



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE FÍSICA

**Modelo de Hubbard bidimensional em uma rede com
padrão tabuleiro de xadrez**

Alexandra Valentim

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

Co-Orientador: *Prof. Dr. Alberto S. de Arruda*

— Abril de 2010 —

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.



Modelo de Hubbard bidimensional em uma rede com padrão tabuleiro de xadrez

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

2010

Alexandra Valentim

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Mato Grosso como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Ciências - M.Sc. - (Física).

— Cuiabá-MT —

FICHA CATALOGRÁFICA

V156m Valentim, Alexandra

Modelo de Hubbard bidimensional em uma rede com padrão
tabuleiro de xadrez / Alexandra Valentim. – 2010.

73 f. : il. ; color. ; 30 cm.

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

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

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Mato
Grosso, Instituto de Física, Pós-graduação em Física, 2010.

Bibliografia: f. 69-73.

1. Física da matéria condensada. 2. Modelo de Hubbard. 3.
Monte Carlo Quântico – Simulação. I. Título.

CDU – 538.9

Ficha elaborada por: Rosângela Aparecida Vicente Söhn – CRB-1/931



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Fone- 65 615 8734/ 8937 E-mail: pgf@fisica.ufmt.br

FOLHA DE APROVAÇÃO

Título: “*Modelo de Hubbard bidimensional em uma rede com padrão tabuleiro de xadrez*”

Autor: Alexandra Valentim

Dissertação de Mestrado defendida e aprovada em 07 de abril de 2010, pela Banca Examinadora:

Thereza C de L Paiva

Profa. Dra. Thereza Cristina de Lacerda Paiva
Universidade Federal do Rio de Janeiro – IF/UFRJ
Orientadora

Cintia Aguiar

Profa. Dra. Cintia Aguiar
Universidade Estadual de Santa Catarina – UF/DESC
Examinadora Externa

Edson Ferreira Chagas

Prof. Dr. Edson Ferreira Chagas
Universidade Federal de Mato Grosso – IF/UFMT
Examinador Interno

À minha família.

“Tenho pensamentos que, se pudesse revelá-los e fazê-los viver, acrescentariam nova luminosidade às estrelas, nova beleza ao mundo e maior amor ao coração dos homens.” *Fernando Pessoa*

Agradecimentos

A Deus, por todas as pessoas que colocou em minha vida e que compartilharam comigo seu amor, conhecimento e amizade.

Aos meus pais, Alexandrina e João Valentim, por serem meu porto seguro, meus irmãos, João Augusto, Angélica e Juliana, por serem as pessoas com quem sempre pude contar, e a toda minha família.

A Evandro França, pelo amor, companheirismo e por compreender minha ausência.

À professora Thereza Paiva, pela orientação, paciência e atenção durante todo o trabalho.

Ao professor Alberto Arruda, pela orientação, confiança e por sempre me incentivar desde a iniciação científica.

Ao professor Raimundo Rocha dos Santos, pela disponibilidade, profissionalismo e sugestões para o trabalho.

À Thereza, Marcelo, Gabriela, Thunes e Gustavo, por me receberem e incentivarem no período em que estive longe de casa.

Aos aos professores e amigos da UFMT, por contribuírem com a minha formação e tornar o ambiente de trabalho tão agradável. Em especial à minha amiga Clarice Souza Dias, pelas muitas horas de seu tempo, atenção e companheirismo.

Aos professores e alunos do grupo de Sistemas de Férmions Fortemente Correlacionados da UFRJ, pelas discussões que contribuíram para esse trabalho.

À CAPES, pelo apoio financeiro.

Resumo

Modelo de Hubbard bidimensional em uma rede com padrão tabuleiro de xadrez

Alexandra Valentim

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

Co-Orientador: Prof. Dr. Alberto S. de Arruda

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Mato Grosso como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Ciências - M.Sc. - (Física).

Neste trabalho investigamos os efeitos das correlações eletrônicas e energia atômica em uma heteroestrutura fermiônica com padrão tabuleiro de xadrez modelada pela Hamiltôniana simetrizada de Hubbard com interação dependente do sítio. Nesse modelo as correlações eletrônicas estão distribuídas de forma não-homogênea em uma rede quadrada formando duas sub-redes. Em uma das sub-redes a correlação eletrônica é considerada nula $U = 0$. Para a outra sub-rede $U \neq 0$ e, além disso, cada vez que esses sítios são ocupados, a energia do sistema aumenta em uma quantidade ε . Para extrair informações que possam ser comparadas com a experiência, como funções resposta e diagramas de fase, usamos simulações de Monte Carlo Quântico. A partir da análise das propriedades de transporte e das funções de correlação, pudemos determinar a fronteira das transições de fase a temperaturas finitas, ou, por extrapolações, no estado fundamental. Nas regiões do diagrama em que as correlações eletrônicas ou energia atômica são predominantes encontramos respectivamente uma fase isolante de Mott e isolante de banda. Quando ε é nulo o sistema se comporta como um metal em uma faixa que corresponde a $U = 0$ até $U = 3$; para ε não-nulo o sistema é metálico a partir de $U = 4\varepsilon$ até a fronteira do regime isolante de Mott ou metal pobre. A fase metal pobre aparece entre a transição isolante de banda metal e

para $\varepsilon \leq 0,5$ entre a transição metal isolante de Mott. As correlações anti-ferromagnéticas estão presentes, com maior ou menor intensidade, em toda a região do diagrama, no entanto, o sistema não apresenta magnetização na sub-rede e, portanto, não é antiferromagnético para $U < 4$. Estimamos que se a fase antiferromagnética existir ela possivelmente venha a ocorrer na região isolante de Mott, onde as correlações magnéticas são mais intensas.

Palavras-chave: sistemas fortemente correlacionados, modelo de Hubbard, simulação de Monte Carlo Quântico.

Áreas do conhecimento: matéria condensada, sistemas fortemente correlacionados.

Abstract

Two-dimensional Hubbard Model in a checkerboard patterns lattice

Alexandra Valentim

Advisor: Prof^a. Dr^a. Thereza Cristina de Lacerda Paiva

Co-Advisor: Prof. Dr. Alberto S. de Arruda

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

In this work we investigate the effects of the electronic correlations and local site energy in a fermionic heterostructure with a checkerboard pattern modeled by symmetrized Hubbard Hamiltonian with site-dependent Coulomb repulsion. In this model the on-site electronic correlations and local site energy are arranged in a square lattice forming two sublattices. In one of the sublattices both are considered null, $U = 0$ and ε . In another sublattice $U \neq 0$ and, furthermore, the energy of the system increases by ε quantity every time these sites are occupied. To obtain informations that can be compared with the experience, as response functions and phase diagrams, we use Quantum Monte Carlo simulations. From analysis of the transport properties and correlation functions, we determined the boundary of phase transitions in finite temperature or by extrapolation in the ground state. In regions of the phase diagram in which the electronic correlations or atomic energy dominates, we find a Mott insulator and band insulator respectively. When ε is null the system is a metal in a region that extends from $U = 0$ to $U = 3t$ and when ε is nonzero the system is metallic starting at $U = 4\varepsilon$ until the border of Mott insulator regime or poor-metal regime. The poor-metal phase appears as a intermediate phase in the band insulator to metal transition and, when $\varepsilon \leq 0.5$, between the metal to Mott insulator transition. Antiferromagnetic correlations are present, with greater or lesser

degree, over all the region of the diagram, however, the system doesn't exhibit antiferromagnetic long-range order at $U < 4$. We estimate that if the antiferromagnetic phase exist it will arise in the Mott insulator region, where the magnetic correlations are strongest.

Keywords: strongly correlated systems, Hubbard model, quantum Monte Carlo simulation.

knowledge Areas: condensed matter, strongly correlated systems.

Conteúdo

1	Introdução	15
2	Efeitos de interação em sistemas tight-binding	17
2.1	Modelo de Hubbard	18
2.2	Limites de sistema não-interagente e de acoplamento forte . .	23
2.3	Simetrias do modelo	26
3	Modelo de Hubbard inomogêneo	29
3.1	Modelo de Hubbard iônico (MHI)	30
3.2	Modelo de Hubbard com interação dependente do sítio (MHIDS)	32
3.3	Modelo de Hubbard na rede quadrada com padrão tabuleiro de xadrez	36
4	Método computacional	39
4.1	Monte Carlo Quântico	40
4.2	Simulação	43
4.3	Variáveis de interesse	45
5	Resultados	50
5.1	Propriedades de transporte	51
5.2	Ocupação nos sítios	54
5.3	Correlações magnéticas	55
5.4	Diagrama de fase	62
6	Conclusões	69

Lista de Figuras

2.1	<i>Sob um potencial periódico fraco, os níveis de energia coincidem com o potencial de um átomo isolado. Para valores finitos de acoplamento interatômico, os níveis se dividem formando bandas. Adaptado da Ref.[20]</i>	20
2.2	<i>O centro da figura é o centro da primeira zona de Brillouin. Na banda semi-cheia, a superfície de Fermi é um quadrado e está encaixada na 1ª zona de Brillouin. Adaptado da Ref. [21]</i>	24
2.3	<i>No caso não-interagente (a), à temperatura zero todos os estados são preenchidos. No estado isolante de Mott (b) o custo em energia para ocupar duplamente um determinado sítio dá origem a um gap da ordem de U que separa a densidade de estados em duas bandas.</i>	25
3.1	<i>Os sítios brancos, sub-rede A, tem potencial químico menor que os pretos, sub-rede B. A magnitude dessa diferença é proporcional a Δ. Adaptado da Ref. [29]</i>	30
3.2	<i>Diagramas de fase do MHI em dimensão infinita obtidos por DMFT. MI, M e BI representam respectivamente as regiões isolante de Mott, metal e isolante de banda. Extraídos das referências [31, 16].</i>	31
3.3	<i>Diagrama de fase do MHI em duas dimensões obtido por CD-MFT retirado da Ref. [3]. MI, BI e BO representam respectivamente as regiões isolante de Mott, isolante de banda e isolante correlacionado.</i>	32

-
- 3.4 *Diagrama de fase do MHI em duas dimensões adaptado da Ref. [30]. Os símbolos são resultados de simulações de Monte Carlo Quântico e desenharam a fronteira entre as fases. MI e BI representam respectivamente as regiões isolante de Mott e isolante de banda 32*
- 3.5 *Momento local em diferentes sítios da rede i em uma cadeia unidimensional de tamanho 12, com $L_U = 1$ (tamanho da camada magnética) e $L_0 = 3$. ρ é a densidade eletrônica, os quadrados se referem a $U = 3$ e os triângulos a $U = 12$. Os símbolos cheios e vazios representam os sítios magnéticos e não-magnéticos respectivamente. Adaptado da Ref. [13] 34*
- 3.6 *Momento local nos sítios repulsivos em função da densidade eletrônica para quatro diferentes configurações da super-rede magnética unidimensional com 12 sítios. O símbolo quadrado vazio representa a rede homogênea não-interagente (sistema metálico) e a linha pontilhada representa a rede homogênea no limite fortemente correlacionado (sistema isolante). Retirado da Ref.[14] 35*
- 3.7 *Diagrama de fase no método DMFT como função do preenchimento, e da fração de sítios com $U \neq 0$. Para $0 < f < 0,4$ a região antiferromagnética (AF) aumenta em relação ao caso homogêneo ($f = 0$). Adaptado da Ref. [15] 36*
- 3.8 *Rede quadrada com padrão tabuleiro de xadrez. Os sítios com $U \neq 0$ e $\varepsilon \neq 0$ e $U = 0$ e $\varepsilon = 0$ são atribuídos a átomos de naturezas diferentes. 38*
- 4.1 *Padrão de repetição dos arranjos ferromagnético e antiferromagnético na rede quadrada bidimensional homogênea. 46*
- 4.2 *Função de correlação corrente-corrente ao longo da direção x como função do tempo imaginário τ para o inverso da temperatura $\beta = 10$ com discretização $\Delta\tau = 0,125$ 48*
- 4.3 *Densidade de estado de um isolante de Mott. Banda inferior de Hubbard totalmente preenchida e a superior totalmente vazia [7] 49*
-

5.1	<i>Condutividade dc como função da temperatura, para diversos valores da energia atômica na banda semi-cheia.</i>	51
5.2	<i>Condutividade dc como função da temperatura em escala logarítmica, para os estados metal pobre ($\varepsilon = 0$), metálico ($\varepsilon = 0, 5$) e isolante ($\varepsilon = 2, 0$) na banda semi-cheia.</i>	52
5.3	<i>Densidade de estados no nível de Fermi como função da temperatura, para diversos valores da energia atômica na banda semi-cheia.</i>	53
5.4	<i>Densidade eletrônica como função da temperatura nos sítios livres (pontos vazios) e repulsivos (pontos cheios) na banda semi-cheia.</i>	54
5.5	<i>Densidade eletrônica como função da correlação eletrônica na banda semi-cheia. Os símbolos vazios representam sítios livres de correlação ($U = 0$) e os cheios representam os sítios repulsivos ($U \neq 0$).</i>	55
5.6	<i>Perfil do momento local como função da correlação eletrônica para diferentes valores da energia atômica. Os símbolos vazios representam sítios livres de correlação ($U = 0$) e os cheios representam os sítios repulsivos ($U \neq 0$).</i>	56
5.7	<i>Função de correlação magnética no espaço real entre dois spins em uma rede com tamanho linear $L = 10$ e $U = 4$.</i>	57
5.8	<i>Fator de estrutura como função de U e do vetor momento para diferentes valores da energia atômica com $\beta = 16$ na rede 10×10.</i>	58
5.9	<i>Fator de estrutura magnético em uma rede com tamanho linear $L = 10$, $U = 4$, para três diferentes valores da temperatura. . .</i>	59
5.10	<i>Fator de estrutura antiferromagnético em função de β para quatro diferentes tamanhos da rede, $L = 6, 8, 10$ e 12.</i>	60
5.11	<i>Extrapolação de $S(\pi, \pi)$ para $U = 4$, $\varepsilon = 0$ e $\varepsilon = 2$.</i>	61
5.12	<i>Condutividade σ_{dc} na banda semi-cheia como função de U para três diferentes temperaturas, $\beta = 10, 12$ e 16. A região onde as três linhas se cruzam separa as fases metálica e isolante. . .</i>	62

-
- 5.13 *Diagrama da condutividade dc em função de U para diferentes valores da temperatura, $\beta = 10, 12$ e 16 , e da energia atômica, $\varepsilon = 0, 0,25, 0,5, 1, 1,5$ e 2 63*
- 5.14 *Diagrama da densidade de estados em função de U para diferentes valores da temperatura, $\beta = 10, 12$ e 16 , e da energia atômica, $\varepsilon = 0, 0,25, 0,5, 1, 1,5$ e 2 64*
- 5.15 *Sinal médio do produto dos determinantes fermiônicos como função de U 65*
- 5.16 *O logaritmo da média do sinal do produto de determinantes fermiônicos como função do inverso da temperatura no modelo de Hubbard homogêneo em uma rede de tamanho linear $L=4$ com densidade eletrônica $n = 0,625$. Adaptado da Ref.[43] . . . 66*
- 5.17 *Comportamento função de correlação corrente-corrente como função da temperatura em escala logarítmica para diferentes valores da correlação eletrônica. A linha tracejada representa a reta T e a linha pontilhada representa a reta T^2 67*
- 5.18 *Diagrama de fase do modelo de Hubbard bidimensional em uma rede com padrão tabuleiro de xadrez. As siglas BI, M, e MI se referem respectivamente as fases isolante de banda, metal e isolante de Mott. A área hachurada indica a fase metal pobre. 68*
-

Capítulo 1

Introdução

No decorrer de décadas, o estudo das transições metal-isolante, metal semicondutor, isolante-supercondutor, transições de fases magnéticas, superfluidas vem se apresentando como um desafio em física da matéria condensada [1]. Atualmente, com o desenvolvimento de novos materiais, um dos desafios tem sido identificar parâmetros de ordem que, em analogia a fases já bem estabelecidas, possam explicar o comportamento das grandezas físicas que não se enquadram dentro de nenhuma fase já conhecida [2, 3] .

Dentro da abordagem de férmions correlacionados, algumas caracterizações têm sido feitas em termos de funções de correlação e do comprimento de correlação, obtidas a partir de simulações de Monte Carlo Quântico [4]. Um considerável progresso tem sido alcançado com a explicação da fase isolante de Mott, mediada por correlações eletrônicas [5, 6, 7], do ordenamento magnético e de fases associadas a desordem e a instabilidades estruturais [8]. Em termos das correlações eletrônicas, uma grande variedade de parâmetros termodinâmicos tem sido analisados, tais como densidade eletrônica, temperatura e intensidade das correlações.

Nesse contexto, o modelo de Hubbard, originalmente introduzido para explicar o magnetismo e a transição metal-isolante em sólidos com fortes correlações eletrônicas e com bandas de energia estreitas, se mantém em discussões atuais como o surgimento de inomogeneidades na densidade de carga com padrão *stripes* ou *checkerboards* [9, 10], e tem ganhado uma nova perspectiva com o confinamento de átomos fermiônicos em redes ópticas [11, 12].

Nesses sistemas é possível controlar os parâmetros da rede óptica de modo a simular o modelo de Hubbard, possibilitando uma comparação precisa dos diagramas de fase experimentais e teóricos. Tais comparações seriam impossíveis em estado sólido pois a Hamiltoniana de Hubbard (de uma banda) descreve apenas de forma aproximada a complexidade de orbitais atômicos e mesmo assim requer um esforço computacional que aumenta de acordo com com L^d , onde L é o tamanho linear do sistema.

