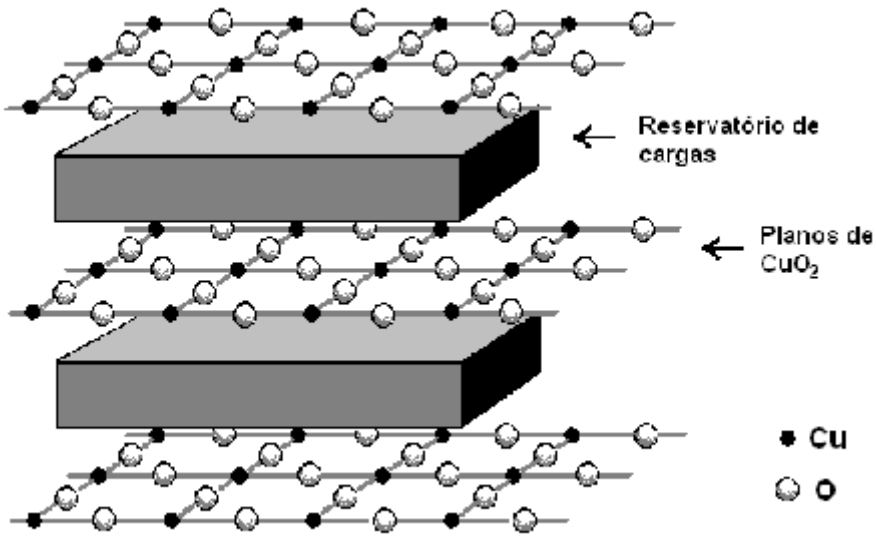

Figura 2.2: Reservatório de cargas. Extraída da Ref. [6]

2.2 Fenomenologia e estrutura dos cupratos

Os cupratos supercondutores possuem como característica estrutural principal a presença de planos de cobre e oxigênio (CuO_2), separados por camadas de outros átomos como Ba ou La, que cedem ou capturam cargas desses planos, atuando, portanto, como reservatórios de carga (ver figura 2.2). Os planos de CuO_2 possuem portadores de cargas móveis que são os responsáveis pela supercondutividade. A estrutura dos cupratos é similar à

estrutura da perovskita (ver figura 2.3), com geometrias, em geral tetragonal ou ortorrômbica, contendo os planos de CuO_2 normais à direção c.

Observa-se que a temperatura crítica destes materiais cresce com o número de planos de CuO_2. Por exemplo, $T1_2Ca_2Ba_2O_{10}$ com T_c relativamente alta, possui três planos de CuO_2.

A Fig. 2.4 mostra um diagrama de fases genérico para os cupratos supercondutores. Nela podemos observar que as propriedades são fortemente dependentes da concentração de carga. No regime de baixa dopagem, os cupratos apresentam ordem antiferromagnética, que cai acentuadamente com o aumento da concentração de cargas, passando por uma fase conhecida como *stripes*, e chegando a uma fase supercondutora.

O mecanismo de dopagem consiste em substituir átomos dos reservatórios de carga por outros, o que ocasiona a retirada ou a doação de elétrons aos planos de CuO_2. Quando retiramos elétrons desses planos, a dopagem é dita por buracos; por outro lado se doarmos elétrons para os planos de CuO_2, a dopagem é dita por elétrons.

A seguir discutiremos com mais detalhes o mecanismo de dopagem em dois cupratos.

2.2.1 Dopagem por buracos

A dopagem por buracos ocorre quando os reservatórios de cargas recebem novos átomos, acarretando na captura de elétrons dos planos de CuO_2, dessa forma criando vacâncias. A maioria dos cupratos supercondutores são dopados por buracos, sendo conhecidos por cupratos tipo-p. Entre os compostos que são dopados desse modo temos: $Sr_2CuO_2Cl_2$, $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+}$, $Bi_2Sr_2CuO_{6+}$, $Yba_2Cu_3O_{7-}$ e $La_{2-x}Ba_xCuO_4$. Para entender o mecanismo de dopagem por buracos, consideremos o $La_{2-x}Ba_xCuO_4$. Este cuprato pos-

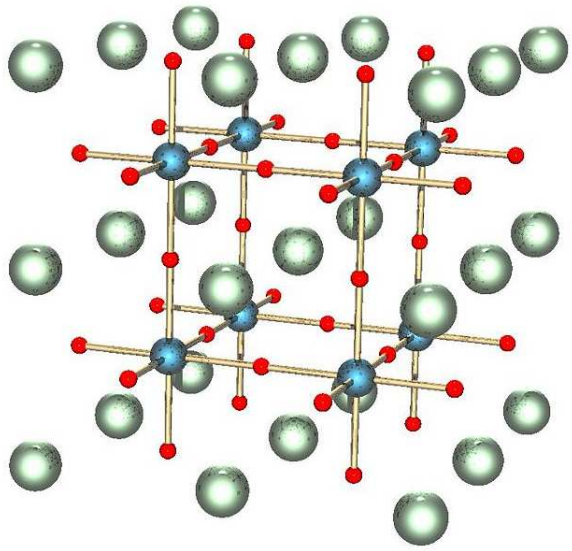

Figura 2.3: Estrutura da Perovskita. As esferas vermelhas são átomos de oxigênio, e a azuis-escuras e as verdes-azuladas são cátions menores e maiores do metal, respectivamente. Extraída da Ref. [7]

sui uma estrutura cristalina tetragonal com corpo centrado, como mostra a figura 2.5. No $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ os planos de CuO_2 estão separados por dois planos de LaO que formam o reservatório de carga responsável por capturar elétrons pela dopagem. Nos planos de CuO_2, cada átomo de cobre está cercado por seis átomos de oxigênio, quatro pertencentes a planos de CuO_2 e os dois restantes estão acima e abaixo do plano; estes átomos são conhecidos como oxigênios apicais.

Antes da dopagem, o cristal contém oxigênio em estado de valência O^{2-}, que recebeu dois elétrons, ficando, portanto, com a camada 2p completa. O Lantânio perde três elétrons e torna-se La^{3+}, ficando numa configuração

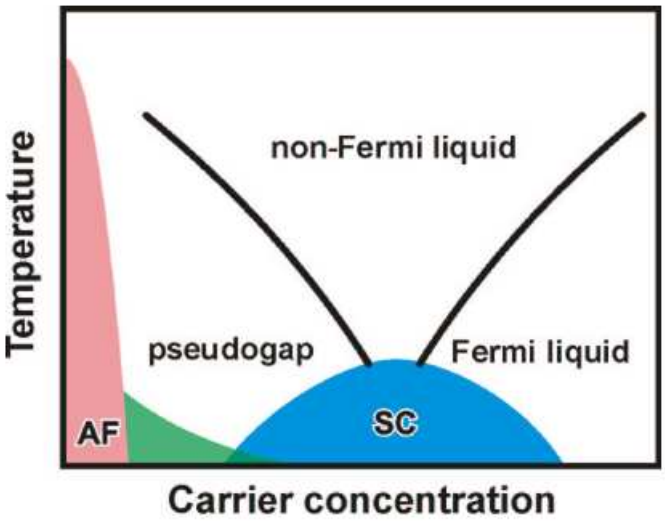

Figura 2.4: Diagrama genérico dos cupratos supercondutores

estável. Para manter a neutralidade, os átomos de cobre devem estar em um estado Cu^{2+}, e isso só será possível se houver uma perda de um elétron da camada 4s e um outro da camada 3d. Com a perda de dois elétrons, é criado um buraco na última camada e o cobre no estado Cu^{2+} passa a ter spin $\frac{1}{2}$. Com a dopagem, átomos de Lantânio (La^{3+}) são substituídos por átomos de Estrôncio (Sr^{2+}). Assim, para cada La^{3+} substituído por Sr^{2+} é retirado um elétron do plano de CuO_2, ficando um buraco em seu lugar.

Os elétrons retirados são oriundos dos átomos de oxigênio que, após perderem um elétron, mudam sua configuração eletrônica de O^{2-} para O^{-}, sendo criado um buraco em sua camada 2p. A figura 2.6 mostra o diagrama de fases para $La_{2-x}Ba_xCuO_4$. Nele podemos notar que, próximo a banda semi-cheia, o sistema apresenta ordem antiferromagnética. Quando aumentamos o teor de Sr, entre $x \sim 0,05$ e $x \sim 0,3$ a fase supercondutora aparece, apresentando uma temperatura crítica máxima em $x \sim 0,15$. Podemos observar ainda que este composto apresenta uma transição de fase estrutural,

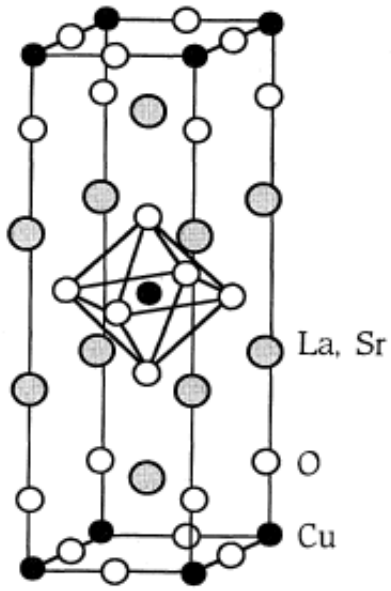

Figura 2.5: Estrutura cristalina do $La_{2-x}Ba_xCuO_4$. Extraída da referência [6]

passando da fase tetragonal (em altas temperaturas) para a fase ortorrômbica (em baixas temperaturas).

2.2.2 Dopagem por elétrons

A dopagem por elétrons ocorre quando os reservatórios de carga recebem novos átomos, ocasionando a introdução de elétrons nos planos de CuO_2. Os materiais dopados por elétrons são conhecidos como cupratos tipo n. Para entendermos o mecanismo da dopagem realizada por elétrons vamos considerar o caso do composto $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$. Ele possui uma estrutura cristalina tetragonal, assim como $La_{2-x}Ba_xCuO_4$, porém a diferença está na posição dos átomos de oxigênio no reservatório de carga, que são formados pelo Nd e o Ce.

No cristal, os átomos estão em estado de valência Cu^{2+}, O^- e Nd^{3+}. Após

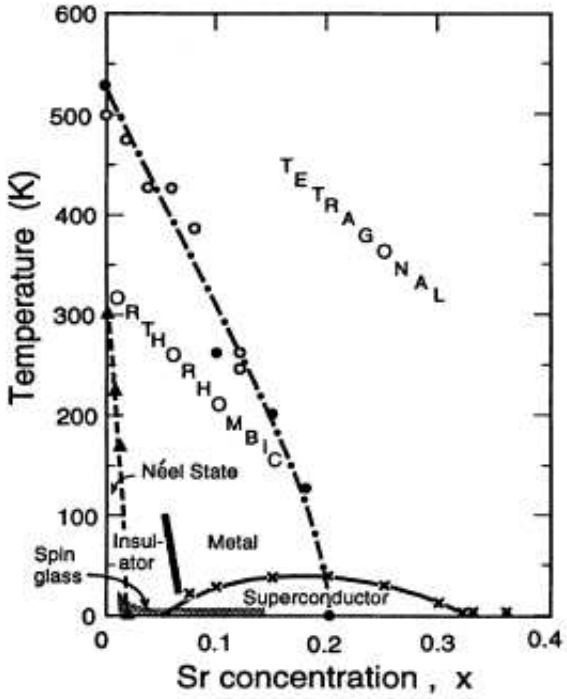

Figura 2.6: Diagrama da fases para $La_{2-x}Ba_xCuO_4$. Extraída da referência [6]

a dopagem com Nd^{3+} sendo substituídos Ce^{4+}, os planos de CuO_2 recebem um elétron. Como o oxigênio encontra-se com sua camada 2p completa, acredita-se que esse elétron ocupe o buraco na camada 3d do cobre, deixando-a totalmente preenchida e ainda eliminado o spin $\frac{1}{2}$ deixado pelo buraco.