Para além das contribuições desse modelo à sistemas homogêneos, algumas propostas foram feitas no intuito de compreender heteroestruturas compostas por átomos de naturezas diferentes [13, 14] . Nesse sentido a Hamiltoniana de Hubbard têm sido empregada, com algumas modificações, para estudar o efeito das impurezas não-magnéticas [15] e variação da energia atômica [16] nessas estruturas. No presente trabalho combinamos essas duas variações em uma rede quadrada com padrão tabuleiro de xadrez, analisamos as correlações magnéticas e as propriedades de transporte do sistema, e elaboramos o diagrama de fases do modelo com o objetivo de investigar em que circunstâncias os resultados do caso homogêneo correspondem a sistemas mais realísticos, com impurezas e inhomogeneidades.

Capítulo 2

Efeitos de interação em sistemas tight-binding

Na maioria dos casos podemos determinar se um sólido cristalino é metálico ou isolante analisando a sua estrutura de bandas. Para tais sólidos os níveis de energia são divididos em bandas separadas por *gaps*, onde não há estados. À temperatura $T = 0$ os níveis de energia são preenchidos em ordem crescente, de maneira que se o nível de Fermi estiver no meio de uma banda temos um metal e se estiver no meio de um *gap* temos um isolante, com *gap* maior que $k_B T$, ou semiconductor, com a largura do *gap* da ordem de $k_B T$.

No entanto, nem todos os sólidos são bem descritos pela teoria de bandas. Isso ocorre porque muitas vezes os efeitos de interação elétron-elétron não são tratados de maneira adequada e acabam levando a previsões errôneas, como no caso dos monóxidos de metais de transição (FeO , NiO , CoO), que são isolantes antiferromagnéticos e foram preditos como metálicos.

Nesse contexto, modelos *tight-binding*, tais como o de Hubbard [5], têm descrito fases isolantes com diferentes graus de sucesso. No limite de elétrons localizados, as correlações incorporadas por eles ainda fazem emergir comportamentos magnéticos, que são bem explicados por modelos de momentos magnéticos localizados[17].

No que se segue revisaremos as principais simplificações propostas por Hubbard às correlações eletrônicas [5, 1]. Analisaremos os limites de sistema não-interagente e de acoplamento forte, e as simetrias do modelo.

2.1 Modelo de Hubbard

Uma teoria exata de íons e elétrons interagentes em um sólido pode ser descrita pela Hamiltoniana:

$$H = \sum_I \frac{p_I^2}{2M_I} + \sum_i \frac{p_i^2}{2m_e} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}_i|} + \sum_{i,I} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|},$$

onde p_I^2 e M_I são respectivamente o módulo do momento e a massa do íon com número atômico Z_I na posição \mathbf{R}_I , p_i e m_e são respectivamente o módulo do momento e a massa de um elétron na posição \mathbf{r}_i e e é a carga elementar.

Para simplificá-la podemos usar a aproximação de Born-Oppenheimer e desacoplar o movimento dos núcleos e elétrons, eliminando a possibilidade de interação elétron-fônon. Essa aproximação leva em conta que $M_I/m_e \sim 10^3 - 10^5$ o que implica que a energia cinética do núcleo será muito maior que a dos elétrons que o circundam. Assim, o núcleo sente a presença dos elétrons como se estes fossem uma nuvem de carga, enquanto que os elétrons sentem os núcleos como se estes estivessem estáticos. Desta forma, os elétrons adaptam-se instantaneamente a qualquer posição dos núcleos.

Se considerarmos ainda que os íons estão fixos na rede, o primeiro termo da Hamiltoniana de íons e elétrons interagentes será nulo e os dois últimos termos poderão ser substituídos pelo potencial cristalino $V(\mathbf{r}_i)$ resultando na Hamiltoniana de elétrons interagentes sujeitos a um potencial cristalino periódico :

$$H = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad . \quad (2.1)$$

Na linguagem da segunda quantização, o espaço de excitações é representado compactamente em termos de excitações de quase-partículas. Nesse espaço, os termos de um e dois corpos podem ser reescritos como:

$$H = \sum_{\mu\nu} \langle \mu|h|\nu \rangle c_\mu^\dagger c_\nu + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\sigma\tau} \langle \mu\nu|v|\sigma\tau \rangle c_\mu^\dagger c_\nu^\dagger c_\tau c_\sigma, \quad (2.2)$$

sendo

$$\langle \mu | h | \nu \rangle = \int \phi_\mu^*(\mathbf{r}) \left[\frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \phi_\nu(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

e

$$\langle \mu\nu | v | \sigma\tau \rangle = \int \phi_\mu^*(\mathbf{r}) \phi_\nu^*(\mathbf{r}') \left[\frac{e^2}{2|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \phi_\sigma(\mathbf{r}) \phi_\tau(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' .$$

Os operadores c_μ , c_ν , c_τ , e c_σ são operadores de férmions que obedecem à relação de anticomutação $[c_\mu^\dagger, c_\nu]_+ = \delta_{\mu\nu}$ e suas variações.

Um modelo *tight-binding* usual consiste em tratar apenas o primeiro termo da Hamiltoniana da Eq.(2.2) considerando que os elétrons estão fortemente ligados ao núcleo. O modelo de Hubbard consiste em introduzir algumas simplificações no segundo termo dessa Hamiltoniana, no intuito de capturar, ao menos parcialmente, o efeito das interações. Para tanto, escolhamos o conjunto de funções ϕ como funções de Bloch $\psi_{\mathbf{k}}^i$, sendo \mathbf{k} um vetor na primeira zona de Brillouin e i o índice de banda. A cada função de Bloch teremos, associados à variável de spin σ , dois operadores de criação ou aniquilação, correspondendo, respectivamente, ao spin para cima ou spin para baixo. Assim,

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{k}i\sigma} \langle \mathbf{k}i | h | \mathbf{k}i \rangle c_{\mathbf{k}i\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}i\sigma} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2} \sum_{i_1i_2i'_1i'_2} \sum_{\sigma\sigma'} \langle \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2i_1i_2 | v | \mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2i'_1i'_2 \rangle c_{\mathbf{k}_1i_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_1i_1\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}_2i_2\sigma} c_{\mathbf{k}_2i_2\sigma'} . \end{aligned}$$

Se a superfície de Fermi estiver dentro de uma única banda de condução, justifica-se ignorar elementos da matriz que acoplam outras bandas, se elas estiverem bem separadas da energia de Fermi [18]. Este truncamento leva ao modelo de Hubbard de uma banda,

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle \mathbf{k} | h | \mathbf{k} \rangle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2\sigma\sigma'} \left\langle \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 \left| \frac{1}{r} \right| \mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2 \right\rangle c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'_2\sigma'} c_{\mathbf{k}'_1\sigma} .$$

No limite atômico podemos expandir a Hamiltoniana em uma base lo-

cal que reflete os estados orbitais atômicos de um íon isolado, supondo que quando um elétron esteja próximo a um ponto \mathbf{R}_i da rede, sua função de onda seja aproximadamente igual a $w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, onde $w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ são funções de Wannier [19]. A função de onda desse elétron em qualquer ponto do cristal será uma combinação linear desses orbitais atômicos, que seja normalizada e satisfaça o teorema de Bloch:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_i w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i},$$

sendo N o número de sítios na rede.

Quando a superposição de orbitais atômicos vizinhos é não-nula, como em um sólido real, os estados, anteriormente degenerados se separam e formam bandas de energia, como pode ser visto na Figura 2.1. Se essa superposição for muito pequena, a função converge para o k -ésimo orbital atômico.

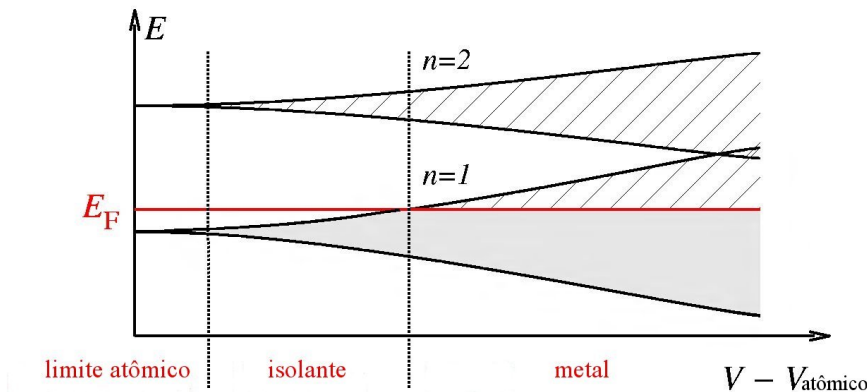


Figura 2.1: Sob um potencial periódico fraco, os níveis de energia coincidem com o potencial de um átomo isolado. Para valores finitos de acoplamento interatômico, os níveis se dividem formando bandas. Adaptado da Ref.[20]

Semelhantemente à relação entre os estados de Bloch, os estados de Wannier nos permitem escrever:

$$c_{i\sigma}^\dagger = \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \quad ; \quad c_{i\sigma} = \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} .$$

Para bandas estreitas, as funções de Wannier devem ser próximas das funções atômicas. Portanto, se escolhermos o orbital atômico s teremos um modelo simplificado de apenas um nível de energia por átomo que incorpora correlações entre um par de elétrons no mesmo sítio.

Obtemos, assim, a Hamiltoniana de Hubbard na banda s , em que cada sítio pode ser ocupado por, no máximo, dois elétrons:

$$H = \sum_{ij} \sum_{\sigma} \langle i|h|j \rangle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'} \left\langle ij \left| \frac{1}{r} \right| kl \right\rangle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma'}^{\dagger} c_{l\sigma'} c_{k\sigma} \quad (2.3)$$

na base das funções de Wannier, com

$$\langle i|h|j \rangle = \int w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) h(\mathbf{r}) w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r} \quad (2.4)$$

e

$$\left\langle ij \left| \frac{1}{r} \right| kl \right\rangle = e^2 \int \frac{w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k) w(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_l)}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (2.5)$$

Hamiltonianas desse tipo formam a base de inúmeras análises do papel das interações em sistemas eletrônicos, denominados sistemas fortemente correlacionados; consideramos sistemas de interação forte aqueles em que a correlação eletrônica é de ordem igual ou superior à interação atômica.

Como estamos no limite de elétrons fortemente ligados, a superposição dos orbitais atômicos vizinhos é muito pequena. Isso justifica considerar que os índices i , j , k e l são todos iguais, ou, no máximo, se referem a vizinhos mais próximos.

Dessa forma, o termo de energia potencial de uma partícula, quando incorporado ao da energia cinética, resulta em um termo de tunelamento ou *hopping*, que, basicamente, desempenha o papel de fazer os elétrons se moverem pelos sítios da rede cristalina. O elemento de matriz $\langle i|h|j \rangle$ define o parâmetro de *hopping* t_{ij} cuja magnitude é controlada pela superposição efetiva entre os orbitais atômicos vizinhos. No limite atômico mais extremo $t_{ij} = \delta_{ij}$ e portanto não há transporte interatômico.

O elemento de matriz, $\langle ij|v|kl \rangle$ dá origem a quatro termos de interação,

de modo que a Hamiltoniana total fica:

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i \left\langle ii \left| \frac{1}{r} \right| ii \right\rangle \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} c_{i\sigma} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} \left\langle ij \left| \frac{1}{r} \right| ji \right\rangle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} c_{j\sigma} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} \left\langle ij \left| \frac{1}{r} \right| ij \right\rangle n_{i\sigma'} n_{j\sigma'} + \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} \left\langle ii \left| \frac{1}{r} \right| jj \right\rangle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} c_{j\sigma} \quad ,
\end{aligned}$$

sendo

$$\left\langle ij \left| \frac{1}{r} \right| ji \right\rangle = e^2 \int \frac{w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) w^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) w(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad .$$

a interação de troca e $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador número de elétrons com spin σ no sítio i .

O primeiro termo de correlação se refere à interação de elétrons em um mesmo sítio. Como consequência do princípio de exclusão de Pauli, não podemos criar duas partículas com o mesmo spin em um mesmo sítio, de modo que a soma sobre as configurações de spins no mesmo sítio deve ser escrita como:

$$\sum_i \left\langle ii \left| \frac{1}{r} \right| ii \right\rangle \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} c_{i-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} = \frac{I}{2} \sum_i \sum_{\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \quad ,$$

onde

$$I = e^2 \int \frac{|w(\mathbf{r})|^2 |w(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad .$$

Os outros termos na Hamiltoniana representam interações entre cargas localizadas em sítios vizinhos. Eles envolvem integrais sobre módulos quadrados das funções de Wannier que acoplam flutuações de densidade entre sítios diferentes. No limite atômico essas integrais devem ser, em magnitude, muito menores que I , podendo portanto, ser desprezadas [5, 17], numa primeira aproximação.

Assim, somente as interações entre elétrons localizados em um mesmo átomo são mantidas, rendendo uma energia adicional $U = I/2$ quando o átomo for duplamente ocupado.

As simplificações propostas por Hubbard resultam, então, na Hamiltoniana para uma estrutura de bandas no limite atômico

$$H = \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad , \quad (2.6)$$

caracterizada pelo parâmetro de *hopping* t_{ij} , pela interação local U , e pelo número de elétrons N_e .

Nessa Hamiltoniana, a competição entre a itinerância e a repulsão coulombiana, o preenchimento da banda, o princípio de exclusão de Pauli fundamentam a discussão em torno do modelo.

2.2 Limites de sistema não-interagente e de acoplamento forte

Para o caso em que $U = 0$, a natureza do estado fundamental pode ser conhecida a partir da estrutura de bandas, do nível de Fermi e do número de elétrons no sistema. Se o sistema possuir densidade eletrônica $n = \frac{N_e}{N_s} = 2$, sendo N_s o número de sítios, a sua banda estará completamente cheia. Como não há estados acessíveis acima do nível de Fermi para serem populados (presença de um *gap*), o sistema será um isolante.

Por outro lado se o sistema possuir densidade eletrônica $n \neq 2$ ou $n \neq 0$, a sua banda estará parcialmente cheia, existindo, portanto, estados disponíveis acima do nível de Fermi para serem excitados (ausência de *gap*). Isso implica, por sua vez, que o sistema é um metal dentro dessa descrição.

Nessas condições, é possível calcular, analiticamente, a energia dos elétrons em função de um vetor de onda \mathbf{k}

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{j=1}^d \cos k_j$$

onde \mathbf{k} é um vetor na primeira zona de Brillouin, sendo k_j sua componente

na direção j , e d a dimensão da rede hipercúbica.

A Figura 2.2 mostra a superfície de Fermi, em uma rede quadrada infinita, para as densidades eletrônicas $\rho = 0, 25, 0, 5, 0, 75, 1, 1, 25$ e $1, 5$ a partir do centro da figura.

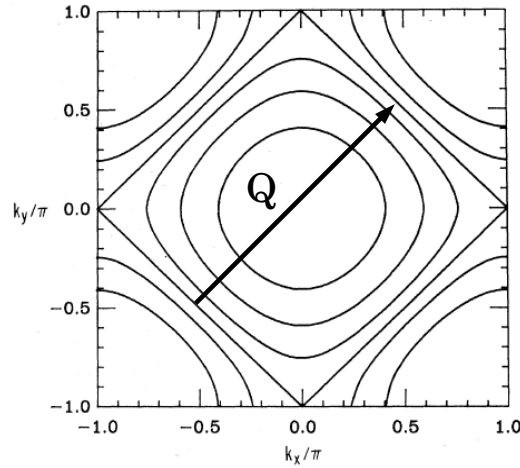


Figura 2.2: O centro da figura é o centro da primeira zona de Brillouin. Na banda semi-cheia, a superfície de Fermi é um quadrado e está encaixada na 1ª zona de Brillouin. Adaptado da Ref. [21]

Para o caso da banda semi-cheia, é possível desenhar um vetor \mathbf{Q} da rede recíproca, que conecta dois lados da mesma superfície de Fermi. Essa condição, $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = \epsilon_{\mathbf{k}}$, é conhecida como condição de *nesting*, ou encaixamento da superfície de Fermi [21].

Quando a rede está semi-preenchida e $U \neq 0$, os elétrons só poderão se mover se tiverem energia cinética suficiente para superar essa energia de interação. Nesse caso, demonstra-se que o estado fundamental do sistema, para qualquer parâmetro de interação $U > 0$ em uma rede quadrada, é isolante, com fortes correlações antiferromagnéticas presentes [21, 22].

Podemos pensar que se $t_{ij} < U$, os elétrons não terão energia suficiente para ocupar duplamente um determinado sítio, fazendo surgir um *gap* na densidade de estados eletrônica. Esse *gap* difere de muitas maneiras fundamentais dos *gaps* de banda, mas também origina um comportamento isolante chamado de isolante de Mott. Na Figura 2.3 temos uma representação da densidade de estados para um sistema metálico ($U = 0$) e para um isolante

de Mott ($U \neq 0$).

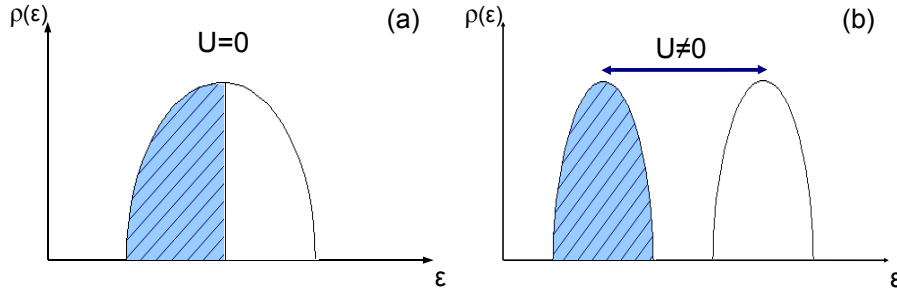


Figura 2.3: No caso não-interagente (a), à temperatura zero todos os estados são preenchidos. No estado isolante de Mott (b) o custo em energia para ocupar duplamente um determinado sítio dá origem a um gap da ordem de U que separa a densidade de estados em duas bandas.

A descrição de uma transição metal-isolante mediada por U foi feita por Hubbard [7], e pode ser compreendida de uma maneira bastante simplificada. Partindo de um valor de U grande, à medida que este diminui haverá um valor crítico em que as bandas se sobrepõem e formam um metal.