O diagrama de fases do $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ é comparado com o cuprato $La_{2-x}Ba_xCuO_4$, dopado por buracos, na figura 2.8. Podemos notar que o $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ não- dopado ($x = 0$) é um isolante de Mott [8, 9], sendo bem descrito pelo modelo de Heisenberg [10]. De $x \sim 0$ até $x \sim 0,12$ o material exibe ordem antiferromagnética. Perto de $x \sim 0,12$ o antiferromagnetismo desaparece e uma fase supercondutora é observada entre $x \sim 0,12$ e $x \sim 0,20$, com uma temperatura crítica máxima de aproximadamente 24K.

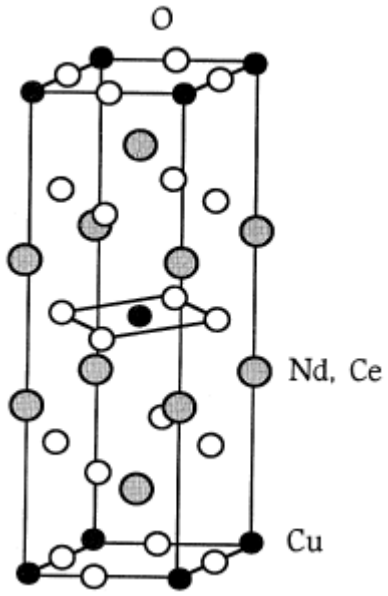

Figura 2.7: Estrutura cristalina $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$. Extraído da referência [6]

2.3 Stripes

Na figura 2.4 podemos observar que entre as fases antiferromagnética e a supercondutora há indícios de uma fase intermediária, caracterizada pela existência de regiões microscópicas com maior concentração de carga, nas quais as correlações antiferromagnéticas (AFM) são mais fracas, ao mesmo tempo em que regiões com menor concentração de carga correspondem a correlações AFM mais fortes. A fig. 2.9 ilustra esta estrutura, à qual se dá o nome de listras (*stripes*) [12, 13, 14, 15, 16].

As stripes geralmente se desenvolvem nas vizinhanças de regiões antiferromagnéticas [12] isolantes a baixas dopagens onde a temperatura é relativamente baixa, e parecem desaparecer em temperaturas altas. A fase de stripes aparece como um compromisso entre interação coulombiana entre as cargas [13], que favorecem elétrons localizados, e a energia cinética de ponto zero dos buracos, que tendem a deslocalizar as cargas. São instáveis devido

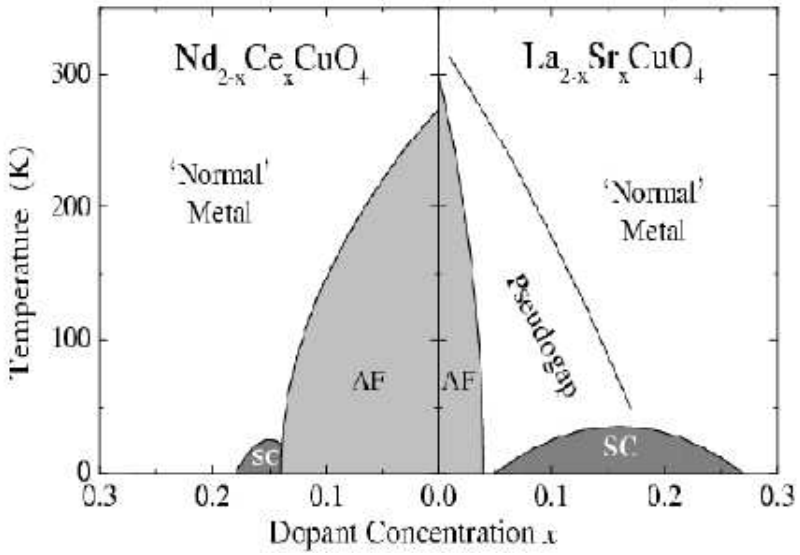

Figura 2.8: Diagrama de fase do $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ dopado por elétrons (à esquerda) com $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ dopado por buracos (à direita). Extraído da referência [11]

a flutuações quânticas, as quais, em uma dimensão, implicam na separação de spin e carga.

Experimentalmente elas são mais claramente observadas em materiais isolantes onde o ordenamento das stripes é relativamente estático. Porém, há evidências de correlações de stripes em compostos metálicos e em materiais supercondutores [12]. Ainda há dúvidas sobre as origens microscópicas da formação das stripes.

A mais direta evidência da fase de stripes em antiferromagnetos dopados vem de estudos de espalhamento de neutrons [17, 18], nos quais modulações de carga e spin são identificadas. Foi daí que surgiram as primeiras indicações de modulações de densidade de spin de longo período no cuprato supercondutor $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ [19]. Mais recentemente, experimentos nesse cuprato têm mostrado que o ordenamento das stripes ocorre para dopagens

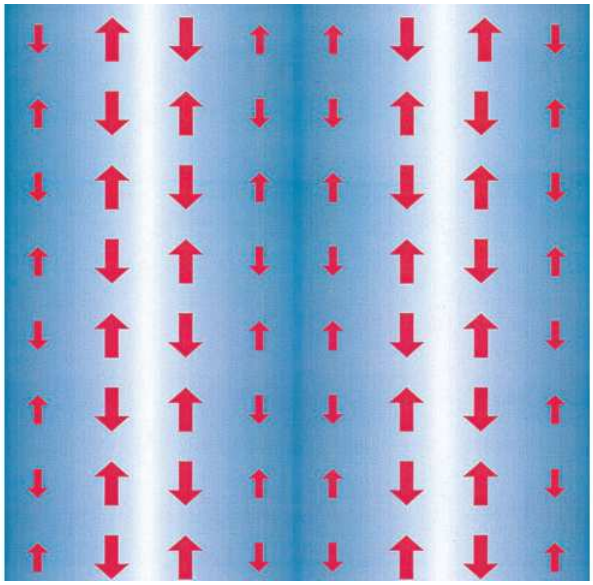

Figura 2.9: Figura esquemática de uma fase ordenada de stripes. As setas representam a ordem magnética dos spins e as regiões mais escurecidas a densidade de carga local. Extraída da referência [13]

acima de $x \sim 1/2$, e com ordenamento com temperatura máxima ocorrendo em $x \sim 1/3$. Entretanto cristais suficientementes grandes não podem ser avaliados por espalhamento e outros métodos são usados para investigar a ordem local, tais como: ressonância magnética nuclear (NMR), ressonânica nuclear quadrupolar (NQR), microscopia eletrônica de transmissão (TEM) e espectroscopia de fotoemissão (ARPES). É de grande relevância salientar que o ordenamento de carga é sempre observado em temperaturas superiores às do ordenamento magnético, o que é uma característica de transição induzida pela carga. É importante ainda notar que o período do ordenamento de carga é geralmente dependente da temperatura, implicando que a concentração de buracos ao longo de cada stripe varie com a temperatura; isto caracteriza estruturas que apresentam interações competitivas. Tais observações são consistentes com a idéia de que as stripes decorrem de competições entre a

tendência à formação de aglomerados de buracos e a interação coulombiana de longo alcance.

2.3.1 Modelagem de stripes

Como já foi dito, a fase de stripes que aparece nos cupratos supercondutores de alta temperatura crítica é ainda muito controvertida. Uma questão importante é determinar a relação de causa e efeito entre stripes e o mecanismo da supercondutividade: a presença das stripes favorece ou impede a instabilidade de emparelhamento que leva à supercondutividade?

Nesse contexto, diversos estudos tentam modelar, ou imitar, os aspectos das stripes. Na Ref. [20] é usado o modelo $t - J$ com um potencial sobre cada sítio representando o mecanismo externo das stripes. Os resultados obtidos através de simulações de Monte Carlo Quântico mostram que as correlações buraco-buraco ao longo e perto das stripes levam a um comportamento metálico devido a atração entre os buracos; esta atração é aumentada no modelo $t - J_z$ com respeito ao modelo isotrópico.

Outros trabalhos [21, 22, 23] também realizam estudos no modelo $t - J$ apresentando resultados interessantes, possivelmente provocados pelas stripes. Estas são impostas através de uma Hamiltoniana com hopping anisotrópico, isto é, as cargas são forçadas a se moverem mais facilmente ao longo de direções preferenciais, criando, assim, rios de carga. A imposição de uma direção preferencial reduz a mobilidade perpendicular das cargas podendo favorecer o aparecimento de regiões correlacionadas antiferromagneticamente.

De fato, em [24] é usado uma hamiltoniana $t - J - U$ da forma

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j\rangle\sigma} t_{i,j}(c^{\dagger}_{i,\sigma}c_{j,\sigma} + H.c) + \sum_{\langle i,j\rangle} J_{i,j}\left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4}n_i n_j\right) + U\sum_i n_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow} \quad (2.1)$$

onde $t_{i,j}$ e $J_{i,j}$ são as integrais de hopping e de exchange respectivamente, que

são diferentes de zero somente para sítios primeiros vizinhos. Para imitar a correlação de stripes, as cargas são forçadas a se moverem em uma direção preferencial, através de um parâmetro de anisotropia

$$r = \frac{t_y}{t}, \quad t_x \equiv t \tag{2.2}$$

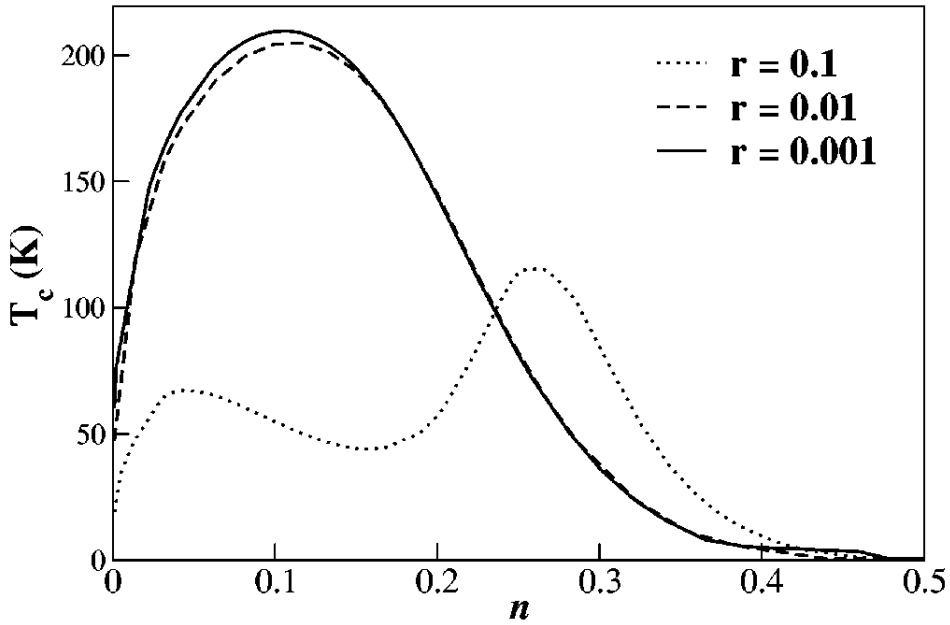

Figura 2.10: Dependência da temperatura de transição com a densidade eletrônica por sítio n no, limite de $U/t = 0$ para diferentes valores da anisotropia. Tem-se que $t = 1$eV e T_c expressa em K. Extraído da referência [24], na qual n é a densidade de elétrons com uma determinada polarização de spin.

Para investigar a temperatura de transição da fase supercondutora é usada uma teoria de campo médio, onde T_c é identificada através do critério não-auto-consistente de Thouless, na aproximação de ladder [24].

A figura 2.10 mostra a previsão para a temperatura de transição supercondutora, T_c, como função da densidade eletrônica, para diferentes valores de anisotropia, no regime de $U/t = 0$ onde $t = 1$eV, permitindo expressar T_c em K. Como podemos observar, para baixas densidades, T_c aumenta à medida que a anisotropia aumenta. Logo a presença de stripes parece favorecer a supercondutividade no regime de baixa densidade eletrônica. Nota-se que, na banda semi-cheia ($n = 0.5$, na notação da Ref. [24]), T_c se anula.