Obter esse valor crítico e saber o que ocorre nas proximidades dessa transição é um problema que ainda não tem uma solução simples. Basta lembrar que esse modelo só foi resolvido exatamente em uma dimensão [22], para o caso de uma banda exatamente semi-cheia e, nesse caso especial, o sistema não efetua transição de Mott em um parâmetro de interação crítico U_c finito.

No limite de acoplamento forte ($U \gg t_{ij}$) e ainda na banda semi-cheia, podemos mapear o modelo de Hubbard, usando teoria de perturbação de segunda ordem, com $t_{ij} = t$ constante, no modelo de Heisenberg:

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad ,$$

onde a constante $J = \frac{t^2}{U}$ positiva indica que o sistema favorece o ordenamento antiferromagnético [1]. Essa configuração de spin possibilita a ocorrência de *hopping* virtual, situação em que para minimizar o custo energético de dupla ocupação, um elétron salta para o sítio vizinho e retorna em seguida, desde que o elétron vizinho tenha um spin antiparalelo.

2.3 Simetrias do modelo

A Hamiltoniana de Hubbard obedece a algumas simetrias fundamentais que ajudam a compreender o que acontece quando modificamos determinadas variáveis no modelo [23]. Entre elas temos as simetrias de translação e conservação de carga e spin. Por exemplo, o fato de o operador número total de elétrons,

$$N_e = \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \quad (2.7)$$

comutar com a Hamiltoniana indica que o número total de elétrons no sistema se conserva. Portanto os cálculos em diferentes densidades eletrônicas são efetivamente independentes. O operador spin total, em termos das matrizes de Pauli $\vec{\sigma}$,

$$\vec{S}_\alpha = \frac{1}{2} \sum_{i\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger \vec{\sigma}^{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'} \quad (2.8)$$

também comuta com a Hamiltoniana indicando que estados com diferentes valores de S_α estão desacoplados. Em particular na direção z ,

$$S_z = \frac{1}{2} \sum_i m_i, \quad (2.9)$$

onde $m_i = n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}$ é a magnetização no sítio i . Já a simetria de translação dos elétrons itinerantes se dá por que os átomos se encontram em uma estrutura periódica de rede.

Além dessas simetrias mais gerais, existem simetrias específicas desse tipo de modelo. Como, por exemplo, a simetria partícula-buraco e simetria spin para baixo partícula-buraco, que transformam os operadores fermiônicos de partículas (elétrons) $c_{j\sigma}$, e seus complexos conjugados, em operadores de buracos $\tilde{c}_{j\sigma}$ [24].

Portanto, essas transformações alteram a densidade de elétrons e de buracos no sistema, sendo, por isso, conveniente escrever a Hamiltoniana do

modelo no ensemble grã-canônico:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}. \quad (2.10)$$

sendo, $H.c.$ o hermitiano conjugado da expressão anterior e $t_{ij} = -t$ constante.

A transformação partícula-buraco completa ocorre quando as partículas com uma dada polarização são mapeadas em buracos com a mesma polarização através de

$$c_{j\sigma} \rightarrow \tilde{c}_{j\sigma}^\dagger = (-1)^j c_{j\sigma}, \quad \text{tal que} \quad n_{j\sigma} \rightarrow \tilde{n}_{j\sigma} = 1 - n_{j\sigma}. \quad (2.11)$$

Relacionando, respectivamente, os graus de liberdade de carga e spin:

$$\begin{aligned} n_j \equiv n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} &\rightarrow \tilde{n}_j = 2 - (\tilde{n}_{j\uparrow} + \tilde{n}_{j\downarrow}) = 2 - n_j, \\ m_j \equiv n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow} &\rightarrow \tilde{m}_j = -(\tilde{n}_{j\uparrow} - \tilde{n}_{j\downarrow}) = -m_j, \end{aligned}$$

Sob essa transformação, que preserva os graus de liberdade de carga e spin, a Eq.(2.10) torna-se:

$$\begin{aligned} H &= t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} [\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + H.c.] (-1)^{i+j} + U \sum_i \tilde{n}_{i\uparrow} \tilde{n}_{i\downarrow} \\ &+ [\mu - U] \sum_{i\sigma} \tilde{n}_{i\sigma} + [U - 2\mu] N_s. \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde, além do último termo que é constante e contribui apenas uma mudança na energia total, observamos outras duas diferenças.

Em primeiro lugar o sinal do termo de *hopping* é invertido. No caso de *hopping* entre primeiros vizinhos, essa diferença pode ser contornada se lançarmos mão da simetria de uma rede bipartite $(-1)^{i+j} = -1$. Uma rede é bipartite quando puder ser decomposta em duas sub-redes, onde todos os vizinhos mais próximos de um sub-rede são membros da outra sub-rede. Assim a Eq.(2.10) pode ser reescrita como:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} [\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + H.c.] + U \sum_i \tilde{n}_{i\uparrow} \tilde{n}_{i\downarrow} + [\mu - U] \sum_{i\sigma} \tilde{n}_{i\sigma}, \quad (2.13)$$

onde foram omitidos os termos constantes.

A segunda diferença está relacionada à densidade de elétrons e buracos no sistema. Essa diferença é contornada quando $\mu = U/2$, o que torna a Hamiltoniana (2.13) invariante sob a transformação partícula-buraco. Portanto essa é a condição para a banda semi-cheia.

A simetria spin \downarrow partícula-buraco está relacionada à transformação:

$$c_{j\uparrow} \rightarrow \tilde{c}_{j\uparrow}, \quad c_{j\downarrow} \rightarrow \tilde{c}_{j\downarrow}^\dagger = (-1)^j c_{j\downarrow}, \quad (2.14)$$

que não modifica os elétrons com spins para cima e leva os elétrons com spin para baixo em buracos com a mesma polarização [24].

Aplicando essa transformação ao operador número de ocupação, obtemos:

$$n_{j\uparrow} \rightarrow \tilde{n}_{j\uparrow} = n_{j\uparrow}, \quad n_{j\downarrow} \rightarrow \tilde{n}_{j\downarrow} = 1 - n_{j\downarrow} \quad (2.15)$$

Relacionando, respectivamente, os graus de liberdade de carga e spin:

$$\begin{aligned} n_j \equiv n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} &\rightarrow \tilde{m}_j = \tilde{n}_{j\uparrow} - \tilde{n}_{j\downarrow} = n_j - 1, \\ m_j \equiv n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow} &\rightarrow \tilde{n}_j = \tilde{n}_{j\uparrow} + \tilde{n}_{j\downarrow} = 1 + m_j, \end{aligned}$$

observamos que essa transformação leva os graus de liberdade de spin nos de carga e vice-versa.

Aplicando essa transformação na Eq. (2.10) obtemos:

$$\begin{aligned} H = & t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} [\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + H.c.] (-1)^{i+j} - U \sum_i \tilde{n}_{i\uparrow} \tilde{n}_{i\downarrow} \\ & - \mu \sum_i (\tilde{n}_{i\downarrow} - \tilde{n}_{i\uparrow}) + U \sum_i \tilde{n}_{i\uparrow} - \mu N_s. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Comparando com a Eq. (2.10), podemos ver que essa transformação mapeia o modelo de Hubbard atrativo no repulsivo quando $\mu = 0$ ou na presença de um campo magnético $h = 2\mu$ [24].

Capítulo 3

Modelo de Hubbard inomogêneo

A popularização de técnicas de deposição muito precisas, tais como epitaxia de feixe molecular (MBE), *sputtering*, deposição por lasers pulsados, entre outras, tem possibilitado o crescimento controlado de novas estruturas em escala atômica [25, 26]. Essas estruturas, genericamente chamadas de heteroestruturas, são crescidas com diferentes tipos de materiais, de modo a terem propriedades físicas bem definidas.

Uma heteroestrutura bastante estudada é a da super-rede, caracterizada pela repetição periódica de camadas muito finas, crescidas com materiais cujas propriedades são diferentes. Em particular, podemos citar as multicamadas magnéticas metálicas, formadas pelo crescimento alternado de camadas de um material ferromagnético (como os metais de transição, Ferro, Níquel ou Cobalto) e de camadas de um material não-magnético (por exemplo Cu, Ag, Au, Mg e Mn). Nessas heteroestruturas foram observados fenômenos importantes. Alguns com ampla aplicação tecnológica, como a magnetorresistência gigante [27] e outros que ainda vêm sendo estudados, como é o caso do acoplamento das camadas magnéticas nas super-redes [28].

Para modelar esses sistemas, algumas variações do modelo de Hubbard têm sido propostas, como, por exemplo, o modelo de Hubbard iônico (MHI) [29, 30] e o modelo de Hubbard com interação dependente do sítio (MHIDS). Nesse capítulo vamos discutir essas duas variações e suas implicações.

3.1 Modelo de Hubbard iônico (MHI)

É intuitivo pensar que a energia atômica seja diferente nas camadas compostas por átomos diferentes. Assim, o MHI corresponde a acrescentar um potencial periódico à Eq. (2.10), resultando na Hamiltoniana:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_i (\Delta(-1)^i - \mu) (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}).$$

Nesse modelo, Δ representa a magnitude da energia atômica distribuída periodicamente na rede. O termo $\Delta(-1)^i$ acoplado ao potencial químico aumenta esse potencial nos sítios rotulados com i par, e diminui nos sítios rotulados com i ímpar.

No limite não-interagente ($U = 0$), Δ produz a seguinte relação de dispersão [29]:

$$E(\mathbf{k}) = \pm(\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)^{\frac{1}{2}} \quad \text{com} \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y), \quad (3.1)$$

mostrando que o autovalor de energia é separado em duas bandas por um *gap* da magnitude Δ e, portanto, o sistema é um isolante de banda na banda semi-cheia.

Ainda na banda semi-cheia, quando $U \neq 0$ temos outros dois casos limites, $U \gg \Delta$ e $\Delta \gg U$. Como mostrado na Figura 3.1, se $U \ll \Delta$ os elétrons

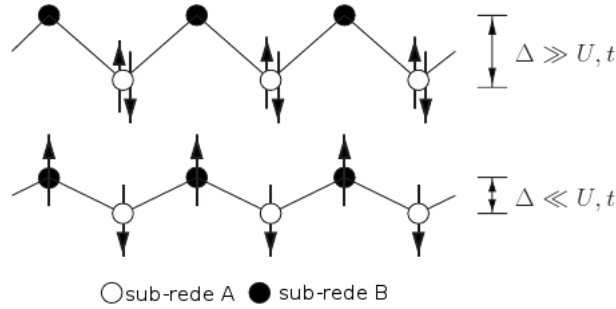


Figura 3.1: Os sítios brancos, sub-rede A, tem potencial químico menor que os pretos, sub-rede B. A magnitude dessa diferença é proporcional a Δ . Adaptado da Ref. [29]

preferirão ocupar duplamente os sítios da sub-rede A e o sistema será um isolante de banda. Por outro lado, se $U \gg \Delta$ a energia será mínima quando o sistema tiver um elétron por sítio, caracterizando um isolante de Mott.

Recentemente, foi mostrado usando *Dynamical Mean Field Theory* (DMFT) em dimensão infinita [31, 16], e, em duas dimensões usando *Cluster Dynamical Mean Field Theory* (CDMFT) [3] e *determinant quantum Monte Carlo* (DQMC) [30], que existe uma fase intermediária entre os dois tipos de isolantes limites.

Os resultados em dimensão infinita, mostrados na Figura 3.2, diferem qualitativamente dos resultados em duas dimensões, Figura 3.3 e Figura 3.4. Os primeiros indicam que a fase intermediária se estende a $\Delta = 0$, enquanto que em duas dimensões a fase intermediária só está presente quando U e Δ são ambos diferentes de zero.

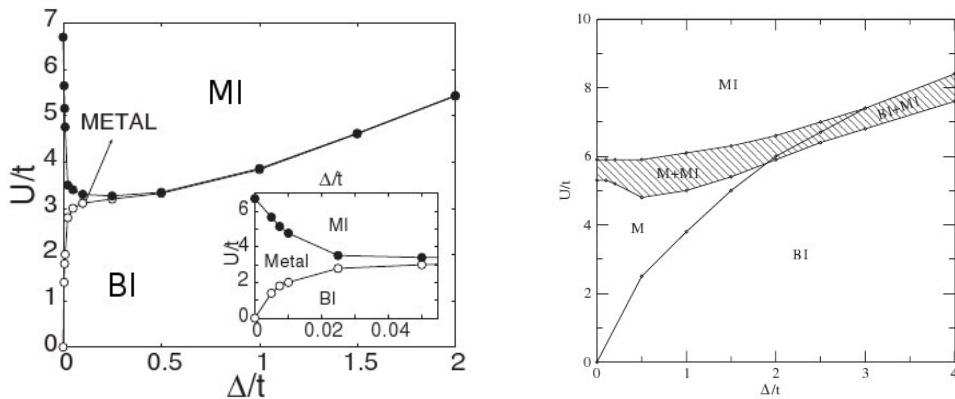


Figura 3.2: Diagramas de fase do MHI em dimensão infinita obtidos por DMFT. MI, M e BI representam respectivamente as regiões isolante de Mott, metal e isolante de banda. Extraídos das referências [31, 16].

A natureza precisa dessa fase ainda está sendo debatida. Cálculos de CDMFT sugerem uma fase isolante correlacionada (BO), mesmo para pequenos valores de U , mas os resultados de DQMC e de DMFT indicam que essa fase é metálica.

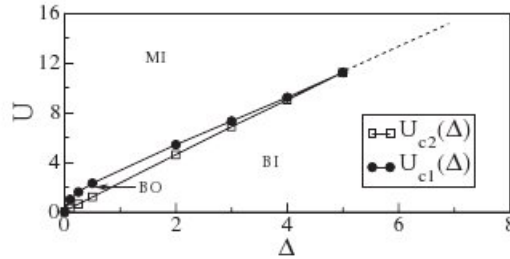


Figura 3.3: Diagrama de fase do MHI em duas dimensões obtido por CDMFT retirado da Ref. [3]. MI, BI e BO representam respectivamente as regiões isolante de Mott, isolante de banda e isolante correlacionado.

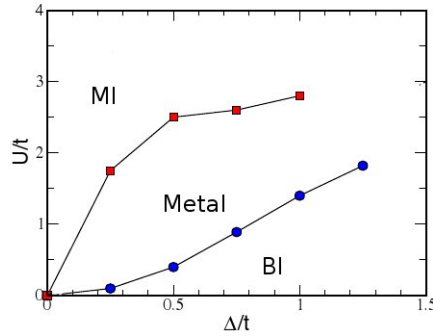


Figura 3.4: Diagrama de fase do MHI em duas dimensões adaptado da Ref. [30]. Os símbolos são resultados de simulações de Monte Carlo Quântico e desenham a fronteira entre as fases. MI e BI representam respectivamente as regiões isolante de Mott e isolante de banda

3.2 Modelo de Hubbard com interação dependente do sítio (MHIDS)

Uma outra variação do modelo de Hubbard, cuja interação U depende do sítio, tem sido usada para estudar multicamadas magnéticas. Em uma das propostas, a Hamiltoniana do sistema é definida como

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) + \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \quad (3.2)$$

onde associa-se $U \neq 0$ às camadas magnéticas e $U = 0$ às camadas não-magnéticas. Esta abordagem é motivada pelo fato de que os átomos magnéticos possuem elétrons desemparelhados em seus orbitais. A esse momento magnético localizado podemos associar uma interação repulsiva que não existe ou é muito fraca nos átomos não-magnéticos.

A presença dessas correlações dependentes da posição faz com que o sistema perca algumas das simetrias presentes no sistema homogêneo. Sob a transformação partícula-buraco Eq.(2.11), por exemplo, a Hamiltoniana do MHIDS torna-se:

$$\begin{aligned}
 H = & - t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + H.c. \right) + \sum_i U_i \tilde{n}_{i\uparrow} \tilde{n}_{i\downarrow} \\
 & - \sum_{i\sigma} (U_i + \mu) \tilde{n}_{i\sigma} + \sum_i (U_i - 2\mu),
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

mostrando que essa transformação mapeia um sistema com potencial químico uniforme em um sistema cujo potencial químico dependa da posição, perdendo assim a simetria partícula-buraco.

A transformação partícula-buraco parcial Eq.(2.14) e Eq.(2.15) aplicada a Hamiltoniana do MHIDS, também leva a um potencial químico dependente da posição:

$$\begin{aligned}
 H = & - t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + H.c. \right) - \sum_i U_i \tilde{n}_{i\uparrow} \tilde{n}_{i\downarrow} \\
 & + \sum_i U_i \tilde{n}_{i\uparrow} - \mu \sum_i (\tilde{n}_{i\uparrow} - \tilde{n}_{i\downarrow}) - \mu
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

refletindo assim a perda de mais uma simetria.

O estudo dessas multicamadas em uma dimensão mostrou a migração dos momentos locais, dos sítios repulsivos para os sítios livres, com a diminuição da densidade eletrônica [13]. A migração é independente das variações do valor da interação eletrônica como mostrado na Figura 3.5, e das diferentes larguras das camadas magnéticas e não-magnéticas.