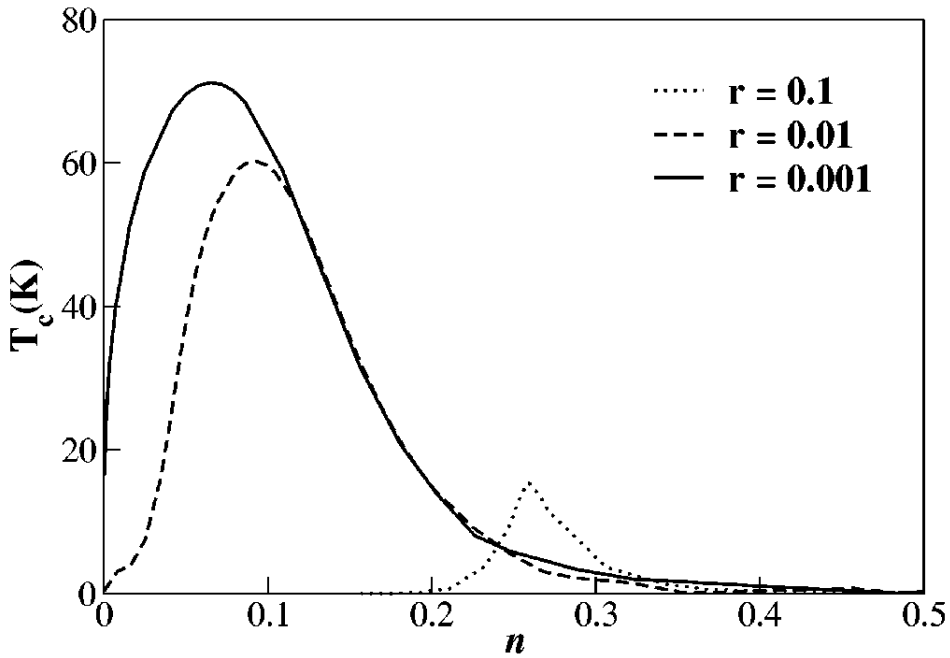

Figura 2.11: Dependência da temperatura de transição com a densidade eletrônica por sítio n no limite de $U/t \to \infty$ para diferentes valores de anisotropia. Extraído da referência [24]

Na figura 2.11 são mostrados resultados análogos aos da figura 2.10, porém no limite de $U/t \to \infty$, no qual a dupla ocupação fica excluída. Para uma densidade eletrônica $n = 0.08$ (ou $n = 0,16$ ver nossa definição) elétrons

por sítio, T_c é de aproximadamente 70K para $r = 0.001$, o que é bem maior que a $T_c = 0.08$K prevista para o caso isotrópico. Portanto, com a inserção da anisotropia (que tenta imitar as stripes) T_c é aumentada por um fator de 1000. Logo, a presença de stripes favorece a supercondutividade nessa abordagem realizada via campo médio.

A questão que se coloca, portanto, é saber se esta previsão de robustez da fase supercondutora é um efeito real. Isto é, se apesar das fortes flutuações que ocorrem em sistemas de baixa dimensionalidade, a presença destes rios de carga favorece a supercondutividade.

Assim o objetivo deste trabalho é estudar a influência destes rios de carga nas propriedades magnéticas, supercondutoras e de transporte. Para este fim adotamos o modelo de Hubbard com anisotropia no hopping, motivado pelos resultados da Ref. [24]. Dado que este hopping anisotrópico deve também alterar os arranjos magnéticos relativos ao caso isotrópico, faremos também um estudo do antiferromagnetismo, além das propriedades supercondutoras

Capítulo 3

O Modelo

3.1 Introdução

Em 1963, J. Hubbard propôs um modelo para explicar a transição metal-isolante levando em conta os efeitos de correlação em bandas de energia estreitas, considerando somente uma banda s [25]. Este modelo é muito usado, já que nos permite compreender como a interação eletrônica é capaz de dar origens a comportamentos isolantes, condutores e supercondutores. Diversas versões desse modelo foram propostas, tais como: modelo de Hubbard de três bandas, Hubbard estendido, Bose-Hubbard, etc.

Atualmente o modelo também vem sendo utilizado para descrever as propriedades magnéticas e supercondutoras em átomos frios [26], redes ópticas [27] e em redes triangulares [28] ou honeycomb [29].

3.2 Hamiltoniana para uma banda

A Hamiltoniana proposta inicialmente por Hubbard para uma banda é dada por:

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij}(c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma} + h.c.) + U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} - \mu\sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \tag{3.1}$$

onde $\langle i,j \rangle$ restringe a soma a pares de sítios vizinhos, $n_{i\sigma} = c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma}$ é o operador número de partículas, $c^{\dagger}_{i\sigma}$ é o operador de criação que cria um elétron num sítio i com spin σ da rede, e $c_{j\sigma}$ o operador de destruição que destrói um elétron no sítio j com spin σ.

O primeiro termo da Hamiltoniana representa a energia cinética, onde t_{ij} é o termo de hopping que transfere elétrons entre os sítios, isto é, $t_{ij} > 0$ favorece a deslocalização dos elétrons. Na segunda parte da Hamiltoniana aparece o acoplamento entre elétrons situados sobre um mesmo orbital; este termo favorece a localização dos elétrons para $U > 0$. A origem desta interação entre dois elétrons está na repulsão coulombiana [25]

$$\begin{aligned} \langle i,j|1/r|k,l\rangle = \; & e^2 \int \phi^*(\mathbf{x}-\mathbf{R_i})\phi(\mathbf{x}-\mathbf{R_k})\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \times \\ & \times \; \phi^*(\mathbf{x}'-\mathbf{R}_j)\phi(\mathbf{x}'-\mathbf{R}_l)d\mathbf{x}d\mathbf{x}' \end{aligned} \tag{3.2}$$

onde $\vec{x}$ e $\vec{x'}$ são posições referentes aos elétrons e $\vec{R}_i$ as posições dos sítios; e ϕ são funções de Wannier.

A repulsão coulombiana entre elétrons no mesmo sítio fornece

$$U = \langle i,i|\, 1/r \,|i,i\rangle > 0 \tag{3.3}$$

e termos de alcance mais longo não serão levados em conta aqui.

Apesar da aparente simplicidade do modelo, só há solução exata para uma dimensão, de modo que alguma aproximação deve ser feita para que se extraia grandezas físicas relevantes em dimensões maiores.

3.3 Casos limites do modelo

3.3.1 Limite não-interagente $U = 0$

Um caso limite trivial do modelo de Hubbard é quando os elétrons não interagem entre si ($U = 0$). Nesse limite a Hamiltoniana (3.1) é diagonalizável através de uma transformada de Fourier

$$\mathcal{H} = \sum_k \epsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} \tag{3.4}$$

com

$$\epsilon_k = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) \tag{3.5}$$

onde a é o parâmetro de rede. Utilizando condições de contornos periódicas para uma rede finita de N sítios, o momento k assume valores discretos

$$k_{x,y} = \frac{2\pi}{N_{x,y}} n_{x,y} \tag{3.6}$$

onde

$$\frac{-N_{x,y}}{2} \leq n_{x,y} \leq \frac{N_{x,y}}{2} \tag{3.7}$$

A figura (3.1) mostra o gráfico da superfície de Fermi para diferentes preenchimentos de bandas. Podemos observar que, para uma rede quadrada com uma partícula por sítio (banda-semi cheia), a superfície de Fermi sofre um encaixamento (*nesting*). Isto é, o vetor de onda da rede recíproca $[\pi/a, \pi/a]$ ou $[-\pi/a, \pi/a]$ mapeia uma seção inteira da superfície de Fermi sobre a outra.

Uma propriedade da Eq.(3.5) é o fato de podermos, na banda semi-cheia, tomar um ponto sobre a superfície de Fermi e transformamos em outro ponto sobre a mesma superfície, isto é

$$\epsilon(K + Q) = \epsilon_K \tag{3.8}$$

Essa propriedade está relacionada com o encaixamento que a superfície sofre.

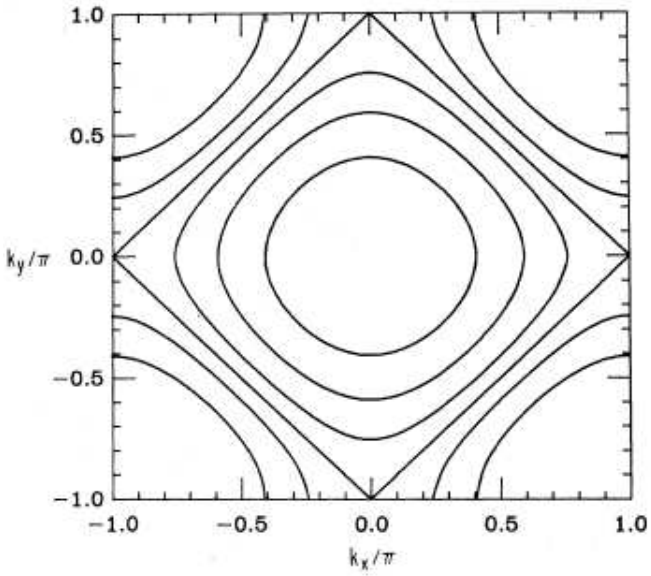

Figura 3.1: Superfície de Fermi para uma rede bidimensional quadrada com hopping entre primeiros vizinhos. Os preenchimentos da banda correspondem a $\rho = 0.25$, 0.5,...,1.5 começando da superfície mais interna. Note que a superfície de Fermi sofre um encaixamento "*nesting*" na banda semi-cheia. Extraída da referência [34]

3.3.2 Limite de $U \gg t$

A Hamiltoniana de Hubbard expressa uma competição entre a interação coulombiana intrasítio e a transferência de carga através do termo de hopping t. Para o caso da banda semi-cheia, $\rho = N_e/N = 1$; isto é, em média, cada sítio possui somente um elétron; no limite de $U >> t$, a dupla ocupação é proibida ($U \to \infty$) impondo a condição de um elétron por sítio. No entanto, um elétron pode minimizar o custo de energético de dupla ocupação realizando um "hopping virtual" para o sítio vizinho, retornando em seguida, desde que o elétron vizinho tenha um spin antiparalelo.

Assim, o hopping virtual favorece uma orientação relativa antiparalela

entre os spins dos elétrons envolvidos, favorecendo a fase antiferromagnética, como nos cupratos supercondutores. Para o caso em que a repulsão é muito grande quando comparada com o hopping, na banda semi-cheia temos um isolante de Mott. O modelo de Hubbard nesse limite se reduz ao modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin $\frac{1}{2}$ [10] ,

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \tag{3.9}$$

onde $\mathbf{S}$ são operadores de spin e a interação de exchange é

$$J = \frac{4t^2}{|U|} \tag{3.10}$$

Capítulo 4

Monte Carlo Quântico

As aproximações de campo médio não fornecem uma boa descrição de sistemas de baixa dimensionalidade. Uma alternativa consiste de cálculos numéricos, dentre os quais destacam-se as simulações de Monte Carlo para sistemas Quânticos (QMC), que têm mostrado serem ótimas ferramentas para extrair informações sobre férmions fortemente correlacionados, tanto do ponto de vista quantitativo como qualitativo. Há várias implementações de QMC, que são discutidas nas referências [31, 32], mas nos concentraremos aqui na formulação via determinantes fermiônicos [33, 34, 35, 36, 37, 40].

4.1 Cálculos preliminares

Nesse trabalho usaremos um algoritmo aplicando no modelo de Hubbard [25] definido pela hamiltoniana no ensemble gran-canônico como:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \tag{4.1}$$

Uma grande dificuldade de implementar o método se deve ao fato de alguns termos da hamiltoniana acima não comutarem entre si, como o termo de hopping e o de interação.

A função de partição é dada por

$$Z = \mathcal{T}re^{-\beta\mathcal{H}} \tag{4.2}$$

onde o traço soma sobre todos os graus de liberdade do sistema. A função de partição nos possibilita obter as informações do sistema estudado. Para contornar o obstáculo imposto pelo fato de alguns termos da hamiltoniana não comutarem, usaremos a fórmula de Suzuki-Trotter [38] definida no limite $\Delta\tau \to 0$ como

$$e^{(A+B)} = \lim_{\Delta\tau\to 0}(\mathrm{e}^{\Delta\tau\mathrm{A}}\mathrm{e}^{\Delta\tau\mathrm{B}})^{\frac{1}{\Delta\tau}} \tag{4.3}$$

$$= e^{\Delta\tau A}e^{\Delta\tau B} + O[(\Delta\tau)^2][A,B] \tag{4.4}$$

onde A e B são operadores

Essa equação introduz o parâmetro $\Delta\tau$ que é a largura da "fatia temporal", relacionado com a temperatura através de $\beta = \Delta\tau M$, onde M é o número de fatias temporais. Logo, para uma dada temperatura, quanto menor for $\Delta\tau$, maior será o número de fatias temporais, donde mais demorada será a simulação. Este desacoplamento introduz erros sistemáticos da ordem de $\Delta\tau^2$.

Portanto, aplicando na hamiltoniana temos que

$$e^{\Delta\tau(K+V)} = e^{\Delta\tau K}e^{\Delta\tau V} \tag{4.5}$$

onde

$$K = -t\sum_{\langle i,j\rangle} c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma} - \mu\sum_{i}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \tag{4.6}$$

e

$$V = U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \tag{4.7}$$

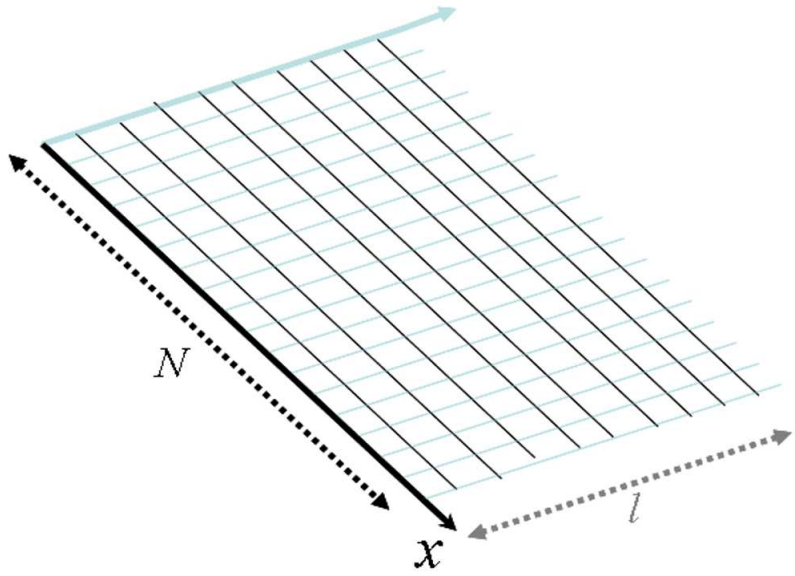

Figura 4.1: Representação esquemática das fatias temporais l , N é o tamanho linear da rede

A eliminação dos graus de liberdade fermiônicos só pode ser feita nos casos em que $\mathcal{H}$ contém termos bilineares. Como o termo de interação é quártico, para transformá-lo em bilinear, usamos a transformação de Hubbard-Stratonovich [39], dada por

$$e^{\frac{1}{2}A^2} = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dx \;\; e^{-\frac{1}{2}x^2 - xA} \tag{4.8}$$

onde A é um operador. O desacoplamento é feito introduzindo um campo auxiliar x. Se usarmos algumas identidades relacionadas com a magnetização local, $m \equiv n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}$ e a carga local, $n \equiv n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$, e trabalharmos com variáveis discretas de Ising, $s = \pm 1$ obtemos o termo de interação na forma [40]

$$e^{-U\Delta\tau n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} e^{-(\sigma s \lambda + \frac{U\Delta\tau}{2}) n\sigma} \tag{4.9}$$

onde $\cosh\lambda = e^{|U|\Delta\tau/2}$.

Logo, a função de partição pode ser escrita como

$$Z = \left(\frac{1}{2}\right)^{L^d M} \mathcal{T}r_s \prod_{l=M}^{1} \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} e^{-\Delta\tau \sum_{i,j} c^\dagger_{i\sigma} K_{i,j} c_{j\sigma}} e^{-\Delta\tau \sum_i c^\dagger_{i\sigma} V_i^\sigma(l) c_{i\sigma}} \tag{4.10}$$

onde o traço é feito sobre todos os campos de Ising e sobre todas as ocupações fermiônicas. $V_i^\sigma(l)$ e $K_{i,j}$ são elementos de matrizes referentes aos termos de interação e de hopping, respectivamente, dados por

$$V_i^\sigma(l) = \frac{1}{\Delta\tau}\lambda\sigma_i(l) + \left(\mu - \frac{U}{2}\right) \tag{4.11}$$

e

$$K_{ij} = \begin{cases} -t & \text{se i, j sao primeiros vizinhos} \\ 0 & \text{demais valores} \end{cases} \tag{4.12}$$

A função de partição pode ser representada como um produto de determinantes fermiônicos [40]. Definamos as matrizes

$$B_l^\sigma = e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V^\sigma(l)} \tag{4.13}$$

que depende das fatias temporais. Dessa forma, a função de partição (4.10) com operadores fermiônicos bilineares, pode ser reescrita como

$$Z = \left(\frac{1}{2}\right)^{L^d M} Tr_s \prod_\sigma \left[1 + B_M^\sigma B_{M-1}^\sigma ... B_1^\sigma\right] \tag{4.14}$$

Por fim, obtemos

$$Z = \left(\frac{1}{2}\right)^{L^d M} Tr_S \det \mathrm{O}^\uparrow(\mathrm{s}). \det \mathrm{O}^\downarrow(\mathrm{s}) \tag{4.15}$$

onde foi feita a introdução de

$$O^\sigma(s) \equiv 1 + B_M^\sigma B_{M-1}^\sigma ... B_1^\sigma \tag{4.16}$$

Assim obtemos a função de partição gran-canônica, expressa como uma soma sobre todos os spins de Ising do produto de determinantes. Para representar o peso de Boltzmann, este produto de determinantes tem que ser

positivo, o que não ocorre para algumas configurações. No entanto, para o modelo de Hubbard repulsivo na banda semi-cheia, caso ao qual nos restringimos aqui, o produto da Eq.(4.15) é sempre positivo; fora deste preenchimento o problema do sinal negativo para algumas configurações pode se manifestar.

4.2 Simulação

Para darmos início a simulação, fixamos os parâmetros da Hamiltoniana U, t e μ; a simetria partícula-buraco fixa $\mu = U/2$ para a banda semi-cheia.

Fixados esses parâmetros, o programa varre a rede espacial (sítios) tentando inverter (flipar) o valor do spin de Ising em cada sítio de uma dada fatia de tempo imaginário l. Este procedimento é repetido em todos os sítios, até a última fatia de tempo imaginário. Note que se o spin é invertido ($s_i(l) \to -s_i(l)$) as matrizes $B_l^{\uparrow}$ e $B_l^{\downarrow}$ mudam para um elememto ii, já que a matriz $V_i(l)$ muda.

Cada passo de Monte Carlo é aceito com probabilidade

$$P = \frac{R_{\uparrow} R_{\downarrow}}{1 + R_{\uparrow} R_{\downarrow}} \tag{4.17}$$

onde $R_{\uparrow}$ e $R_{\downarrow}$ são definidos como

$$R_{\sigma} \equiv \frac{\det O^{\sigma}(\{s\}')}{\det O^{\sigma}(\{s\})} \tag{4.18}$$

onde $\{s\}'$ representa a configuração do novo campo de HS que surge após um spin ser invertido, e $\{s\}$ a configuração antiga.

Portanto, varremos o nosso espaço de fases através de uma amostragem por importância nas configurações dos spins oriundas do flip. A média termodinâmica é então dada como uma média algébrica sobre as configurações geradas desta forma.

Uma das vantagens em implementar o determinante fermiônico é que podemos expressar as médias das variáveis de interesse como as funções de correlação de spins, de pares, etc, usados na análise de magnetismo e supercondutividade, respectivamente, em termos de funções de Green. Porém, para isso é preciso se atentar o fato de que, quando aceitamos um passo de Monte Carlo num dado sítio i de uma fatia l, toda a função de Green da fatia l tem que ser atualizada [40] de acordo com

$$\bar{g}_l^\sigma = g_l^\sigma - [1 + (1 - g_l^\sigma)(\Delta_l - 1)]^{-1} \tag{4.19}$$

Como vemos, essa atualização tem um caráter não local. g_l^σ é dado por

$$g_l^\sigma = (1 + B_{l-1}^\sigma B_{l-2}^\sigma ... B_1^\sigma B_M^\sigma B_l^\sigma)^{-1} \tag{4.20}$$

Depois de tentar virar todos os spins da fatia l, passa-se para a nova fatia onde a função de Green torna-se

$$g_{l+1}^\sigma = B_l^\sigma g_l^\sigma (B_l^\sigma)^{-1} \tag{4.21}$$

e, novamente para cada passo aceito, g_l^σ tem que ser atualizada de acordo com a Eq. (4.19).

4.3 Variáveis de interesse

Uma das grandezas de interesse que nos permitem analisar as propriedades magnéticas é o fator de estrutura magnético, dado por

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{q}.(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} < \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j > \tag{4.22}$$

onde $\mathbf{R}_i$ e $\mathbf{R}_j$ são referentes a posições dos spins $\mathbf{S}_i$ e $\mathbf{S}_j$ nos sítios i e j, respectivamente. $S(\mathbf{q})$ apresenta um pico no valor de $\mathbf{q}$ correspondente ao arranjo

magnético dominante. No caso do modelo de Hubbard isotrópico em duas dimensões, na banda semi-cheia, o pico ocorre em $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ correspondente à ordem antiferromagnética (Néel) no estado fundamental.

O parâmetro de ordem magnético no estado fundamental ($T = 0$) pode ser obtido usando a forma de escala de tamanho finito estabelecida por Huse [41]

$$\frac{S(\pi,\pi)}{L^2} = \frac{M^2}{3} + \frac{a}{L} \tag{4.23}$$

onde M é a magnetização da sub-rede (*staggered*), L o tamanho linear da rede e a uma constante que não depende de L. Através dessa equação extraímos informações das propriedades magnéticas extrapolando para o limite termodinâmico.

Para a ánalise da supercondutividade, a variável de interesse é o fator de estrutura de pares, dado por

$$P_\zeta(i,j) =< \Delta_\zeta^\dagger(i)\Delta_\zeta(j) > \tag{4.24}$$

onde o índice ζ denota a simetria do estado do par e $< ... >$ é a média no ensemble. Temos vários tipos de simetria que o gap pode assumir [43, 44]. Neste trabalho investigamos as simetrias s-wave, sx-wave (extended s-wave) e d-wave; a diferença entre elas é como o gap se comporta no espaço de k. Abaixo temos a forma funcional do gap para as simetrias de par usadas neste trabalho no espaço de k.

$$\begin{aligned} s - wave \quad & \Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 \\ s_x - wave \quad & \Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0[cosk_x a + cosk_y a] \\ d - wave \quad & \Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0[cosk_x a - cosk_y a] \end{aligned} \tag{4.25}$$

onde Δ_0 é o máximo valor da gap e a a constante da rede.

A transição supercondutora pertence à classe de universalidade do modelo XY, que, em duas dimensões, corresponde à transição de Kosterlitz-Thouless. Devido à simetria contínua, a forma de escala de Huse [41] permanece válida, e devemos ter

$$\frac{P_\zeta}{L^2} = |\Delta_\zeta|^2 + \frac{C}{L} \tag{4.26}$$

onde novamente C é uma constante que não depende do tamanho linear L da rede. Através dessa equação realizamos a extrapolação para o limite termodinâmico, e obtemos o gap supercondutor para as diferentes simetrias estudadas (Δ_ζ) que, permitirá dizer se há, ou não, presença de supercondutividade.

Exemplos das análises de dados usados nas eqs. (4.23) e (4.26) serão vistos no próximo capítulo.