O momento local é uma medida do magnetismo de um sistema e é definido

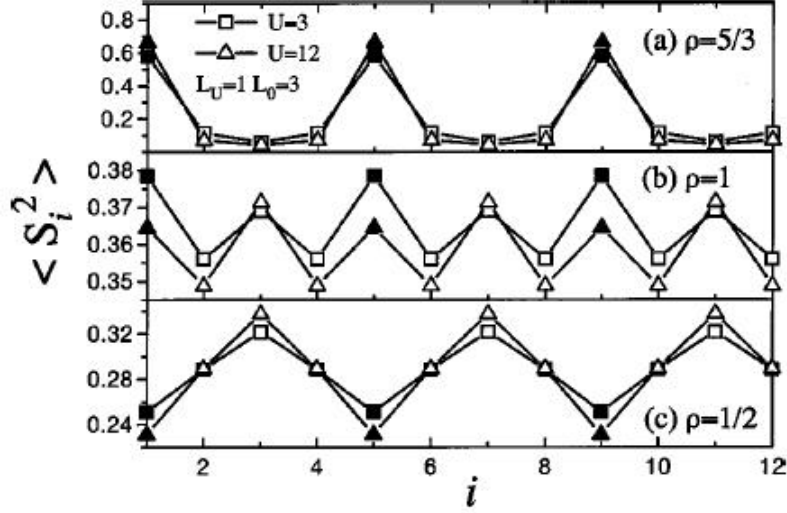


Figura 3.5: Momento local em diferentes sítios da rede i em uma cadeia unidimensional de tamanho 12, com $L_U = 1$ (tamanho da camada magnética) e $L_0 = 3$. ρ é a densidade eletrônica, os quadrados se referem a $U = 3$ e os triângulos a $U = 12$. Os símbolos cheios e vazios representam os sítios magnéticos e não-magnéticos respectivamente. Adaptado da Ref. [13]

como:

$$\langle S_i^2 \rangle = \frac{3}{4} \langle m_i^2 \rangle$$

onde $m_i \equiv n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}$ é a magnetização líquida no sítio i .

A natureza isolante do estado fundamental de um sistema homogêneo de elétrons correlacionados na banda semi-cheia se reflete em um máximo no momento local, pois $\langle S_i^2 \rangle$ está distribuído uniformemente na rede, em um sistema não-interagente, a intensidade de $\langle S_i^2 \rangle$ diminui devido à possibilidade de dupla ocupação.

Na super-rede magnética unidimensional observa-se que ocorre uma mudança considerável no comportamento da densidade correspondente à transição metal-isolante do tipo Mott [14]. No caso homogêneo, a transição ocorre na banda semi-cheia, enquanto que nas multicamadas, a densidade em que a transição ocorre dependerá da configuração da rede, como mostra a Figura 3.6.

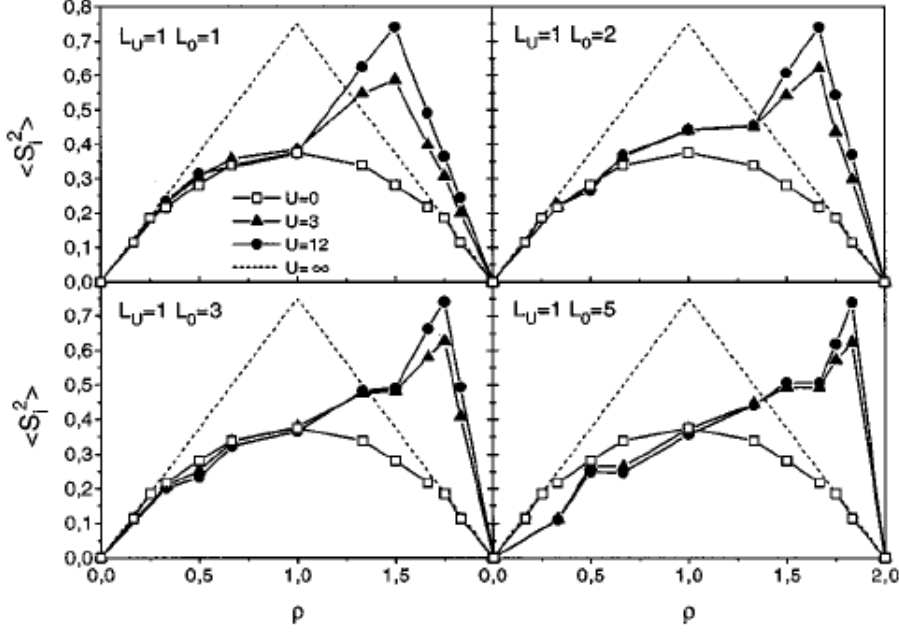


Figura 3.6: Momento local nos sítios repulsivos em função da densidade eletrônica para quatro diferentes configurações da super-rede magnética unidimensional com 12 sítios. O símbolo quadrado vazio representa a rede homogênea não-interagente (sistema metálico) e a linha pontilhada representa a rede homogênea no limite fortemente correlacionado (sistema isolante). Retirado da Ref.[14]

Em duas dimensões observou-se [15] que a presença de sítios com $U \neq 0$, distribuídos aleatoriamente na rede e tratados como impurezas na rede magnética, introduz ordem antiferromagnética de longo alcance para densidades tais que, no caso homogêneo, correspondiam a um estado paramagnético.

Nesse sistema estudado por Ulmke et al [15] foi proposto transferir a condição da banda semi-cheia para um potencial químico nulo. Para tanto escreve-se a Hamiltoniana de Hubbard na sua forma mais simétrica:

$$H = -t \sum_{(ij),\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) + \sum_i U_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}. \quad (3.5)$$

No caso homogêneo, essa transformação acrescenta a constante $\frac{NU_i}{4}$ à Hamiltoniana, mas no caso não-homogêneo essa transformação diminui a

energia apenas nos sítios com interação eletrônica

$$H = - t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) + \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (3.6)$$

$$- \sum_i \left(\mu + \frac{U_i}{2} \right) (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + \sum_i \frac{U_i}{4}.$$

Usando DMFT construiu-se o diagrama de fases para o ordenamento magnético dependendo da fração de sítios não-magnéticos, mostrado na Figura 3.7:

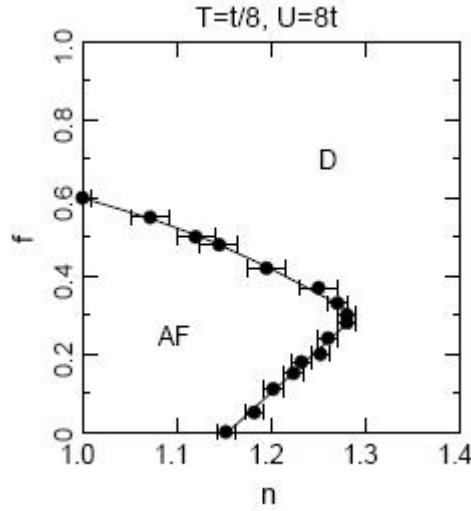


Figura 3.7: Diagrama de fase no método DMFT como função do preenchimento, e da fração de sítios com $U \neq 0$. Para $0 < f < 0,4$ a região antiferromagnética (AF) aumenta em relação ao caso homogêneo ($f = 0$). Adaptado da Ref. [15]

3.3 Modelo de Hubbard na rede quadrada com padrão tabuleiro de xadrez

Segundo as idéias das Seções anteriores, uma outra proposta interessante consiste em generalizar o MHIDS considerando tanto a energia Δ como a interação coulombiana dependentes do sítio. Nesse caso, a Hamiltoniana é

escrita na seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 H = & - t \sum_{\langle ij \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) + \sum_i U_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \\
 & + \sum_i (\varepsilon_i - \mu) (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}), \tag{3.7}
 \end{aligned}$$

onde ε_i acoplado ao potencial químico parametriza a diferença de energia nos sítios.

Uma das primeiras consequências da introdução da constante ε_i é, em algumas condições, a restauração da simetria partícula-buraco, pois sob a transformação da Eq.(2.11), a Hamiltoniana torna-se:

$$\begin{aligned}
 H = & - t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + H.c.) + \sum_i U_i \left(\tilde{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \\
 & - \sum_i (\varepsilon_i - \mu) (\tilde{n}_{i\uparrow} + \tilde{n}_{i\downarrow}) - 2 \sum_i (\varepsilon_i - \mu) \tag{3.8}
 \end{aligned}$$

a qual é simétrica quando $\varepsilon_i = 0$ e $\mu = 0$.

No entanto, sob a transformação spin \downarrow partícula-buraco, Equações (2.14) e (2.15), a Hamiltoniana (3.7) torna-se:

$$\begin{aligned}
 H = & - t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + H.c.) - \sum_i U_i \left(\tilde{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \\
 & + \sum_i (\varepsilon_i - \mu) (\tilde{n}_{i\uparrow} - \tilde{n}_{i\downarrow}) + \sum_i (\varepsilon_i - \mu) \quad . \tag{3.9}
 \end{aligned}$$

Quando $\varepsilon_i = \mu = 0$ estaremos na banda semi-cheia e podemos mapear sítios repulsivos ($U > 0$) em sítios atrativos ($U < 0$). Fora da banda semi-cheia, a simetria é restaurada mediante a presença de um campo magnético externo $h = 2\mu$.

A questão da simetria partícula-buraco é importante, uma vez que o comportamento dos buracos em densidades $2 - n$ pode ser obtido do comportamento das partículas em n , isto é, elétrons e buracos com as mesmas energias apresentam os mesmos valores para as grandezas físicas.

Neste trabalho, todas as grandezas serão calculadas na banda semi-cheia ($n = 1$) em uma rede quadrada com padrão tabuleiro de xadrez [32], como

mostrado na Figura 3.8

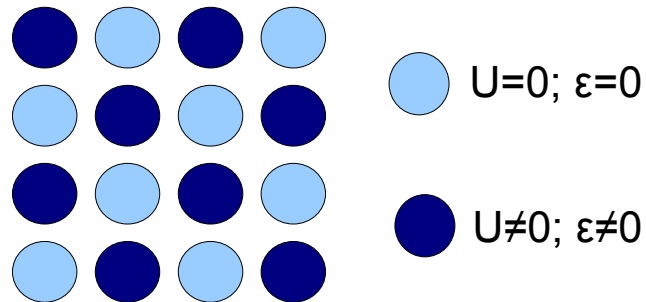


Figura 3.8: Rede quadrada com padrão tabuleiro de xadrez. Os sítios com $U \neq 0$ e $\varepsilon \neq 0$ e $U = 0$ e $\varepsilon = 0$ são atribuídos a átomos de naturezas diferentes.

Este sistema incorpora a inhomogeneidade nas correlações eletrônicas e nos níveis energéticos dos átomos da heteroestrutura, pois metade dos sítios da rede são repulsivos com $U \neq 0$ e $\varepsilon \neq 0$, e a outra metade está livre da correlação com $U = 0$ e $\varepsilon = 0$.

Capítulo 4

Método computacional

A ausência de resultados analíticos para o modelo de Hubbard em mais de uma dimensão é mais um dos motivos para o crescimento das investigações numéricas sobre sistemas finitos. Nesse contexto, as simulações de Monte Carlo Quântico (QMC) possibilitam gerar sistemas relativamente grandes, considerando que os efeitos de tamanho finito diminuem com o aumento do tamanho linear do sistema, L , enquanto que o esforço computacional aumenta com L^d [33].

Os dois principais problemas das simulações de QMC são o sinal do determinante fermiônico e a instabilidade numérica nos cálculos a baixas temperaturas [34]. No entanto, desde que a proposta inicial do algoritmo de QMC que usa o produto de determinantes fermiônicos como peso de Boltzmann foi feita há mais de vinte anos [35], algumas formulações de técnicas de estabilização foram propostas e permitiram atingir temperaturas muito baixas [36, 37].

Nesse método, as interações eletrônicas são substituídas por um campo dependente do espaço e do tempo imaginário. A soma sobre todas as configurações do campo é feita estocasticamente e nos permite calcular correlações estáticas e dinâmicas a uma dada temperatura.

Nas próximas seções vamos revisar alguns aspectos da implementação do algoritmo e da simulação, seguindo a Referência [4], e das aproximações feitas para calcular as grandezas de interesse, a partir dessas funções de correlação [30, 38].

4.1 Monte Carlo Quântico

O método de MCQ é um método numérico que expressa a função de partição

$$Z = \mathcal{T}r e^{-\beta \mathcal{H}}$$

como uma integral de caminho onde β , o inverso da temperatura, é discretizado.

A discretização de β é inserida através da fórmula de decomposição de Suzuki-Trotter [39]

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

onde A e B são operadores que não comutam e $\Delta\tau$ é uma constante real, que é usada para contornar os problemas de comutação entre os operadores dos termos cinético e potencial da Hamiltoniana de Hubbard.

Definindo $\beta = M\Delta\tau$, a decomposição nos leva a reescrever a função de partição gran-canônica como:

$$Z_{\Delta\tau} \simeq \mathcal{T}r \prod_{l=1}^M e^{\Delta\tau \kappa} e^{\Delta\tau \nu},$$

sendo,

$$\kappa = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \quad (4.1)$$

e

$$\nu = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (4.2)$$

Nesse formalismo, interpretamos $\Delta\tau$ como intervalos de tempo imaginário discretos onde, para uma dada temperatura T , teremos M fatias temporais. Numericamente, o tamanho de cada intervalo foi escolhido de forma que $tU(\Delta\tau^2) < 1/10$, a fim de minimizar os erros oriundos dessa decomposição. A decomposição se torna exata no limite em que $\Delta\tau$ tende a zero. Dessa forma introduzimos uma dimensão extra que é o tempo imaginário, onde

mapeamos um sistema quântico em d dimensões em um sistema clássico com $d + 1$ dimensões.

O termo de interação da Hamiltoniana é desacoplado através da transformação de Hubbard-Stratonovich (HS) [40], dada por

$$e^{\frac{1}{2}A^2} = \sqrt{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}x^2 - xA} \quad (4.3)$$

onde A é um operador.

O desacoplamento é feito introduzindo um campo auxiliar x , convenientemente escolhido como sendo proporcional a magnetização local, pois o caráter fermiônico do operador número de partícula em questão implica que $n_{i\sigma}^2 = n_{i\sigma} = 0$ ou 1 , de forma que:

$$e^{-U\Delta\tau n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}} = e^{\frac{U\Delta\tau}{2}m_i^2 - \frac{U\Delta\tau}{2}n_i} \quad (4.4)$$

sendo $m_i \equiv n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}$ a magnetização local, e $n_i \equiv n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ a carga local.

Fazendo a transformação de HS na Eq.(4.4) e discretizando o campo auxiliar em termos das variáveis de spin de Ising (s) através de $\int dx \rightarrow \sum_{s=\pm 1}$ temos:

$$e^{-U\Delta\tau n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} e^{-(\sigma s \lambda + \frac{U\Delta\tau}{2})n\sigma} \quad (4.5)$$

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

Assim, introduzindo uma soma sobre um campo de spins de Ising, deixamos a Hamiltoniana em uma forma quadrática em relação aos operadores de férmions:

$$Z = \left(\frac{1}{2}\right)^{L^d M} \mathcal{T}r_s \prod_{l=1}^M \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} e^{-\Delta\tau \sum_{i,j} c_{i\sigma}^\dagger K_{i,j} c_{j\sigma}} e^{-\Delta\tau \sum_i c_{i\sigma}^\dagger V_i^\sigma(l) c_{i\sigma}}. \quad (4.6)$$

onde os

$$V_i^\sigma(l) = \frac{1}{\Delta\tau} \lambda \sigma_i(l) + \left(\mu - \frac{U}{2}\right) \quad (4.7)$$

são os elementos de uma matriz diagonal $V^\sigma(l)$ de tamanho $N_s \times N_s$ com

configuração de spin σ . Note que embutimos o termo referente ao potencial químico nessa nova definição do termo de interação. O outro termo na exponencial corresponde aos elementos da matriz cinética K .

Tendo escrito a função de partição em uma forma bilinear, podemos simplificá-la calculando o traço fermiônico:

$$\mathcal{T}r_n e^{\sum_\nu -c_\nu^\dagger l_\nu c_\nu} = \mathcal{T}r_n e^{-\sum_\nu n_\nu l_\nu} = \mathcal{T}r_n \prod_\nu e^{-n_\nu l_\nu} \quad , \quad (4.8)$$

onde, usando a identidade $e^{-c_i^\dagger A_{ij} c_j} e^{-c_i^\dagger B_{ij} c_j} = e^{\sum_\nu -c_\nu^\dagger l_\nu c_\nu}$, obtemos finalmente

$$\mathcal{T}r_n \prod_\nu e^{-n_\nu l_\nu} = \prod_\nu (1 + e^{-l_\nu}) = \det (1 + e^{-A} e^{-B}). \quad (4.9)$$

A função de partição pode ser representada como uma soma sobre o produto de duas matrizes que dependem das variáveis de spin:

$$Z = \left(\frac{1}{2}\right)^{L^d M} \mathcal{T}r_s \prod_\sigma [1 + B_M^\sigma B_{M-1}^\sigma \dots B_1^\sigma] \quad (4.10)$$

onde $B_l^\sigma = e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V^\sigma(l)}$ depende das fatias temporais.

Por fim, obtemos a função de partição gran-canônica, expressa como um produto de determinantes fermiônicos [4]

$$Z = \left(\frac{1}{2}\right)^{L^d M} \mathcal{T}r_S \det O^\uparrow(s) \cdot \det O^\downarrow(s) \quad (4.11)$$

sendo que o produto de $O^\sigma(s) \equiv 1 + B_M^\sigma B_{M-1}^\sigma \dots B_1^\sigma$ deve ser positivo, para representar o peso Boltzmann.

Para o modelo de Hubbard na banda semi-cheia, ou seja, na presença da simetria partícula-buraco, caso ao qual nos restringimos aqui, o produto no determinante da Eq.(4.11) é sempre positivo. No entanto, fora deste preenchimento a simetria partícula-buraco é perdida e, particularmente para grandes valores da interação, algumas configurações podem gerar produto de determinantes negativo, o que é conhecido como “o problema do sinal do determinante fermiônico”.

Outro problema é o da instabilidade numérica a baixas temperaturas,

devido principalmente ao fato de que os autovalores da matriz de férmions cresce exponencialmente com o inverso da temperatura. Os vários algoritmos desenvolvidos, a fim de evitar tais problemas, têm uma característica comum fundamentada na separação das escalas de energia diferentes que aparecem na matriz de férmions, por meio de um processo de ortogonalização.