Capítulo 5

Resultados

Neste capítulo apresentaremos os resultados obtidos para os efeitos das tiras de carga (*stripes*) nas propriedades magnéticas, supercondutoras e de transporte, em uma rede quadrada para os tamanhos de rede que variam de $L = 8$ a $L = 16$, usando o método de Monte Carlo Quântico. Nossos resultados foram obtidos para o caso específico da banda semi-cheia ($\mu = 0$) para $U = 4$, onde, para cada valor de temperatura, foram feitas 5 realizações, a fim de que os erros estatísticos sejam minimizados, e cada realização com 4000 passos de MQC. Embora saibamos que na banda semi-cheia não haja supercondutividade, é interessante iniciar o estudo neste preenchimento, no qual não há o problema do sinal, e ainda por conhecer os resultados para o caso isotrópico, possibilitando, assim, compararmos com os nossos resultados.

Para simularmos os aspectos das stripes no sistema, usamos um *hopping* anisotrópico. O hopping anisotrópico é responsável por fazer as cargas se moverem em uma direção preferencial, criando, dessa forma, rios de cargas. Conforme discutimos na seção 2.3, usamos o mesmo parâmetro de anisotropia utilizado na Ref. [24], dado por

$$r = \frac{t_y}{t}, \quad t_x \equiv t \tag{5.1}$$

Baseados nos resultados encontrados na Ref. [24], consideramos três valores de anisotropia: $r = 0.1$, $r = 0.01$ e $r = 0.001$. A título de comparação apresentaremos os resultados para o caso isotrópico ($r = 1$), conhecidos na literatura.

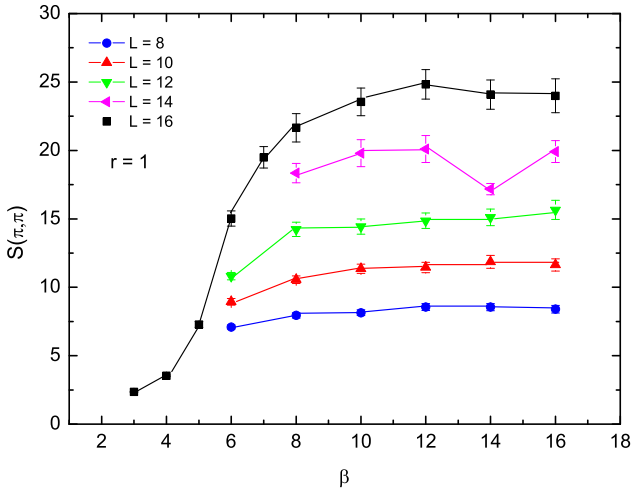

Figura 5.1: Fator de estrutura magnético como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 1$.

5.1 Análise do magnetismo

Nosso objetivo nesta seção é investigar os efeitos das stripes nas propriedades magnéticas. Para isto, analisamos o fator de estrutura magnético ($S(q)$), que conforme mostrado no capítulo 4, é dado por

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{q}.(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} < \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j > \tag{5.2}$$

Neste trabalho, partimos dos resultados conhecidos para o caso isotrópico,

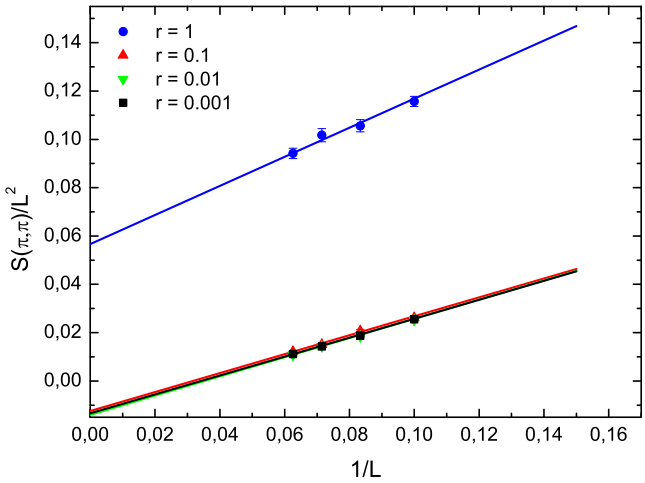

Figura 5.2: Extrapolação para $S(\pi, \pi)$ para $U = 4$ e diferentes parâmetros anisotrópicos. Para cada r, a intersecção com o eixo vertical nos fornece a estimativa da magnetização da sub-rede a temperatura zero.

para o qual o valor do pico de $\mathbf{q}$ ocorre para (π, π), no qual o ordenamento predominante é o antiferromagnético.

A Fig. 5.1 mostra o fator de estrutura magnético em função de β para o caso isotrópico ($r = 1$). Podemos observar que o valor de $S(\pi, \pi)$ tende a se tornar constante a partir de um determinado valor de β. Isto deve-se ao fato de trabalharmos com sistemas finitos, nos quais à medida que abaixamos a temperatura, as correlações atingem todo o sistema sendo inútil reduzirmos a temperatura, já que as correlações não terão como crescer. É importante salientar que o tempo computacional aumenta consideravelmente quando aumentamos β, isto é, no regime de baixas temperaturas. Notamos, ainda nesta figura, que o valor de $S(\pi, \pi)$ cresce de forma gradativa com o tamanho espacial da rede.

Para extrairmos informações quantitativas como o parâmetro de ordem no estado fundamental ($T = 0$) usamos a forma de escala estabelecida por Huse [41] dada por

$$\frac{S(\pi,\pi)}{L^2} = \frac{M^2}{3} + \frac{a}{L} \tag{5.3}$$

onde M é a magnetização da sub-rede. O valor de $S(\pi,\pi)$ no regime assintótico $\beta \longrightarrow \infty$ é obtido realizando uma média das estimativas de seus valores a partir dos ponto em que se torna constante, que em geral ocorre a partir de $\beta = 12$. Usando a relação de Huse, realizamos a extrapolação para $L \longrightarrow \infty$. Devido a efeitos de tamanho finito, que eventualmente aparecem, fomos forçados a utilizar a rede 16×16, aumentando consideravelmente o tempo gasto para a realização dos cálculos.

Na Fig. 5.2 traçamos $S(\pi,\pi)/L^2$ versus 1/L para os tamanhos de rede que vão desde $L = 8$ até $L = 16$. Os gráficos exibem retas traçadas por regressão linear para o caso isotrópico, bem como para os três valores de anisotropia. O valor da magnetização é dado pelo ponto no qual a reta intercepta o eixo vertical, que corresponde ao valor do coeficiente linear da Eq. (5.3). Comparando esta equação, com a equação da reta, tiramos que o valor da magnetização da sub-rede é dado por

$$M = \sqrt{3y} \tag{5.4}$$

onde y é o ponto no qual a reta intercepta o eixo y.

Podemos ver nesta figura que, para o caso isotrópico, a reta claramente intercepta o eixo vertical em um valor não nulo, mostrando que o sistema apresenta magnetização nas sub-redes, portanto exibe uma fase antiferromagnética. A medida que inserimos a anisotropia ($r = 0.1$), a fase antiferromagnética é destruída, como é mostrado nesta figura a reta extrapolando para

zero, dentro das barras de erro. Para os outros valores de anisotropia a extrapolação também nos fornece um valor nulo para a magnetização. Como já foi dito, partimos dos resultados existentes para o caso isotrópico que apresenta ordem antiferromagnética, com o valor do pico de $\mathbf{q}$ ocorrendo para (π, π). Como vimos, com a inserção da anisotropia, o sistema não apresenta ordenamento antiferromagnético. No entanto, é possível que o pico de $S(\mathbf{q})$ tenha sofrido um deslocamento para um valor de $\mathbf{q} \neq (\pi, \pi)$ e que haja outro tipo de ordem magnética.

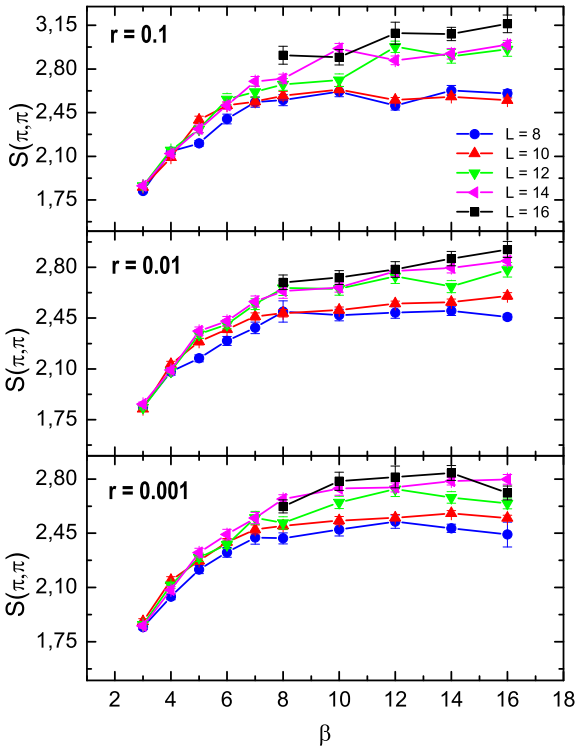

Figura 5.3: Fator de estrutura magnético como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$.

Nas Fig. 5.3, mostramos o fator de estrutura magnético como função do

inverso da temperatura para o caso anisotrópico com tamanhos de redes que variam de $L = 8$ a $L = 16$. Em todos os gráficos podemos notar que o valor de $S(\pi, \pi)$ para o qual ele torna-se constante é menor que o visto para o caso isotrópico, logo, isto mostra que a presença da anisotropia influencia nas correlações entre spins, portanto, no ordenamento magnético. Outro fato importante que notamos é que o valor de $S(\pi, \pi)$, diferentemente do caso isotrópico, não varia muito com o tamanho espacial da rede e, comparando com os três valores de anisotropia, não sofre grandes variações.

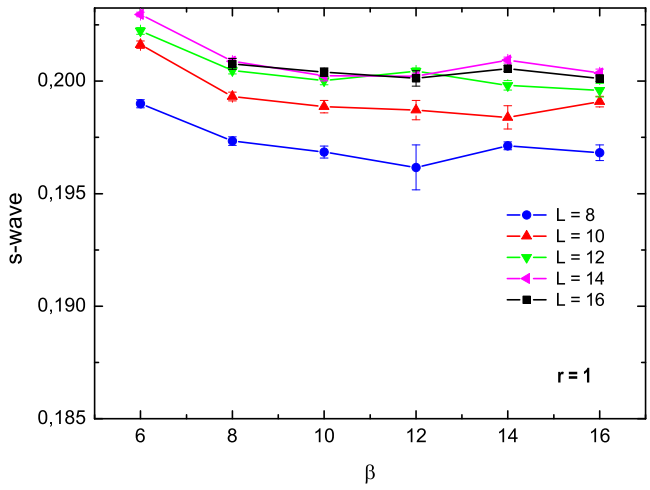

Figura 5.4: s-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 1$.

5.2 Análise da supercondutividade

Depois de termos estudado os efeitos das stripes nas propriedades magnéticas, nesta seção apresentaremos nossos resultados da análise feita da supercondutividade.

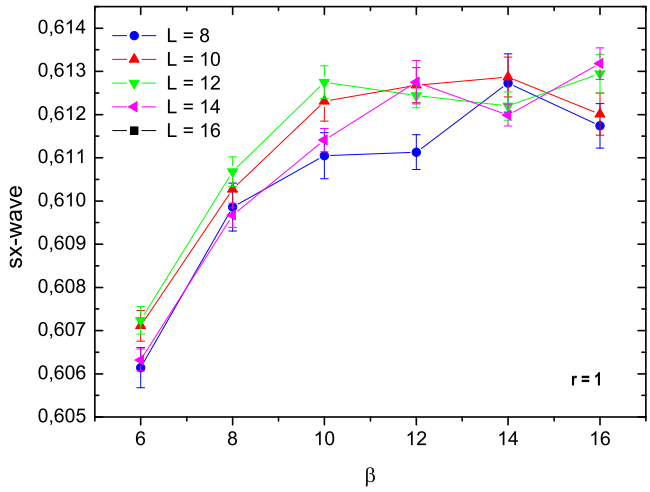

Figura 5.5: sx-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 1$.

Para isto, analisamos o fator de estrututa de pares que, como vimos no capítulo anterior, é dado por

$$P_\zeta(i,j) =< \Delta_\zeta^\dagger(i)\Delta_\zeta(j) > \tag{5.5}$$

onde o índice ζ denota a simetria do estado do par. O fator de estrutura de pares mostra o emparelhamento dos elétrons, revelando, desta forma, o surgimento do estado supercondutor. Neste trabalho a análise da supercondutividade foi feita para três tipos de simetria de pares: s-wave, sx-wave e d-wave.