4.2 Simulação

Para iniciar a simulação precisamos informar os parâmetros U e μ (em unidades de t) da Hamiltoniana, a temperatura $T = 1/\beta$ e o tamanho do sistema. Em seguida, geramos uma matriz $S(i, l)$ (o campo de Hubbard-Straftonovich) composto por números ± 1 escolhidos aleatoriamente.

Fixados esses parâmetros, o programa varre a rede espacial (sítios) tentando inverter 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 for invertido ($s_i(l) \rightarrow -s_i(l)$) as matrizes B_i^\uparrow e B_i^\downarrow mudam para um elemento ii , já que a matriz $V_i(l)$ muda. De acordo com a Eq.4.7, essa mudança no elemento de matriz será da seguinte forma:

$$V_i^\sigma(l) = \frac{1}{\Delta\tau} \lambda \sigma_i(l) + \left(\mu - \frac{U}{2} \right), \quad (4.12)$$

que implica em

$$B_i^\sigma \rightarrow [B_i^\sigma]' = B_i^\sigma \Delta_l^\sigma(i), \quad (4.13)$$

onde os elementos da matriz $\Delta_l^\sigma(i)$ são escritos na forma

$$[\Delta_l^\sigma(i)]_{jk} = \delta_{ij} \delta_{ki} \left(e^{2\sigma \Delta\tau \lambda s_i(l)} - 1 \right). \quad (4.14)$$

Cada passo de Monte Carlo é aceito com probabilidade

$$P = \frac{R_\uparrow R_\downarrow}{1 + R_\uparrow R_\downarrow} \quad (4.15)$$

sendo R_{\uparrow} e R_{\downarrow} definidos como

$$R_{\sigma} \equiv \frac{\det O^{\sigma}(\{s\}')}{\det O^{\sigma}(\{s\})} \quad (4.16)$$

onde $\{s\}'$ representa a configuração do novo campo de HS que surge após um spin ser invertido, e $\{s\}$ representa a configuração antiga. Após estes procedimentos, o passo seguinte é tentar inverter o spin de Ising no próximo sítio na mesma fatia temporal.

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

Uma das vantagens em implementar o determinante fermiônico é que podemos expressar, em termos de funções de Green, as médias das variáveis de interesse, tais como funções de correlação corrente-corrente, de spins, etc, usadas na análise das propriedades de transporte e magnetismo, respectivamente. As funções de Green são definidas em função de B_l^{σ} como [4]

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

Porém, é preciso atentar para o fato de que ao aceitamos um passo de Monte Carlo num dado sítio i de uma fatia l , toda a função de Green da fatia l deve ser atualizada de acordo com

$$\bar{g}_l^{\sigma} = g_l^{\sigma} - [1 + (1 - g_l^{\sigma})(\Delta_l - 1)]^{-1}, \quad (4.17)$$

mostrando que essa atualização tem um caráter não-local.

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

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

e, novamente para cada passo aceito, g_l^{σ} tem que ser atualizada de acordo com a Eq.(4.17).

Com esse algoritmo, na ausência de problema de sinal é possível simular

o comportamento de algumas centenas de elétrons a temperaturas β até aproximadamente 20, onde $\beta = M\Delta\tau$. Em termos da temperatura e da largura da banda, isso significa que T é aproximadamente 1/200 da largura da banda ($W = 8t$) do modelo de Hubbard bidimensional. Essa temperatura é baixa o suficiente para se ter correlações magnéticas bem desenvolvidas. Para parâmetros típicos ($t = 1$ e $U = 4$) escolhemos $\Delta\tau = 1/8$, de modo que estes valores de β correspondem a aproximadamente $M = 160$, e a simulação envolve cerca de 10^4 variáveis de Hubbard-Stratonovich.

4.3 Variáveis de interesse

No formalismo de QMC os valores médios das grandezas de interesse são obtidos do cálculo das funções de correlação. Algumas grandezas estão relacionadas diretamente aos valores médios das funções de correlação, como são os casos do momento local e da ocupação nos sítios. Outras grandezas como a condutividade e a densidade de estados, entretanto, podem ser obtidas das funções de correlação com algumas aproximações.

Informações sobre as correlações magnéticas, por exemplo, podem ser extraídas da função de correlação spin-spin definida como

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{3}{4} \langle m_i m_j \rangle, \quad (4.18)$$

sendo S_i e S_j os spins nos sítios i e j , respectivamente. A partir da Eq.(4.18) obtemos os momentos locais $\langle S_i^2 \rangle$ que constituem uma medida do grau de itinerância dos elétrons de um sistema.

Com relação ao ordenamento magnético na rede, podemos calcular o fator de estrutura magnético definido como a transformada de Fourier da função de correlação de spins:

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle S_i S_j \rangle, \quad (4.19)$$

onde \mathbf{R}_i e \mathbf{R}_j são referentes as posições dos spins S_i e S_j respectivamente.

Na transformada, o vetor de onda $\mathbf{q} = 2\pi\mathbf{a}/\lambda$ está relacionado à unidade de repetição de forma que $S(\mathbf{q})$ resulta em uma média do arranjo magnético

relativo entre os spins. O valor máximo do fator de estrutura magnético corresponde ao arranjo magnético dominante.

Como podemos ver, com o auxílio da Figura 4.1, um pico no fator de estrutura magnético quando $\mathbf{q} = (2\pi, 2\pi)$ ou analogamente $\mathbf{q} = (0, 0)$ indica ordenamento ferromagnético e $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ indica ordenamento antiferromagnético.

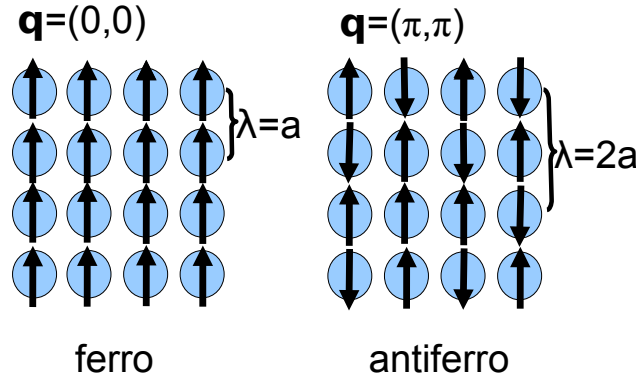


Figura 4.1: Padrão de repetição dos arranjos ferromagnético e antiferromagnético na rede quadrada bidimensional homogênea.

Como o comprimento de correlação varia com a temperatura, em geral o valor do pico no fator de estrutura deve diminuir com o aumento da temperatura. Ademais o valor máximo de $S(\mathbf{q})$ também varia com o comprimento linear do sistema, apresentando um valor constante para temperaturas suficientemente baixas a partir da qual o comprimento de correlação é maior que o tamanho do sistema.

A ocupação nos sítios é calculada como

$$n = \frac{1}{MN} \sum_{i,l} \sum_{\sigma} \langle c_{i\sigma}^{\dagger}(l) c_{i\sigma}(l) \rangle, \quad (4.20)$$

onde $\langle c_{i\sigma}^{\dagger}(l) c_{i\sigma}(l) \rangle = \langle \langle 1 - g_{ii}^{\sigma}(l) \rangle \rangle$, M é o número de fatias temporais e N é o número de sítios na rede.

Para extrair informações sobre a condutividade dc (σ_{dc}) empregamos um procedimento aproximado [38], que permite calcular σ_{dc} a partir da função

de correlação corrente-corrente $\Lambda_{xx}(\mathbf{q}, \tau) = \langle j_x(\mathbf{q}, \tau) j_x(-\mathbf{q}, 0) \rangle$, a qual depende do vetor de onda \mathbf{q} e do tempo imaginário τ . A função de correlação corrente-corrente é escrita em termos do operador densidade de corrente $j_x(\mathbf{i}) = e^{\tau H} j_x(\mathbf{i}) e^{-\tau H}$, cuja parte paramagnética é definida na posição i e direção x , como:

$$j_x(\mathbf{i}, \tau) = it \sum_{\sigma} e^{\tau H} (c_{\mathbf{i}+x, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{i}, \sigma} - c_{\mathbf{i}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{i}+x, \sigma}) e^{-\tau H}. \quad (4.21)$$

Outra quantidade definida a partir deste operador é a função de correlação corrente-corrente no espaço dos momentos:

$$\Lambda_{xx}(\mathbf{q}; i\omega_n) = \sum_{\mathbf{i}} \int_0^{\beta} d\tau \langle j_x(\mathbf{i}, \tau) j_x(0, 0) \rangle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} e^{-i\omega_n \tau}, \quad (4.22)$$

sendo $\omega_n = 2n\pi/\beta$ é a frequência de Matsubara [41] e $\langle \dots \rangle$ denota a média térmica a uma temperatura $T = \beta^{-1}$.

Usando o formalismo geral da teoria de resposta linear, a condutividade dc é definida como:

$$\sigma_{dc}^x = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{Im \Lambda_{xx}(\mathbf{q} = 0; \omega)}{\omega}. \quad (4.23)$$

O primeiro passo da aproximação consiste em relacionar dados de QMC obtidos em termos do tempo imaginário $\Lambda_{xx}(\mathbf{q}, \tau)$ com grandezas em termos da frequência real $\Lambda_{xx}(\mathbf{q}, \omega)$.

Utilizando o teorema da flutuação-dissipação escrevemos a função de correlação corrente-corrente da seguinte forma

$$\Lambda_{xx}(\mathbf{q}; \tau) = \sum_{\mathbf{i}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{e^{-\omega\tau}}{1 - e^{-\omega\tau}} Im \Delta_{xx}(\mathbf{q}; \omega), \quad (4.24)$$

para $0 \leq \tau \leq \beta$.

Como podemos observar na Figura 4.2, quando $\tau = \beta/2$ a função de correlação corrente-corrente é aproximadamente constante.

Assim, se inserirmos esse valor de tempo imaginário na integral, a função que multiplica $Im \Delta_{xx}(\mathbf{q}; \omega)$ efetivamente restringe a integral a baixos valores de ω ; com isso, podemos aproximar $Im \Delta_{xx}(\mathbf{q} = 0; \omega)$ por σ_{dc}^x e resolver a

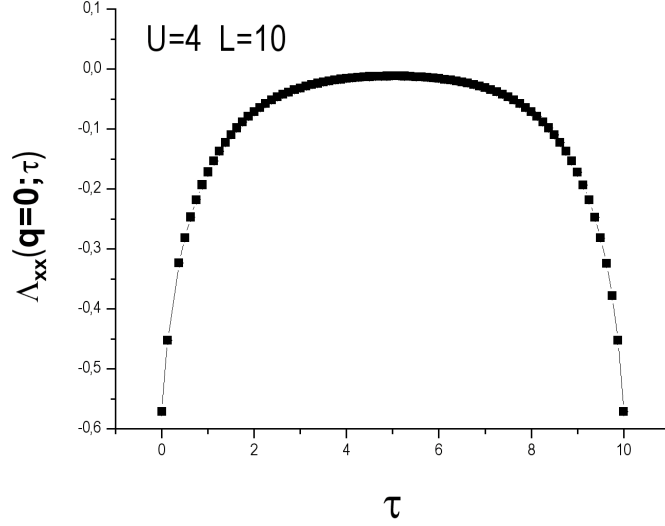


Figura 4.2: Função de correlação corrente-corrente ao longo da direção x como função do tempo imaginário τ para o inverso da temperatura $\beta = 10$ com discretização $\Delta\tau = 0,125$.

integral de frequência analiticamente, a qual resulta em:

$$\Delta_{xx}(\mathbf{q} = 0; \omega = \beta/2) = \frac{\pi}{\beta^2} \sigma_{dc}^x. \quad (4.25)$$

A condutividade dc ao longo da direção x pode então ser calculada usando a função de correlação corrente-corrente em função do tempo imaginário τ como:

$$\sigma_{dc}^x = \frac{\beta^2}{\pi} \Delta_{xx}(\mathbf{q} = 0; \omega = \beta/2) \quad (4.26)$$

no limite em que T é muito menor que a escala de energia na qual $Im\Delta$ se desvia do seu comportamento de baixas frequências.

Outra variável de interesse é a densidade de estados de uma partícula

$$N(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, \omega), \quad (4.27)$$

onde A é a função espectral.

A função espectral, por sua vez, está relacionada com a função de Green

para o tempo imaginário $G(\mathbf{k}, \tau) = -\langle c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(0) \rangle$ através da operação:

$$G(\mathbf{k}, \tau) = -\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-\omega\tau}}{1 - e^{-\omega\tau}} A(\mathbf{k}, \omega). \quad (4.28)$$

Para obter A e posteriormente a densidade de estados devemos fazer uma aproximação para baixas frequências, analogamente a que fizemos para calcular a condutividade. Assim, tomando a transformada de Fourier da Eq.(4.28) e olhando para a função de Green local em $\tau = \beta/2$, obtemos,

$$G(\mathbf{k}, \tau = \beta/2) = -\frac{\pi}{\beta} N(0), \quad (4.29)$$

onde $N(0)$ é a densidade de estados acessíveis no nível de Fermi.

No caso do modelo de Hubbard usual na banda semi-cheia, como mostrado na Figura 4.3, as bandas estão separadas por um *gap* da magnitude de U portanto não existem estados acessíveis no nível de Fermi e o sistema é um isolante.

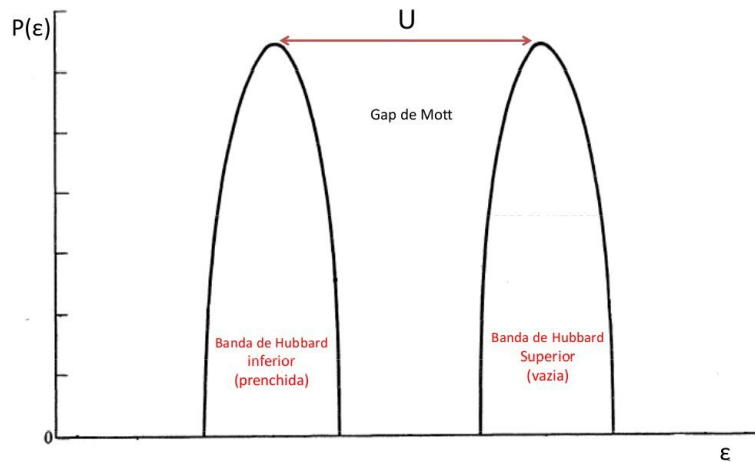


Figura 4.3: Densidade de estado de um isolante de Mott. Banda inferior de Hubbard totalmente preenchida e a superior totalmente vazia [7]

Capítulo 5

Resultados

Neste capítulo apresentaremos os resultados obtidos para o modelo de Hubbard bidimensional na rede quadrada com padrão tabuleiro de xadrez [32]. Como vimos no Capítulo 3, este modelo incorpora a inhomogeneidade nas correlações eletrônicas e a diferença dos níveis energéticos dos átomos. No que se segue, analisaremos os efeitos dessas inhomogeneidades nas propriedades de transporte, na ocupação dos sítios e nas correlações magnéticas do sistema. Em seguida, apresentaremos os resultados que nos possibilitaram elaborar o diagrama de fase do modelo.

Os resultados foram obtidos usando o método de Monte Carlo Quântico (QMC) para o caso específico da banda semi-cheia, para tamanhos de rede que variam de $L = 6$ a $L = 12$ com variáveis de controle U , ε , μ e T parametrizadas pela unidade de *hopping* t . Foram simuladas em média 6 realizações com 4.000 passos de Monte Carlo em cada configuração. O número de passos foi escolhido de forma que o tempo computacional gasto em cada simulação fosse praticável.

Escolhemos simular um número maior de realizações com menos passos de QMC em detrimento do tempo gasto para equilibrar o sistema pois, com essa escolha tem-se sementes independentes e, portanto, menor chance de parar em um mínimo local em todos os programas independentes. O resultado final é uma média aritmética das variáveis de interesse e uma média quadrática dos erros fornecidos em cada realização.

5.1 Propriedades de transporte

Como discutido no Capítulo 3, as inhomogeneidades introduzidas na Hamiltoniana de Hubbard modificam o comportamento das grandezas físicas do sistema. Assim, começaremos mostrando como a diferença na energia atômica modifica o comportamento da condutividade em função da temperatura.

Na Figura 5.1, podemos observar que para $T > 0,5$ o comportamento da condutividade é igual para todos os valores da energia atômica. No entanto, para $T < 0,5$, baixas temperaturas, a condutividade apresenta comportamentos distintos. Para $\varepsilon = 0,5$ e $\varepsilon = 1$ a condutividade aumenta quando

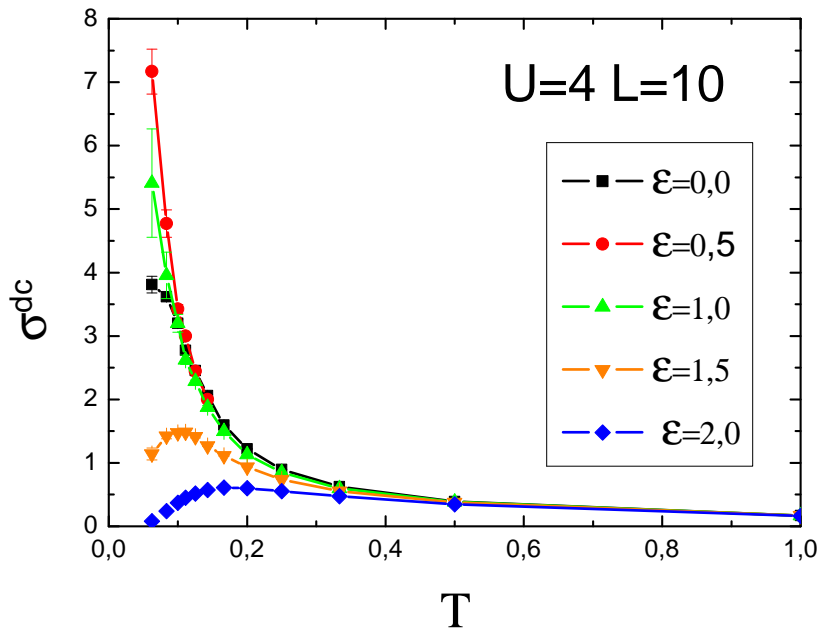


Figura 5.1: Condutividade dc como função da temperatura, para diversos valores da energia atômica na banda semi-cheia.

diminuímos a temperatura ($d\sigma_{dc}/dT < 0$) indicando que o estado fundamental do sistema é metálico. Já para $\varepsilon = 1,5$ e $\varepsilon = 2$ a condutividade diminui quando reduzimos a temperatura ($d\sigma_{dc}/dT > 0$), indicando que o sistema é isolante. No entanto, no caso simétrico, $\varepsilon = 0$, a condutividade parece es-

tabilizar em um valor de σ_{dc} não nulo quando $T \rightarrow 0$. Esse comportamento é característico de um grupo de materiais usualmente chamados de metais pobres. No regime metal pobre a condutividade do sistema responde muito fracamente a variação da temperatura, resultando em σ_{dc} não-nulo no estado fundamental.