As Figs. 5.4 - 5.6 , mostram o fator de estrura de pares s-wave, sx-wave e d-wave com o inverso da temperatura para o caso isotrópico ($r = 1$). Como podemos ver nestes gráficos, tanto s-wave, sx-wave e d-wave, tendem a se tornar constantes à medida que aumentamos β, de maneira similar como vimos no comportamento do fator de estrutura magnético. É importante

ressaltar que, para este caso, o valor do fator de estrutura de pares para as três simetrias estudadas não sofre grandes variações com o tamanho do sistema, indicando a ausência de ordem de longo alcance.

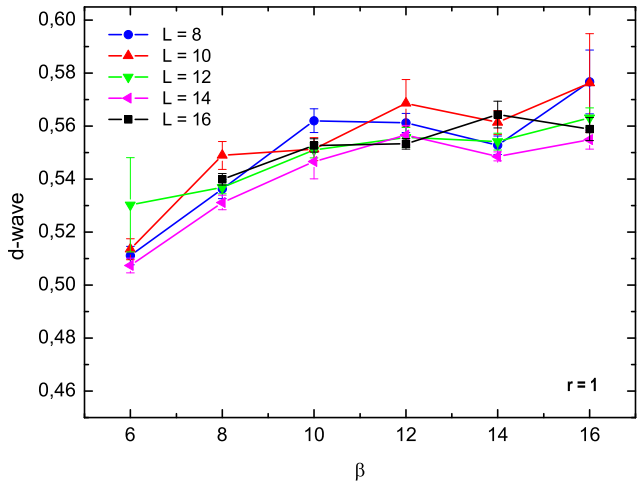

Figura 5.6: d-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 1$.

As Figs. 5.7 - 5.9 mostram o fator de estrutura de pares versus o inverso da temperatura para os três tipos de simetrias estudadas para cada um dos valores de anisotropia, e tamanhos de redes que vão desde $L = 8$ até $L = 16$. Notamos novamente que tanto s-wave, sx-wave, como d-wave, tendem a se tornar constantes no regime de baixas temperaturas (β grande). A partir deste ponto em que se tornaram constantes, podemos diminuir a temperatura que o valor do fator de estrutura para essas simetrias não sofrerá grandes mudanças.

Um aspecto interessante notado nas figuras citadas acima é o comportamento não monotônico dos fatores de estrutura s-wave, sx-wave e d-wave

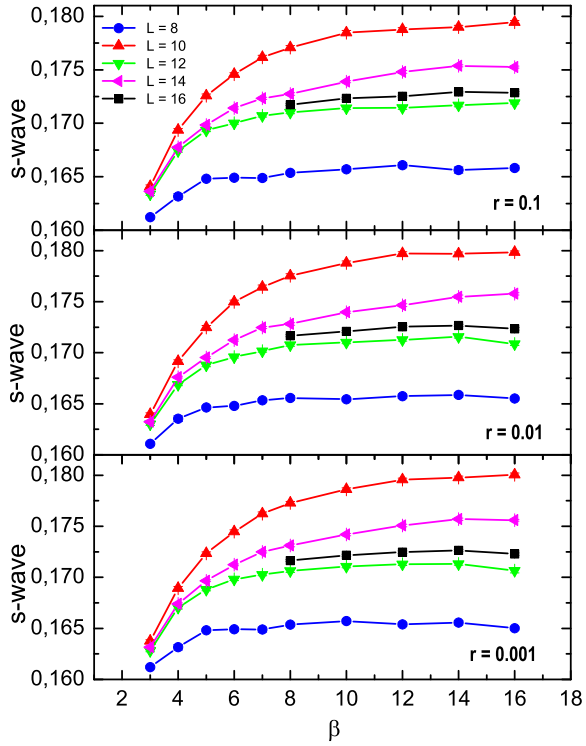

Figura 5.7: s-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$.

com os tamanhos de rede; como vemos, dados para as três simetrias oscilam em torno dos valores para $L = 16$, ao contrário do que normalmente ocorre. Outro aspecto importante notado, se deve ao fato destes fatores de estrutura serem pouco sensíveis à anisotropia. Qualitativamente estes casos não diferem do caso isotrópico, sinalizando a ausência de supercondutividade.

Para extrairmos informações quantitativas a respeito da transição supercondutora, assim como foi feito para a análise do magnetismo, usamos a relação de escala estabelecida por Huse

$$\frac{P_\zeta}{L^2} = |\Delta_\zeta|^2 + \frac{C}{L} \tag{5.6}$$

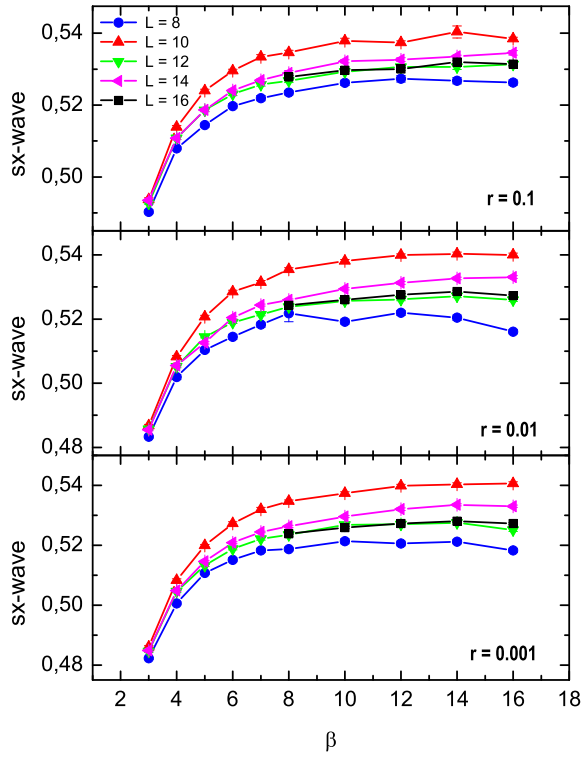

Figura 5.8: sx-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$.

onde Δ_ζ é o gap supercondutor a temperatura zero para uma simetria ζ do par. Comparando esta relação, com a equação da reta, estimamos o valor do gap supercondutor, dado por

$$\Delta_\zeta = \sqrt{y} \tag{5.7}$$

onde y é o ponto onde a reta intecepta o eixo y.

Nas Figs. 5.10 - 5.12 traçamos P_ζ/L^2 versus $1/L$ para os três tipos de simetrias estudadas. Inferimos o valor do gap, analisando os valores para os quais a reta intercepta o eixo vertical. Para o caso isotrópico cujos resultados

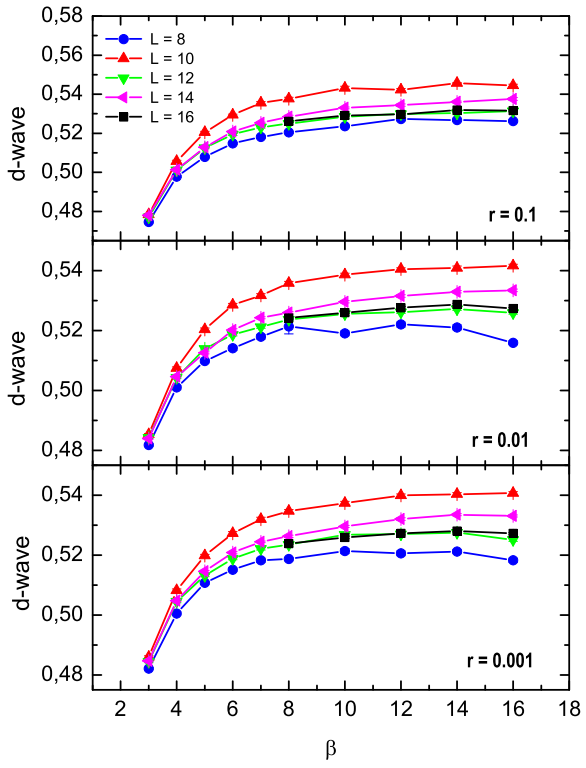

Figura 5.9: d-wave como função do inverso da temperatura para $U = 4$ e $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$.

são conhecidos, o esperado é que não exista supercondutividade no modelo de Hubbard repulsivo na banda semi-cheia para nenhuma das simetrias estudadas. Este resultado é confirmado nestas figuras; como vemos, o ponto em que a reta toca o eixo vertical nestas figuras, se aproxima de zero; levando em conta a barra de erro, podemos inferir um valor nulo para o gap supercondutor, logo, mostrando que não há supercondutividade. Analisando o caso anisotrópico, podemos observar que, para todas as simetrias de pares e todos parâmetros anisotrópicos, a reta extrapola para zero, novamente levando em consideração a barra de erro, encontramos um gap nulo, isto é, ausência

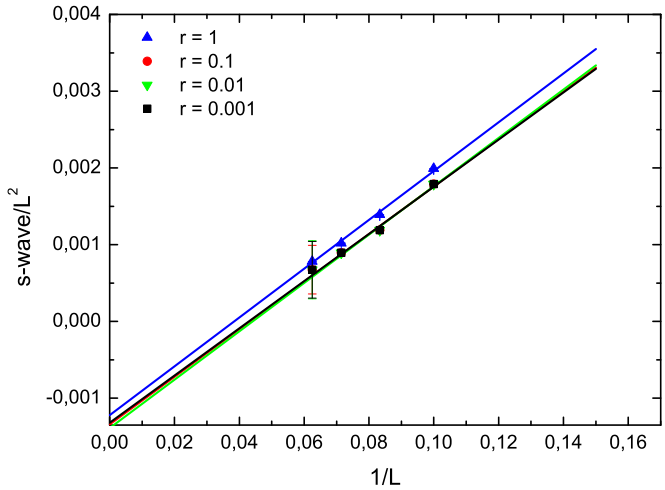

Figura 5.10: Extrapolação para s-wave para $U = 4$ e diferentes parâmetros anisotrópicos. Para cada r, a intersecção com o eixo vertical nos fornece a estimativa do do valor do gap supercondutor a temperatura zero.

de formação de pares, portanto, não apresentando supercondutividade. Em síntese, a anisotropia imposta para criar as stripes, não levou à formação de um estado supercondutor na banda semi-cheia.

5.3 Análise das propriedades de transporte

Para estudarmos os efeitos causados pelas stripes nas propriedades de transporte, discutiremos a condutividade e a densidade de estados. Para extrairmos informações no que diz respeito ao estado metálico ou isolante do sistema, devemos analisar o comportamento destas grandezas com a temperatura. Para este fim, precisamos obter a função de correlação corrente-corrente

no espaço dos momentos

$$\Lambda_{xx}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \sum_i \int_0^\beta \langle j_x(\mathbf{i}, \tau) j_x(0,0)\rangle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} e^{-i\omega_n \tau} d\tau \tag{5.8}$$

onde $\omega_n = 2\pi/\beta$ é a frequência de Matsubara e $\langle ... \rangle$ denota a média térmica à temperatura $T = \beta^{-1}$ e j_x é a parte paramagnética do operador corrente-corrente na direção x, definido como

$$j_x(\mathbf{i}) = it \sum_\sigma (c^\dagger_{\mathbf{i}+x,\sigma} c_{\mathbf{i},\sigma} - c^\dagger_{\mathbf{i},\sigma} c_{\mathbf{i}+x,\sigma}) \tag{5.9}$$

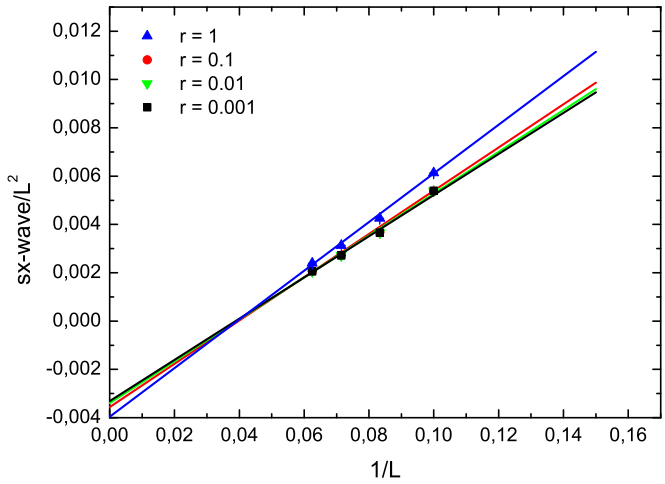

Figura 5.11: Extrapolação para sx-wave para $U = 4$ e diferentes parâmetros anisotrópicos. Para cada r, a intersecção com o eixo vertical nos fornece a estimativa do do valor do gap supercondutor a temperatura zero.

Para extrair a dependência da condutividade com a temperatura, é usado o teorema de flutuação-dissipação que nos permite escrever a função de correlação corrente-corrente como

$$\Lambda_{xx}(\mathbf{q}, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{exp(-\omega\tau)}{[1 - exp(-\beta\omega)]} Im\Lambda_{xx}(\mathbf{q}, \omega) \tag{5.10}$$

para $0 \leq \tau \leq \beta$. Uma grande dificuldade no método de Monte Carlo Quântico deve-se ao fato das funções de correlações dependerem do tempo imaginário (τ)[42], como vemos na equação acima. Para ser possível obtermos grandezas dependentes da frequência, como $\Lambda_{x,x}(\mathbf{q}, \omega)$ seria necessário realizar uma inversão numérica da transformada de Laplace. Ao contrário disso, é usado uma técnica válida quando a temperatura é menor que a escala apropriada do sistema $T \ll \Omega$, onde Ω é a escala sobre a qual $Im\Lambda_{x,x}$ desvia do seu comportamento a baixas frequências. Deste modo, usando a teoria da resposta linear, a condutividade fica

$$\sigma = \lim(\omega \to 0) Im \frac{\Lambda_{x,x}(\mathbf{q} = 0, \omega)}{\omega} \tag{5.11}$$

Por fim, se inserirmos $\tau = \beta/2$ na integral da Eq. 5.10 e efetuando a resolução desta integral, podemos aproximar $\Lambda_{x,x}(\mathbf{q} = 0, \omega)$ por σ, encontrando que

$$\Lambda_{x,x}(\mathbf{q} = 0, \tau = \frac{\beta}{2}) = \frac{\pi}{\beta^2}\sigma \tag{5.12}$$

De onde tiramos o valor da condutividade

$$\sigma = \frac{\beta^2}{\pi}\Lambda_{x,x}(\mathbf{q} = 0, \tau = \frac{\beta}{2}) \tag{5.13}$$

A Fig. 5.13 mostra o comportamento da condutividade nas direções x e y como função da temperatura, para o caso isotrópico . Como esperado, a condutividade nas duas direções se comporta da mesma forma, já que o hopping é isotrópico, o que garante que nossos resultados obtidos via simulação de Monte Carlo Quântico estão coerentes. Nas duas direções vemos que a condutividade vai a zero quando a temperatura diminui, indicando um comportamento isolante. Um comportamento metálico seria observado se a condutividade aumentasse conforme a temperatura fosse reduzida.

As Fig. 5.14 mostra a condutividade nas direções x e y como função da temperatura para o caso anisotrópico. Na direção x, a condutividade se comporta de maneira semelhante para os três valores de anisotropia, exibindo um

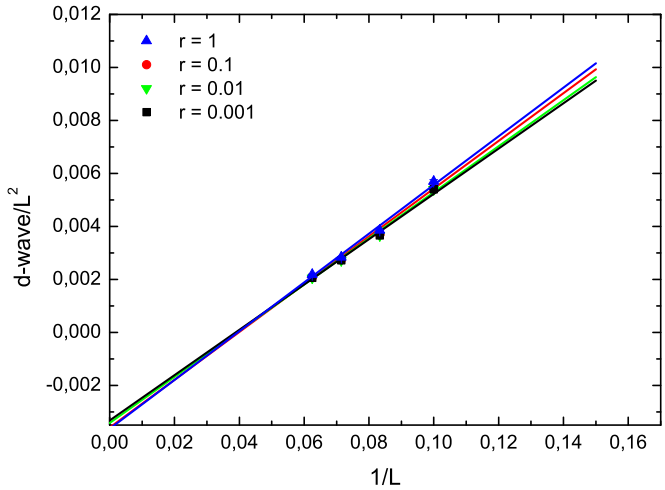

Figura 5.12: Extrapolação para d-wave para $U = 4$ e diferentes parâmetros anisotrópicos. Para cada r, a intersecção com o eixo vertical nos fornece a estimativa do do valor do gap supercondutor a temperatura zero.

estado isolante, pois como vemos a condutividade diminui com a redução da temperatura. Apesar do hopping ao longo da direção x ser igual em todos os casos considerados, a redução do hopping na direção y reduz a condutividade ao longo da direção x. Notamos que na direção y, a condutividade é maior para o caso isotrópico, e se aproxima de zero, conforme aumentamos a anisotropia; note a escala logarítmica usada. O comportamento isolante observado na direção x permanece nesta direção.

O fato da condutividade na direção y ir para um valor próximo de zero, para todos os valores de anisotropia, pode ser explicado devido ao hopping ser favorecido na direção x, como mostra a Eq. 5.1, isto é, a maior parte das cargas tende a se mover nesta direção, tornando a condução na direção y desfavorável. Por esse fato, ao contrário do que observamos na direção x, em

que a condutividade vai caindo conforme a temperatura diminui, na direção y a condutividade fica em torno de zero.

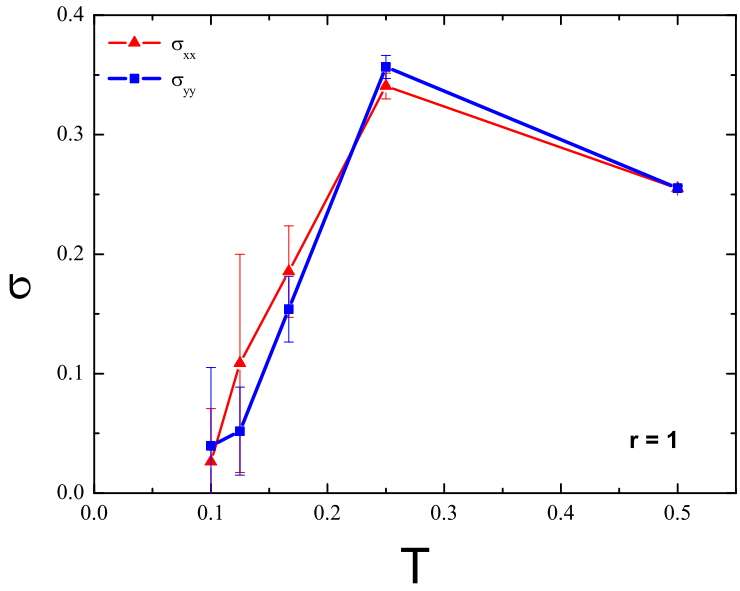

Figura 5.13: Condutividade como função da temperatura para $r = 1$ e $L = 10$.

A fim de analisarmos as propriedades de transporte, outra grandeza que nos permite corroborar os resultados obtidos com a análise da condutividade, é a densidade estados $N(\omega)$, dada por

$$N(\omega) = \frac{1}{N}\sum_{k} A(\mathbf{k},\omega), \tag{5.14}$$

onde $A(\mathbf{k},\omega)$ é a densidade espectral, relacionada com a função de Green para um dado tempo imaginário $G(\mathbf{k},\tau) = -\langle c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}(0)\rangle$, dada por

$$G(\mathbf{k},\tau) = -\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{-\omega\tau}}{1+e^{-\beta\omega}} A(\mathbf{k},\omega) \tag{5.15}$$

Obtemos $A(\mathbf{k},\omega)$ e por conseguinte, a densidade de estados, usando a aproximação a baixas frequências, de maneira análoga ao realizado para

obter a condutividade. Substituindo $\tau = \beta/2$ na eq. 5.15 e tomando sua transformada de Fourrier podemos escrever a densidade de estados no nível de Fermi em termos da função de Green local em $\tau = \beta/2$:

$$G(\mathbf{r}, \tau = \frac{\beta}{2}) = -\frac{\pi}{\beta} N(0) \tag{5.16}$$

De onde tiramos que a densidade de estados no nível de Fermi é

$$N(0) = \frac{-\beta}{\pi} G(\mathbf{r}, \tau = \frac{\beta}{2}) \tag{5.17}$$

A densidade de estados se comporta de maneira similar à condutividade, tendendo a um valor nulo conforme a temperatura diminui, indicando um estado isolante, e indo para um valor não nulo com a redução da temperatura, indicando um estado metálico .

A densidade de estados nos permite inferir se há estados desocupados no sistema que podem ser preenchidos. Para ilustrar esta situação, na Fig. 5.15 ilustramos a densidade de estados para um partícula. No painel a, vemos uma banda totalmente preenchida, e um gap, existente entre esta banda e a banda acima que se encontra vazia. Um estado isolante é encontrado quando a banda de valência está totalmente preenchida, isto é, quando não há estados a serem ocupados, portanto impossibilitando a condução. Em contrapartida, um estado metálico seria observado no painel b, que, como vemos, apresenta uma banda parcialmente preenchida, logo sendo possível que os elétrons ocupem o estados desocupados existentes, permitindo assim que haja condução.

Na Fig. 5.16 apresentamos nossos resultados para a densidade de estados no nível de Fermi como função da temperatura, para o caso isotrópico e anisotrópico. Como vemos, a densidade de estados para o caso isotrópico se aproximade zero quando a temperatura é reduzida, demonstrando que o sistema se encontra em um estado isolante. Para o caso anisotrópico,

a densidade de estados não sofre alterações para os três valores de hoppings anisotrópicos utilizados. Comparando com o caso isotrópico, continuamos com um estado isolante, pois a densidade de estados vai a zero com a diminuição da temperatura. A presença da anisotropia, como vemos , não foi capaz de influenciar qualitativamente a densidade de estados , pois o modelo de Hubbard isotrópico na banda semi-cheia é um isolante de Mott. Como vemos os resultados obtidos da análise da densidade de estados corroboram os resultados obtidos pela condutividade: em ambas as análises observamos um comportamento isolante.

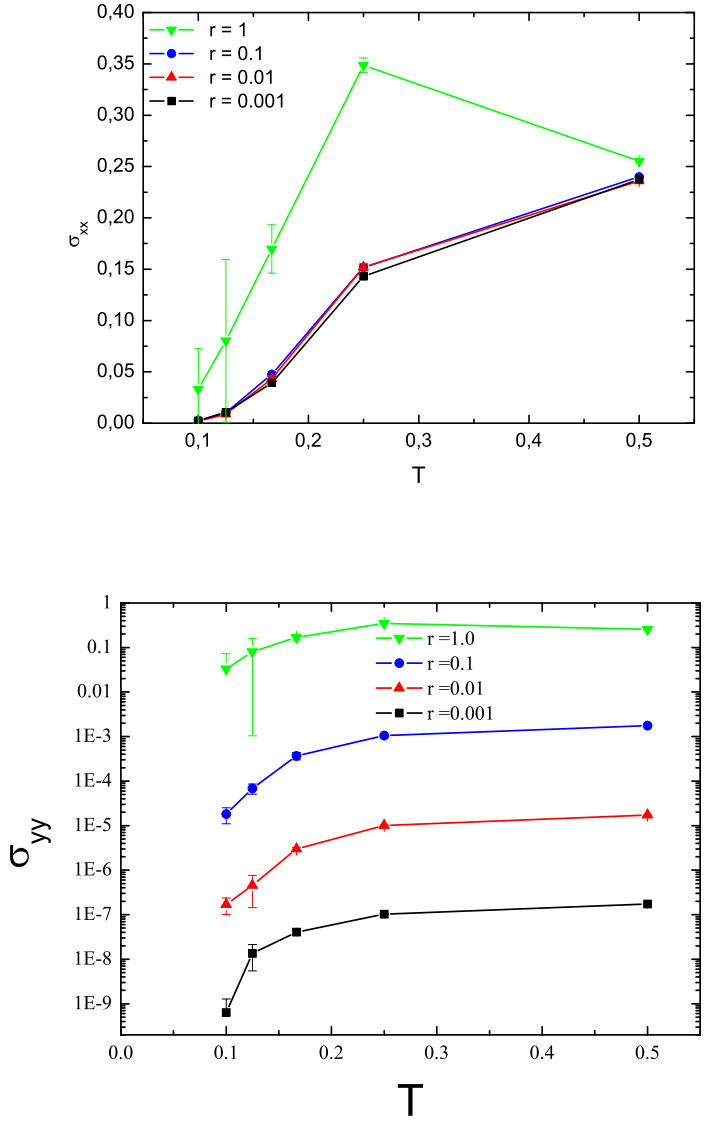

Figura 5.14: Condutividade na direções x e y como função da temperatura para $L = 10$ e $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$.