O comportamento distinto do estado metal pobre fica mais evidente na Figura 5.2 onde são mostrados, em escala logarítmica, a condutividade em função da temperatura para os regimes metal pobre ($\varepsilon = 0$), metálico ($\varepsilon = 0,5$) e isolante ($\varepsilon = 2$).

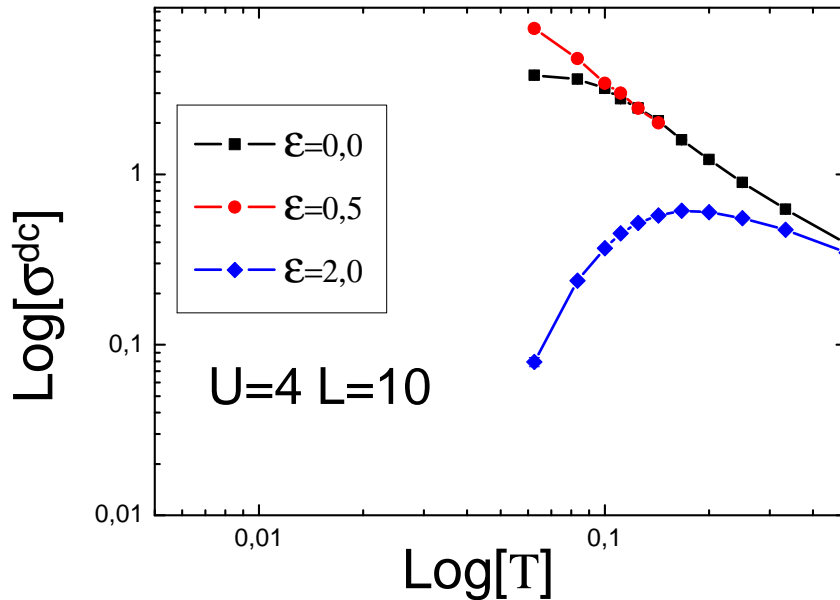


Figura 5.2: Condutividade dc como função da temperatura em escala logarítmica, para os estados metal pobre ($\varepsilon = 0$), metálico ($\varepsilon = 0,5$) e isolante ($\varepsilon = 2,0$) na banda semi-cheia.

Portanto, podemos notar que a presença de correlação eletrônica em uma fração dos sítios é capaz de produzir um estado isolante.

Outra grandeza que contribui para análise dos resultados no que se refere às propriedades de transporte é a densidade de estados acessíveis no nível de Fermi, $N(0)$. Seu comportamento como função da temperatura nos possi-

bilita inferir sobre o estado fundamental do sistema, pois um metal é caracterizado por $N(0) \neq 0$ em $T = 0$, enquanto que para um isolante $N(0) = 0$ em $T = 0$.

Na Figura 5.3 observamos que a densidade de estados no nível de Fermi possui o mesmo comportamento geral da condutividade nos casos $\varepsilon = 0, 5$, $\varepsilon = 1$, $\varepsilon = 1,5$ e $\varepsilon = 2$. Ou seja, no regime metálico $N(0)$ aumenta quando a temperatura vai a zero, e no isolante $N(0)$ tende a zero com a diminuição da temperatura. Para $\varepsilon = 0$ é natural esperar que existam estados acessíveis no nível de Fermi ($N(0) \neq 0$) pois a condutividade é não-nula mesmo a temperaturas muito baixas.

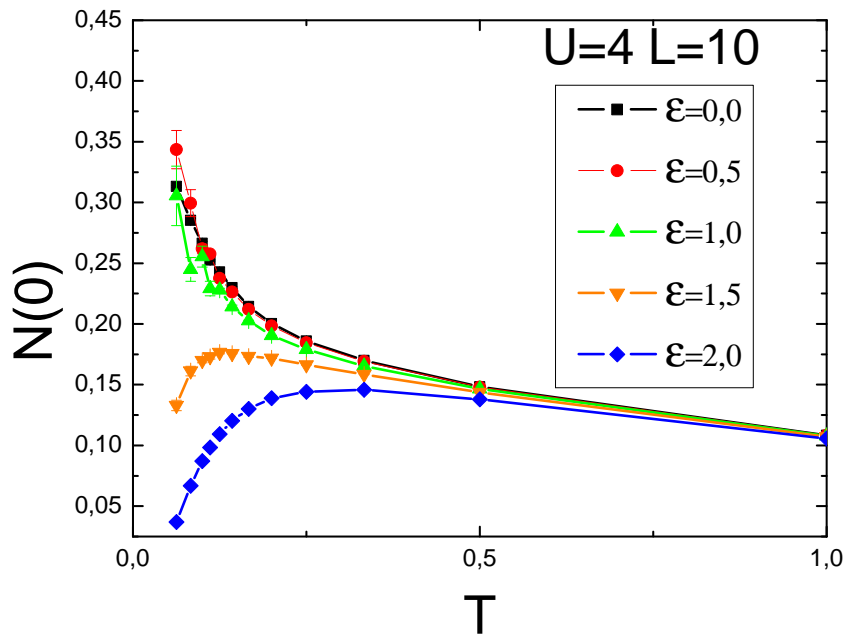


Figura 5.3: Densidade de estados no nível de Fermi como função da temperatura, para diversos valores da energia atômica na banda semi-cheia.

Podemos pensar que a diferença de energia enfraquece a correlação eletrônica, favorecendo a mobilidade dos elétrons pela rede; no entanto, quando essa diferença desaparece, o sistema torna-se isolante .

5.2 Ocupação nos sítios

Assim como acontece nas super-redes magnéticas, a interação dependente do sítio na Hamiltoniana de Hubbard na rede com padrão tabuleiro de xadrez também dá origem a diferentes ocupações nos sítios livres e repulsivos, na banda semi-cheia.

Como podemos ver na Figura 5.4, a densidade eletrônica é igual nos sítios livres e repulsivos apenas em $\varepsilon = 0$, devido à simetria partícula-buraco na banda semi-cheia. Para $\varepsilon \neq 0$, a densidade eletrônica nos sítios livres é sempre maior que nos sítios repulsivos, levando ao aumento da dupla ocupação nos sítios livres de correlação eletrônica. Além disso, conforme diminuimos a

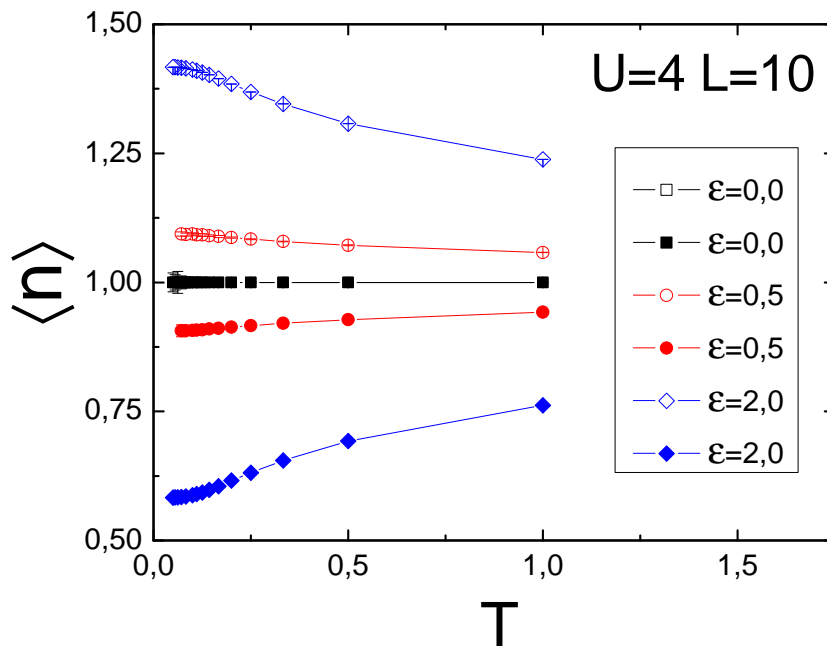


Figura 5.4: Densidade eletrônica como função da temperatura nos sítios livres (pontos vazios) e repulsivos (pontos cheios) na banda semi-cheia.

temperatura, a inclusão do termo de energia atômica dependente da posição favorece a ocupação nos sítios livres. Em baixas temperaturas ($T \sim 0,5$), o estado fundamental isolante parece estar associado ao aumento da dupla ocupação eletrônica nos sítios livres, em detrimento da densidade nos sítios

repulsivos.

Na Figura 5.5, mostramos a ocupação nos sítios em função da correlação eletrônica. Podemos observar que quando o sistema é pouco correlacionado, um pequeno acréscimo na energia atômica ($\varepsilon = 0,5$) diminui a densidade eletrônica nos sítios repulsivos, aumentando a dupla ocupação nos sítios livres. Quando o sistema é fortemente correlacionado, esse mesmo valor da energia atômica implica em uma variação muito pequena na ocupação média dos sítios.

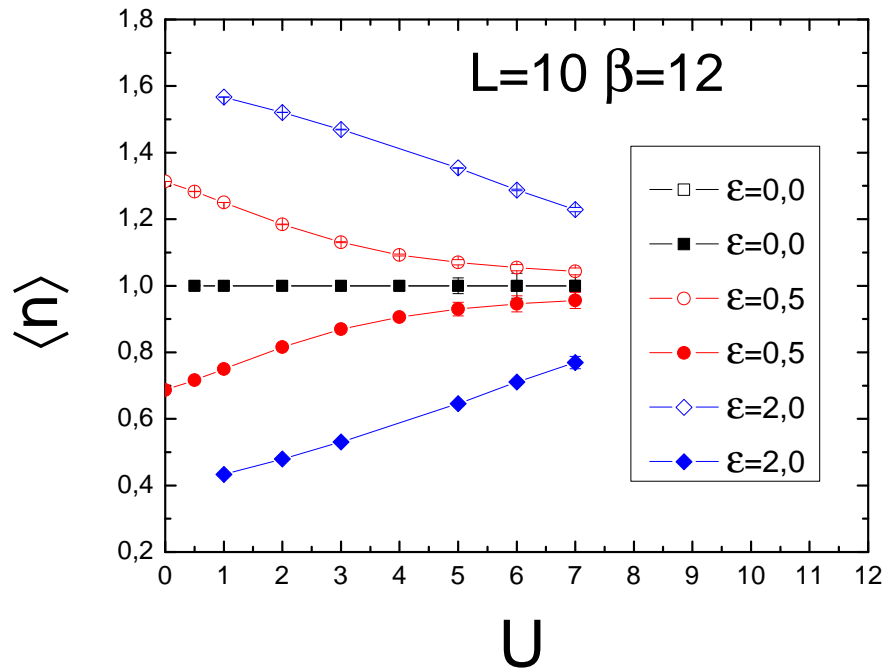


Figura 5.5: Densidade eletrônica como função da correlação eletrônica na banda semi-cheia. Os símbolos vazios representam sítios livres de correlação ($U = 0$) e os cheios representam os sítios repulsivos ($U \neq 0$).

5.3 Correlações magnéticas

Para compreendermos o papel das correlações magnéticas nesses sistemas,

analisaremos a função de correlação spin-spin entre elétrons em um mesmo sítio:

$$\langle S_i^2 \rangle = \langle n_{i\uparrow}^2 \rangle + \langle n_{i\downarrow}^2 \rangle - 2 \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle. \quad (5.1)$$

A Figura 5.6 mostra que, assim como nas super-redes magnéticas, a repulsão Coulombiana dependente da posição (U_i), na heteroestrutura fermiônica com padrão tabuleiro de xadrez, também leva a uma distribuição não-uniforme dos momentos magnéticos. Podemos observar que $\langle S_i^2 \rangle$ diminui quando aumentamos a energia atômica. Para $\varepsilon = 0$ e $\varepsilon = 0,5$ o perfil do momento local muda muito pouco.

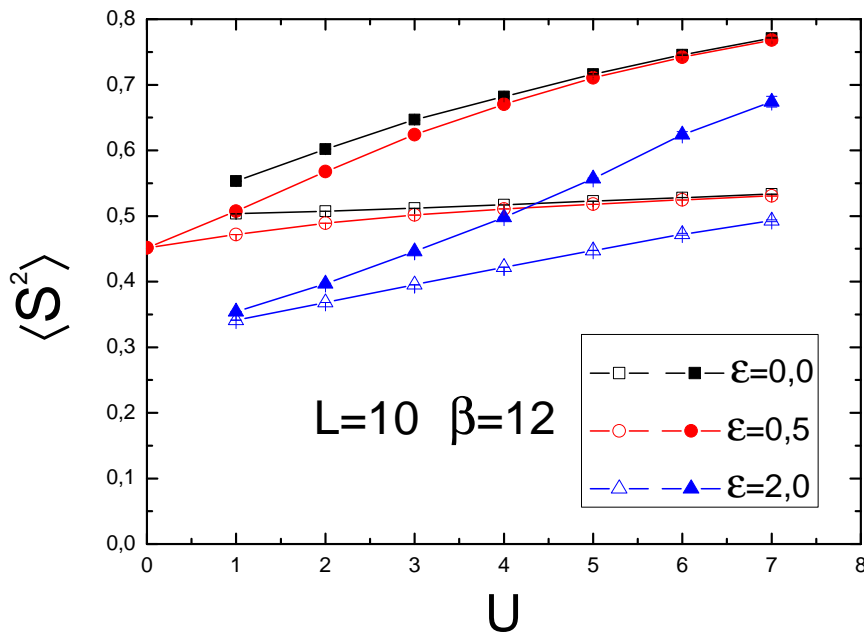


Figura 5.6: Perfil do momento local como função da correlação eletrônica para diferentes valores da energia atômica. Os símbolos vazios representam sítios livres de correlação ($U = 0$) e os cheios representam os sítios repulsivos ($U \neq 0$).

No caso de $\varepsilon = 2$ temos $\langle S_i^2 \rangle$ muito menor devido ao aumento da dupla ocupação nos sítios livres. Nos sítios repulsivos, a dupla ocupação é muito

menos provável e, conseqüentemente, o último termo da Eq.(5.1) contribui muito pouco para a formação de momentos locais. Assim sendo, o máximo do perfil deve ocorrer nos sítios repulsivos.

Como vimos, sistemas homogêneos na banda semi-cheia apresentam um estado fundamental antiferromagnético [21]. No caso do padrão *checkerboard*, observamos a presença de correlações antiferromagnéticas no entanto, como mostra a Figura , a amplitude das oscilações é muito pequena, praticamente não existindo para $\varepsilon \neq 0$. Isso indica que devemos investigar mais cuidadosamente a existência de ordem de longa distância.

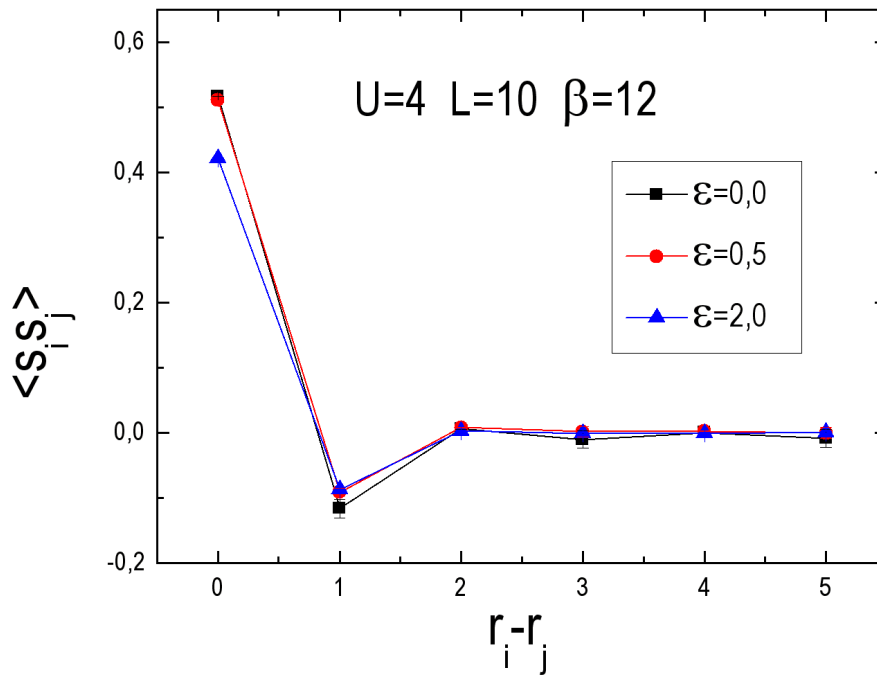


Figura 5.7: Função de correlação magnética no espaço real entre dois spins em uma rede com tamanho linear $L = 10$ e $U = 4$.