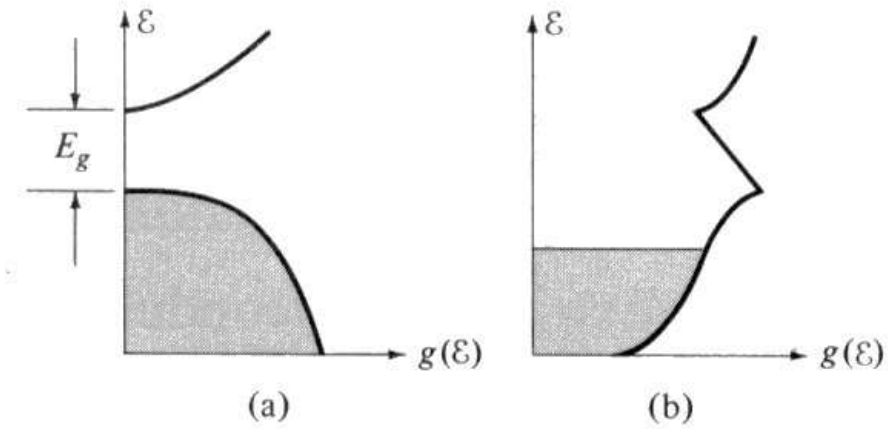

Figura 5.15: Densidade de estados para uma partícula.

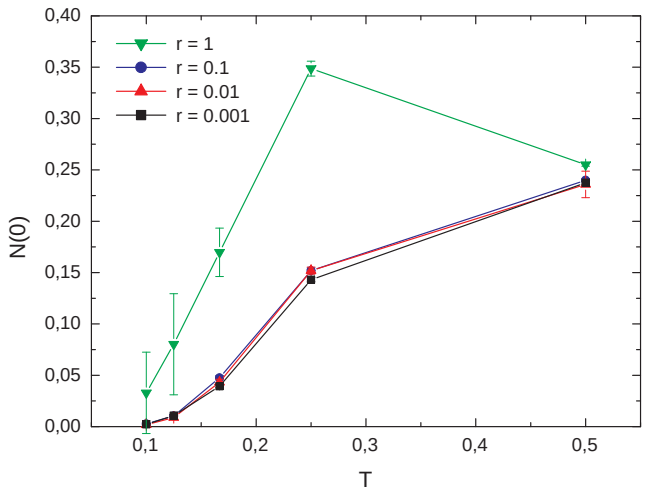

Figura 5.16: Densidade de estados no nível de Fermi como função da temperatura para $r = 1$, $r = 0.1$, $r = 0.01$, $r = 0.001$, e $L = 10$.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho investigamos os efeitos das tiras de carga nas propriedades magnéticas, supercondutoras e de transporte. As tiras de carga foram modeladas através de um hopping anisotrópico na hamiltoniana de Hubbard. Usando o método de Monte Carlo Quântico, realizamos simulações em uma rede quadrada com tamanhos lineares que variam de $L = 8$ até $L = 16$, com $U = 4$ e na banda semi-cheia.

No caso das propriedas magnéticas, analisamos o fator de estrutura magnético, para $q = (\pi, \pi)$. Confirmamos que, para o caso isotrópico, o sistema apresenta uma fase antiferromagnética. À medida que inserimos a anisotropia, já para o primeiro valor de anisotropia investigado ($r = 0.1$), a ordem antiferromagnética presente no caso isotrópico é destruída.

Na análise da supercondutividade, estudamos o comportamento do fator de estrutura de pares para três tipos de simetrias: s-wave, sx-wave e d-wave. Concluímos que, no caso isotrópico não há presença de supercondutividade para nenhuma das simetrias estudadas. A mesma situação foi observada com a inserção das anisotropias. Logo, a presença das tiras de cargas não

influenciou nas propriedades supercondutoras, ao menos na banda semi-cheia.

Comparando nossos resultados com os obtidos na Ref [24], a qual através de uma abordagem de campo médio prevê uma temperatura de transição supercondutora nula na banda semi-cheia, e um aumento por um fator de até 1000 nesta temperatura de transição, para baixas densidades, concluímos que não há favorecimento de formação da pares que levam à supercondutividade, na banda semi-cheia, com a inserção da anisotropia. Portanto, confirmando a ausência de supercondutvidade na banda semi-cheia conforme obtido pela Ref [24].

Bibliografia

[1] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics. Cornell University. USA, (1976).

[2] J. Bardenn, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, Theory of Superconductivity, *Phys. Rev.*, **108**, 1175 (1957).

[3] Bednorz, J. G., Mulher, K. A. Possible high-Tc in the Ba-La-Cu-O system, *Zeitschrift f¨ur Physik B Condensed Matter*, **64**, 189 (1986).

[4] http://www.univerciencia.ufscar.br/n2a1/super.

[5] Dagotto, E. Complexity in strongly correlated electronic systems, *Science.*, **309**, 257 (2005).

[6] Dagotto, E. Correlated electrons in high-temperature superconductors, *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 763 (1994).

[7] http://pt.wikipedia.org/wiki/Perovskita.

[8] Mott, N. F. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. Proceedings of the *Physical Society.* Section A, **62**, n. 7, 416 (1949).

[9] Mott, N. F. The transition to the metallic state, *Philos. Mag.*, **6**, n. 62, 287 (1961).

[10] V. J. Emerey, *Phys. Rev.* **14**, 2989 (1976).

[11] Damascelli, A., Hussain, Z., Shen, Z. X., Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors, *Reviews of Modern Physics*, **75**, n. 2, 473 (2003).

[12] M. Raczkowski and A. M. Olés, R. Frésad, Stripes phases, possible ground state of the hight-T_c superconductors, *Low Temperature Physics*, **32**, n. 34, 305 (2006).

[13] V. J. Emery, S. A, Kivelson, and J. M. Tranquada. Stripes phases in high-temperature superconductors, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, **96**, 361 (1999).

[14] Tranquada J. M., Sternlieb B. J., Axe J. D., Nakamura Y., Uchida S., Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors, *Nature*, **375**, 361 (1995).

[15] S. A. kivelson, I. P. Bindloss, E. Fradkin, U. Oganesyan, J. M. Tranquada, A. Kapitulnik, and C. Howald, *Rev. Mod. Phys* **75**, 1201 (2003).

[16] J. Zaanen, O. Y., Osmar. H. V. Kruis, Z. Nussinov and J. Tworzydlo, *Phil. Mag. B*, **81**, 1485 (2001).

[17] J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura, and S. Uchida, *Nature*, **375**, 561 (1995).

[18] J. M. Tranquada, and L. P. Regnault, *Phys. Rev. B*, **70**, 104517 (2004).

[19] Tranquada, J. M., Axe, J. D., Ichikawa, N., Nakamura, Y., Uchida, S., Nachumi, B., Neutron scaterring study of stripe-phase order of holes and spins in $La_{1.48}Nd_{0.4}Sr_{0.12}CuO_4$, *Phy. Rev. B*, **54**, n. 10, 7489 (1996).

[20] J. Riera, Quantum Monte Carlo simulations of the $t - J_z$ model with stripes on the square lattice, *Phy. Rev. B*, **64**, 104520 (2001).

[21] S. Basu, R. J. Gooding, and P. W. Leung, *Phys. Rev. B*, **63**, 100506 (2001)

[22] J. Riera and E. Dagotto, *Phys. Rev. B*, **47**, 15346 (1993).

[23] P. Prelovsek and I. Sega, Phys. Rev.B, **49**, 15241 (1994).

[24] Saurabh Basu, A. Callan-Jones, and R. J. Gooding, Increasing superconducting T_c's by a factor of 1000 with large hopping anisotropies in the two-dimensional $t - J$ model systems, *Phys. Rev. B*, **66**, 144507 (2002).

[25] Hubbard, J. Electron correlations in narrow energy bands, *Proceedings of The Royal Society of London Series A-Mathematical and Physical Sciences*, **276**, 238 (1963).

[26] Yue, Yu., S. T. Chui, Phase diagram of ultracold atoms in optical lattices: Comparative study of slave fermion and slave boson approaches to Bose-Hubbard model, *Phys. Rev. A*, **71**, 033608 (2005).

[27] Greiner, M., Folling, S., Optical lattices, *Nature*, **753**, 736 (2008).

[28] Aryan pour, K., Pickett, W. E., Scalettar, R. T., Dynamical mean-field study of the Mott transition in the half-filled Hubbard Model on a triangular lattice, *Phys. Rev. B*, **74**, 085117 (2006).

[29] Paiva, T., Scalettar, R. T., Zheng, W., Singh, R. R. P., Oitamaa, J., Ground-state and finite-temperature signatures of quantum phase transitions in the half-filled Hubbard model on a honeycomb lattice, Phys. Rev. B, **72**, 085123 (2005).

[30] Chaikin, P. M., Pincus, P., Beni, G., Peierls transition in alternant lattices, J. Phys. C: Solid State Phys., 8, (1975).

[31] *Quantum Monte Carlo Methods*, Solid State Sciences, Vol. 74, ed. M. Suzuki (Springer, Berlin), 1986.

[32] W. von der Linden, *Phys. Rep.*, **220**, 53 (1992).

[33] White, S. R., Scalapino, D. J., Sugar, R. L., Numerical study of the two-dimensional Hubbard model, *Phys. Rev. B*,**40**, n. 40, 506 (1989)

[34] Hirsh, J. E., Two-dimensional Hubbard Model: numerical simulation study, Phys. Rev. B, **31**, n. 7, 4403 (1985)

[35] Hirsh, J. E., Stable Monte Carlo algorithm for fermion lattice systems at low temperature, *Phys. Rev. B*, **38**, 12023 (1988).

[36] White, S.R., Scalapino, D. J., Sugar, R. L., Bickers, N. E., Scalettar, R. T., Attractive and repulsive pairing interaction vertices for the two–dimensional Hubbard model, *Phys. Rev. B*, **39**, 839 (1989).

[37] Hirsh, J. E., Tang, S., Antiferromagnetism in the two-dimensional Hubbard model, *Phys. Rev. Letters*, **62**, n. 5, 591 (1989).

[38] M. Suzuki, na Ref. [31].

[39] Hirsh, J.E., Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermions lattice models, *Phys. Rev. B*, **28**, n. 7, 4059 (1983).

[40] Raimundo R. dos Santos, Introduction to Quantum Monte Carlo Simulations for Fermionic Systems, *Brazilian Journal of Physics*, **33**,n. 1, 36 (2003).

[41] Huse, D. A., Ground-state staggered magnetization of two-dimensional quantum Heisenber antiferromagnets, *Phys. Rev. B*, **37**, 2380 (1988).

[42] Denteneer, P. J. H., Scalettar, R. T., Trivedi, N., Conducting phase in the two-dimensional disordered Hubbard model, *Phys. Rev. Letters*, **83**, 22 (1988).

[43] Scalapino, D. J., The case for $d_{x^2-y^2}$ pairing in the cuprate superconductors. *Phys. Reports*, **250**, 329 (1995).

[44] Van-Harlingen, D. J., Phase-sensitive tests of the symmetry oh the pairing state in the high-temperature superconductors. Evidence for $d_{x^2-y^2}$ symmetry, *Reviews of Modern Physics*, **67**, n° 2, (1995).

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