No espaço recíproco (q_x, q_y) , o ordenamento magnético pode ser visto em função do pico no fator de estrutura magnético. Dessa forma a Figura 5.8 apresenta os resultados do fator de estrutura como função da correlação ele-

trônica para diferentes valores da energia atômica. Podemos observar que $S(\mathbf{q})$ diminui com ε e aumenta com U , atingindo o valor máximo nos casos em que existe simetria partícula-buraco (Hamiltoniana simétrica). Também podemos observar que o pico no fator de estrutura está localizado em $S(\pi, \pi)$ para todos os valores de ε e U , indicando um possível ordenamento antiferromagnético.

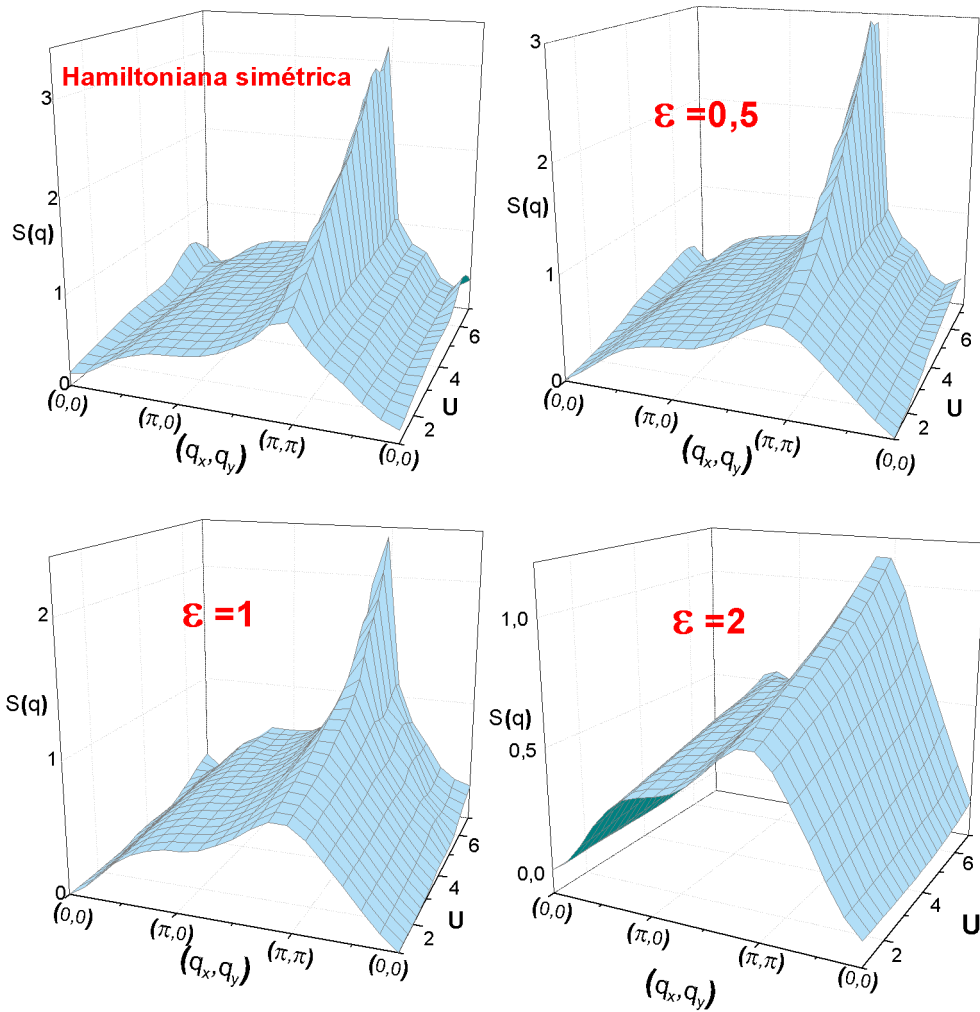


Figura 5.8: Fator de estrutura como função de U e do vetor momento para diferentes valores da energia atômica com $\beta = 16$ na rede 10×10 .

Na Figura 5.9 analisamos o fator de estrutura magnético para três diferentes temperaturas, com $\varepsilon = 0$ e $\varepsilon = 2$. No caso simétrico, observamos que

a intensidade do fator de estrutura magnético em (π, π) cresce a medida que T diminui. No caso em que $\varepsilon = 2$, $S(\mathbf{q})$ é independente de T para todos os valores de \mathbf{q} . Isso sugere um possível ordenamento antiferromagnético apenas para $\varepsilon = 0$.

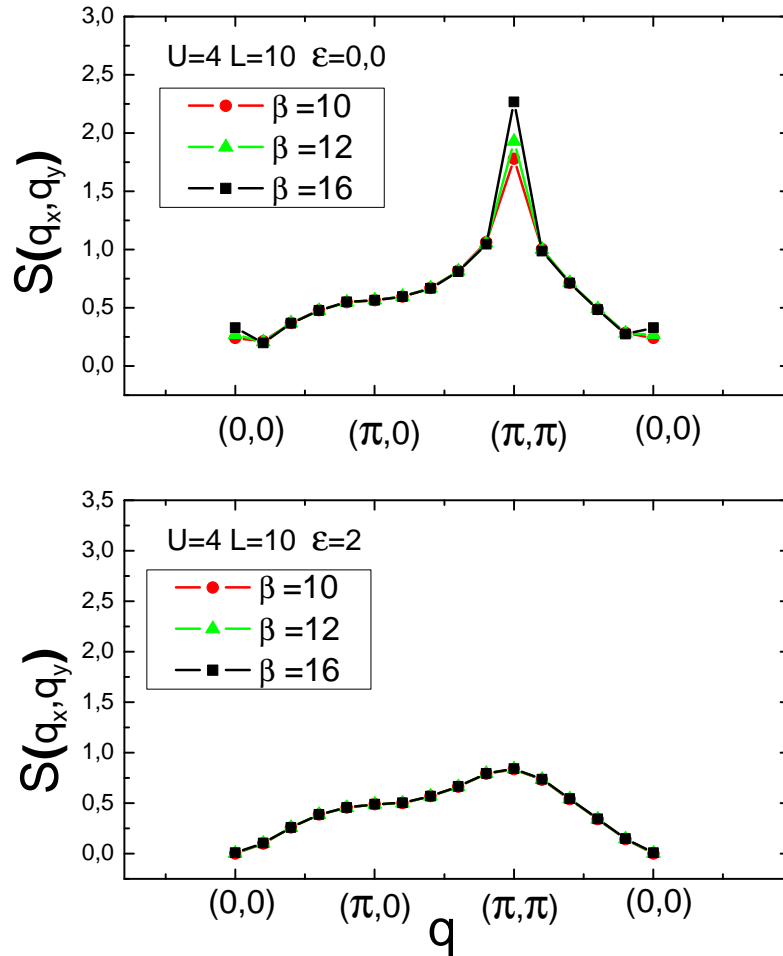


Figura 5.9: Fator de estrutura magnético em uma rede com tamanho linear $L = 10$, $U = 4$, para três diferentes valores da temperatura.

Para verificarmos a robustez deste possível ordenamento, analisemos o comportamento do valor máximo do fator de estrutura, $S(\pi, \pi)$, em função da temperatura e do tamanho da rede. Como mostrado na Figura 5.10,

$S(\pi, \pi)$ tende a se tornar constante a partir de um determinado valor de β acima do qual o crescimento do comprimento de correlação é limitado pelo tamanho do sistema.

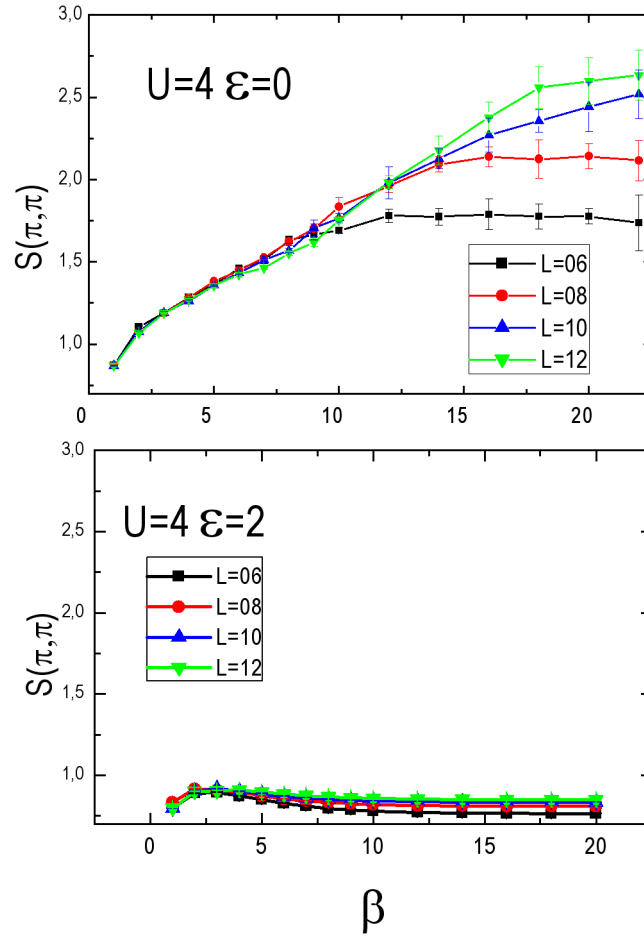


Figura 5.10: Fator de estrutura antiferromagnético em função de β para quatro diferentes tamanhos da rede, $L = 6, 8, 10$ e 12 .

Usando a relação de escala de Huse [42]:

$$\frac{S(\pi, \pi)}{L^2} = \frac{M^2}{3} + \frac{a}{L}, \quad (5.2)$$

onde M é a magnetização da sub-rede, podemos extrair informações quantitativas do parâmetro de ordem no estado fundamental. O valor de $S(\pi, \pi)$ quando $\beta \rightarrow \infty$ é obtido realizando uma estimativa dos seus valores a partir dos pontos em que se torna constante, que nesse caso ocorre a partir de $\beta = 14$. Usando a relação de Huse, realizamos a extrapolação para $L \rightarrow \infty$.

Na Figura 5.11 mostramos $S(\pi, \pi)/L^2$ versus $1/L$ para os diferentes tamanhos de rede, onde as retas foram traçadas por regressão linear para $\varepsilon = 0$ e $\varepsilon = 2$. 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. 5.2. Comparando esta equação, com a equação da reta, obtemos o valor da magnetização da sub-rede é dado por

$$M = \sqrt{3y}, \quad (5.3)$$

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

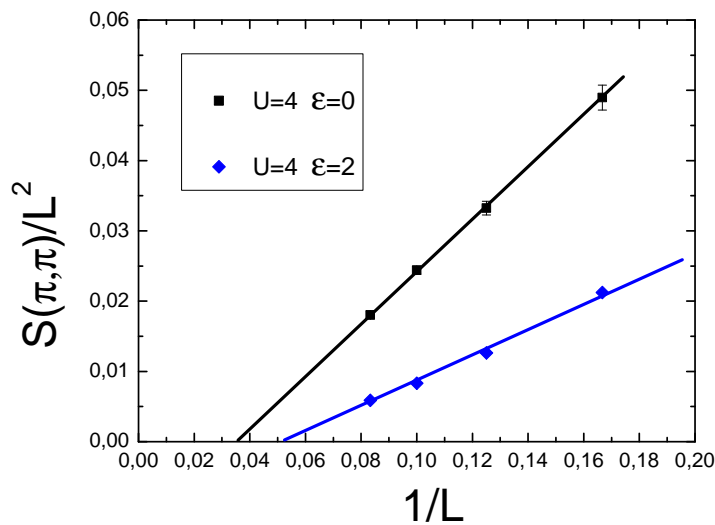


Figura 5.11: *Extrapolação de $S(\pi, \pi)$ para $U = 4$, $\varepsilon = 0$ e $\varepsilon = 2$.*

Podemos observar que, para ambos os valores da energia atômica, as retas não interceptam o eixo vertical em um valor positivo não-nulo, mostrando que o sistema não apresenta magnetização nas sub-redes, portanto não exibe uma fase antiferromagnética, ao menos para $U = 4$.

5.4 Diagrama de fase

Para elaborar o diagrama de fases do modelo de Hubbard na rede quadrada com padrão tabuleiro de xadrez, analisaremos o comportamento da condutividade como função de U , T e ε . A Figura 5.12, por exemplo, apresenta resultados para σ_{dc} com $\varepsilon = 1$ para três diferentes temperaturas. Nela podemos observar que as linhas que descrevem a condutividade em temperaturas diferentes se cruzam na região entre $U = 2,5$ e $U = 3$. Para $U < 2,5$ o sistema é um isolante pois as curvas de condutividade para baixas temperaturas estão acima das de temperatura mais elevada. No entanto, quando $U > 3$, a condutividade aumenta com a redução da temperatura e o sistema se torna metálico.

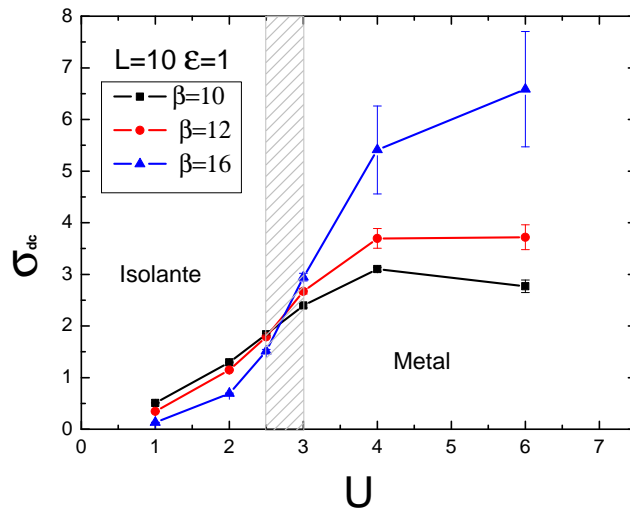


Figura 5.12: Condutividade σ_{dc} na banda semi-cheia como função de U para três diferentes temperaturas, $\beta = 10, 12$ e 16 . A região onde as três linhas se cruzam separa as fases metálica e isolante.

Procedemos com essa análise para uma faixa da energia atômica compreendida entre os casos simétrico ($\varepsilon = 0$) e $\varepsilon = 2$. Os resultados estão mostrados na Figura 5.13, onde podemos observar que a energia atômica modifica o perfil da transição. Conforme aumentamos ε , o ponto em que ocorre a transição é deslocado para valores maiores do U e uma nova fase

isolante aparece em detrimento de outra fase.

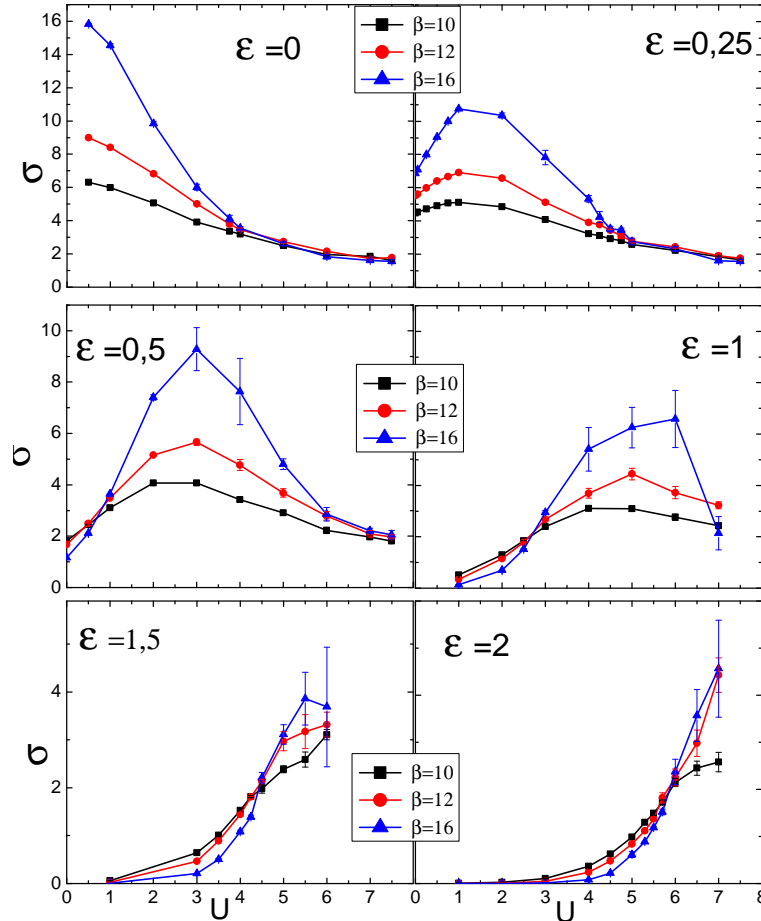


Figura 5.13: Diagrama da condutividade σ_{dc} em função de U para diferentes valores da temperatura, $\beta = 10, 12$ e 16 , e da energia atômica, $\varepsilon = 0, 0,25, 0,5, 1, 1,5$ e 2 .

Esta análise fornece um primeiro esboço das transições na rede tabuleiro de xadrez. Entretanto, para pequenos valores da energia atômica ($\varepsilon = 0, \varepsilon = 0,25$ e $\varepsilon = 0,5$), o fim da fase metálica não é marcado pelo cruzamento das linhas de condutividade, mas por um ponto a partir do qual elas seguem juntas. Como a condutividade independe da temperatura para esses valores de ε e U , ela não pode ser usada com único parâmetro para determinar a natureza do sistema.

Outro problema da análise de σ_{dc} da Figura 5.13 é o aumento das barras

de erro para $U > 5t$ em $\varepsilon = 1$, $\varepsilon = 1,5$ e $\varepsilon = 2$. Portanto, para auxiliar na determinação do caráter de cada fase, analisamos a densidade de estados de uma partícula no nível de Fermi como mostrados na Figura 5.14. Como

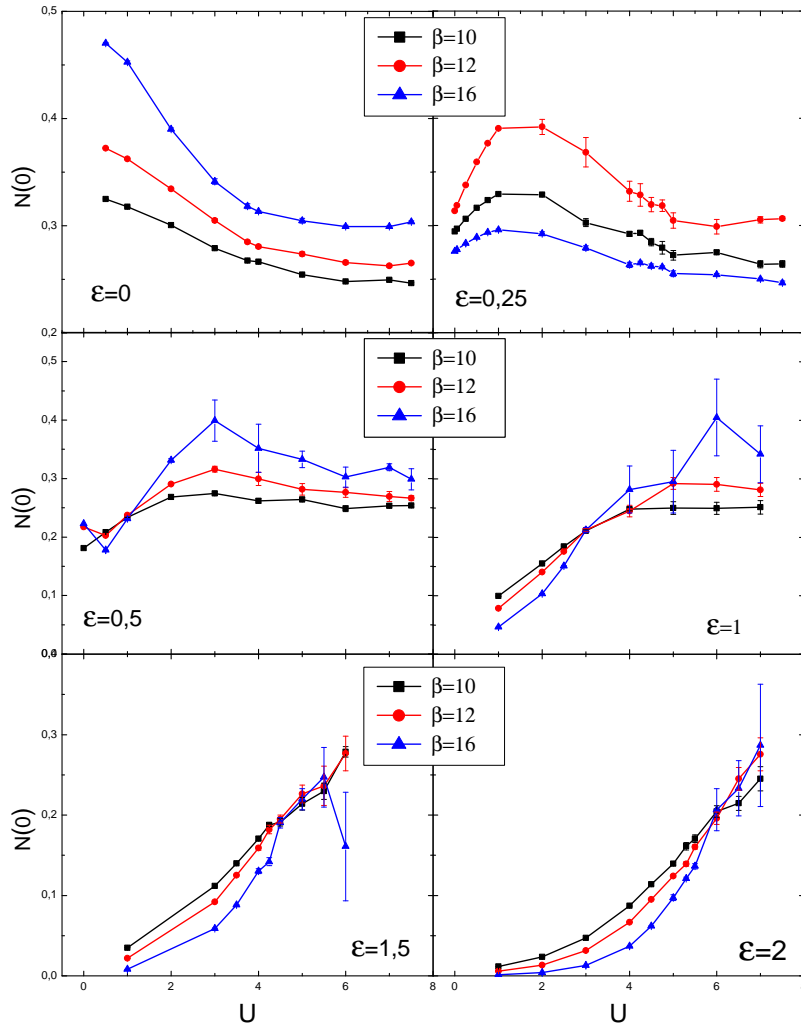


Figura 5.14: Diagrama da densidade de estados em função de U para diferentes valores da temperatura, $\beta = 10, 12$ e 16 , e da energia atômica, $\varepsilon = 0, 0,25, 0,5, 1, 1,5$ e 2 .

podemos ver, para pequenos valores de ε a densidade de estados apresenta resultados diferentes dos da condutividade no que se refere ao fim da fase metálica. Na Figura 5.14, as linhas que correspondem à densidade de estados

em diferentes temperatura não se juntam como acontece na Figura 5.13 com a condutividade. Ao invés disso, elas seguem quase paralelas e praticamente não variam com o aumento de U . Observamos também, que o problema do sinal do determinante fermiônico aparece na Figura 5.14 nas mesmas regiões que na Figura 5.13, regiões estas que indicam a transição metal isolante de Mott.

Analisando o nível do sinal em função de U para $\varepsilon = 1$, $\varepsilon = 1,5$ e $\varepsilon = 2$ (Figura 5.15), observamos que o sinal diminui muito rapidamente com o aumento da correlação eletrônica. Como o sinal atinge um valor muito baixo já em $U \sim 4$ (o que é responsável pelo aumento das barras de erro nas regiões da transição metal isolante de Mott), não temos resultados muito precisos nessas regiões.

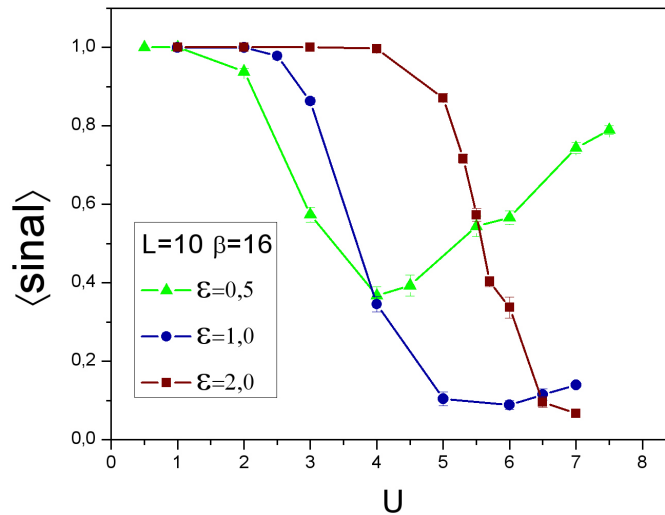


Figura 5.15: Sinal médio do produto dos determinantes fermiônicos como função de U .

Estudos do problema do sinal nas simulações numéricas de sistemas com muitos elétrons mostram [43] que, no caso homogêneo, estes dependem da correlação eletrônica de acordo com:

$$\langle \text{sinal} \rangle \sim e^{\beta N_s U \gamma}, \quad (5.4)$$

onde N_s é o número de sítios e γ e β estão relacionados, respectivamente, à densidade e temperatura. A Figura 5.16 mostra como o sinal se deteriora rapidamente com a redução da temperatura quando aumentamos a correlação eletrônica. Assim, nas nossas simulações atingimos um valor máximo de $U = 8$.

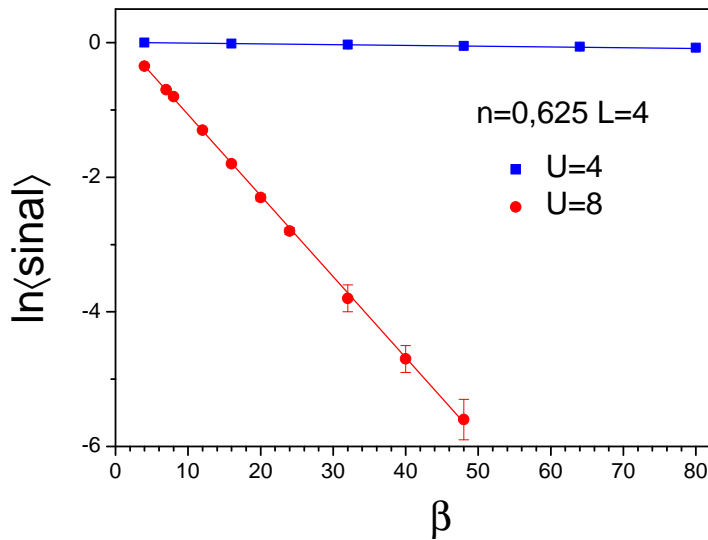


Figura 5.16: O logaritmo da média do sinal do produto de determinantes fermiônicos como função do inverso da temperatura no modelo de Hubbard homogêneo em uma rede de tamanho linear $L=4$ com densidade eletrônica $n = 0,625$. Adaptado da Ref.[43]

Até agora aplicamos o procedimento usado por Paris et al [30] na análise da condutividade e da densidade de estados no nível de Fermi. Observamos que não é possível inferir a natureza do sistema para pequenos valores da energia atômica no limite de acoplamento forte ($U \sim 8$), pois σ_{dc} e $N(0)$ respondem muito fracamente à variação da temperatura nessa região. No caso de $\varepsilon > 1$, a fronteira entre a transição metal isolante de Mott não pode ser precisamente determinada devido ao aumento das barras de erro para $U > 4$.

Dessa forma, um segundo passo na caracterização das possíveis fases na rede tabuleiro de xadrez foi a análise da função de correlação corrente-

corrente, Λ_{xx} , na fronteira entre as transições, onde a condutividade depende fracamente da temperatura.

A expressão da condutividade dc , obtida pela teoria de resposta linear,

$$\sigma_{dc}^x = \frac{\beta^2}{\pi} \Lambda_{xx}(\mathbf{q} = 0; \omega = \beta/2) \quad , \quad (5.5)$$

indica que a condutividade será nula se Λ_{xx} diminuir mais rapidamente que T^2 , e será monotonicamente crescente se Λ_{xx} crescer mais lentamente que T^2 . Assim adotamos a função de correlação corrente-corrente como parâmetro que separa cada uma das fases.

A Figura 5.17 apresenta resultados para a função de correlação corrente-corrente em função da temperatura. Se na região de baixas temperaturas, a

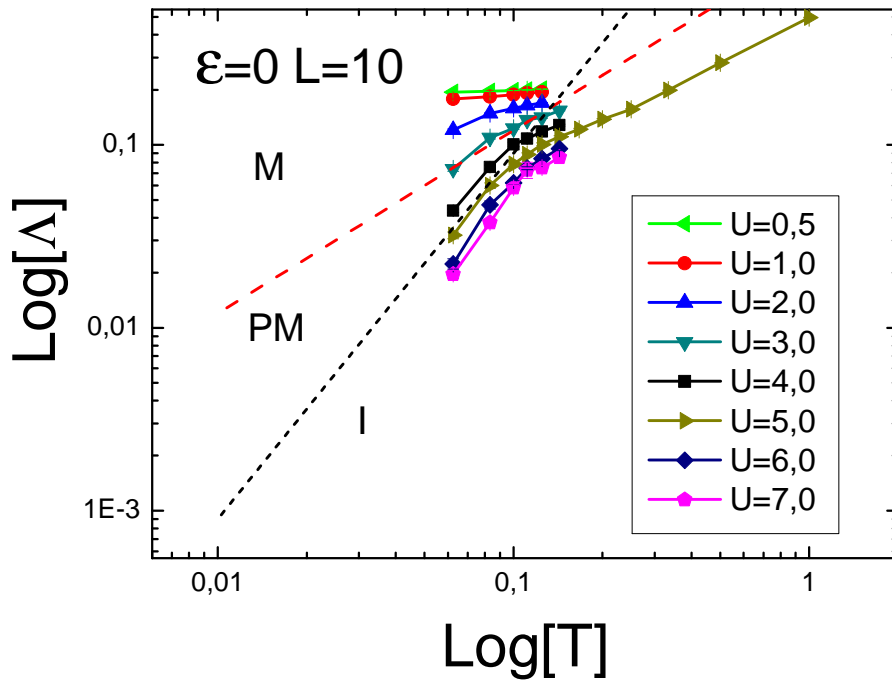


Figura 5.17: Comportamento função de correlação corrente-corrente como função da temperatura em escala logarítmica para diferentes valores da correlação eletrônica. A linha tracejada representa a reta T e a linha pontilhada representa a reta T^2 .

inclinação da curva que representa Λ_{xx} for maior que a da reta T^2 o sistema será isolante. Se a inclinação Λ_{xx} for menor que a da reta T , o sistema será metálico. A região intermediária será um metal pobre, pois a condutividade não se anula e varia muito pouco com a temperatura.

Procedendo dessa maneira, elaboramos o diagrama de fases da Figura 5.18, onde observamos que o sistema se comporta como um metal pobre na região hachurada entre as fases isolante de banda e metálica, para qualquer valor da energia atômica; para baixos valores da energia atômica, a fase metal pobre reaparece, à medida em que U cresce, antes do sistema se tornar um isolante de Mott. O diagrama apresenta fases bem estabelecidas no modelo

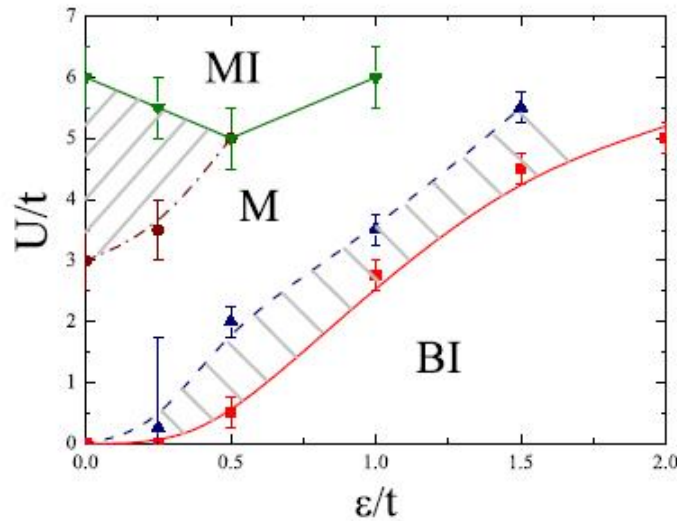


Figura 5.18: Diagrama de fase do modelo de Hubbard bidimensional em uma rede com padrão tabuleiro de xadrez. As siglas BI, M, e MI se referem respectivamente as fases isolante de banda, metal e isolante de Mott. A área hachurada indica a fase metal pobre.

de Hubbard convencional como isolante de banda (BI), metal (M) e isolante de Mott (MI) e também uma nova fase metal pobre. Esse diagrama apresenta algumas diferenças consideráveis em relação ao diagrama de fases do modelo de Hubbard iônico [30]. O comportamento ao longo de $\varepsilon = 0$, por exemplo, é significativamente modificado pela correlação dependente do sítio, pois no caso do modelo de Hubbard iônico o sistema é isolante para qualquer $U \neq 0$.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho investigamos os efeitos das correlações eletrônicas e da energia atômica em uma heteroestrutura fermiônica com padrão tabuleiro de xadrez. Para modelar esse sistema utilizamos a Hamiltoniana simetrizada de Hubbard com interação dependente do sítio [15]. Usamos o método de Monte Carlo Quântico (QMC) para realizar simulações nas redes quadradas, com tamanhos lineares que variam de $L = 6$ até $L = 12$ na banda semi-cheia e extrair informações sobre as propriedades magnéticas e de transporte do sistema.

Devido à simetrização da Hamiltoniana, que condiciona a banda semi-cheia ao potencial químico nulo, as correlações eletrônicas distribuídas com padrão tabuleiro de xadrez implicam em um decréscimo proporcional a $U/2$ no nível de energia dos sítios repulsivos. A introdução da constante $\varepsilon = U/2$ acoplado ao potencial químico corrige a diferença de energia. Na primeira parte do nosso trabalho analisamos como as grandezas de interesse se comportam quando aumentamos ε mantendo $U = 4$.

Para $\varepsilon = 0$, o sistema é condutor e a Hamiltoniana tem simetria partícula-buraco em $\mu = 0$, o que implica na distribuição homogênea de partículas nos sítios livres e repulsivos. Quando aumentamos a energia atômica o sistema passa por uma fase metálica ($\varepsilon = 0,5$), isolante ($\varepsilon = 1,5$) e por uma fase metal pobre ($\varepsilon = 2$). Essas transições mediadas pela diferença no nível de energia dos átomos da heteroestrutura nos motivou a elaborar o diagrama

de fases do modelo em função de ε e U .

Com base no diagrama de fases podemos concluir que, assim como no caso do modelo de Hubbard iônico [16], o modelo de Hubbard com interação dependente do sítio em uma rede tabuleiro de xadrez apresenta as fases isolante de banda, isolante de Mott e uma fase metálica. No entanto, as transições são separadas por uma fase em que a condutividade depende fracamente da temperatura e não se anula no estado fundamental, como acontece nos metais pobres.

Quanto às propriedades magnéticas, pudemos notar que as correlações magnéticas, indicando um possível ordenamento antiferromagnético, são mais intensas quando diminuimos a energia atômica e aumentamos a correlação eletrônica. No entanto o sistema não apresenta magnetização na sub-rede e, portanto, não é antiferromagnético para $U = 4$, que foi o valor da correlação eletrônica investigado. Estimamos que se a fase antiferromagnética existir nesse sistema ela possivelmente só venha a ocorrer acima de $U \sim 6$, quando o sistema entra na fase de isolante de Mott.

Comparando nossos resultados com os obtidos na Ref. [15], na qual os sítios livres estão distribuídos aleatoriamente na rede, podemos concluir que a distribuição regular com padrão tabuleiro de xadrez não favorece o ordenamento magnético.

Bibliografia

- [1] JONES, W.; MARCH, N.H. *Theoretical solid state physics*. London: Wiley-Interscience, 1973.
- [2] YAO, H.; TSAI, W. F.; STEVEN, A. K. Myriad phases of the checkerboard Hubbard model, *Phys. Rev. B*, v. 76, p.161104, 2007.
- [3] KANCHARL, S. S.; DAGOTTO, E.; Correlated Insulated Phase Suggests Bond Order between Band and Mott Insulators in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.* v.98, p.016402, 2007.
- [4] dos SANTOS, R. R. introduction to quantum monte carlo simulation. *Braz. J. Phys.* v.33, p.36 (2003).
- [5] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. R. Soc. (London) A*, v. 276: p. 238-257, 1963.
- [6] HUBBARD, J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. II. The Degenerate Band Case. *Proc. R. Soc. (London) A*, v. 277: p. 237-259, 1969.
- [7] HUBBARD, J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. III. An Improved Solution. *Proc. R. Soc. (London) A*, v. 281: p. 401-419, 1964.
- [8] , ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.* v.109: p. 1492-1505, 1958.
- [9] , MILLIS, A. J. Condensed-matter physics: Stripes of a different stripe. *Nature* v.392: p. 438-439, 1998.

-
- [10] , MILLIS, A. J. Condensed-matter physics: Stripes of a different stripe. *Phys. Rev. B* v.78: p. 165101-165106, 2008.
- [11] JÖRDENS, R.; SOTROHMAIER, N.; GUNTER, K.; MORITZ, H.; ESSLINGER, T. A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice. *Nature*. v. 455: p. 204-207, 2008.
- [12] PETERSON, M. R.; ZANGG, C.; TERWARI, S.; SARMA, S. D.; Realizing the strongly correlated d-Mott state in a fermionic cold atom optical lattice. arXiv:0805.4198v2 [cond-mat.str-el] 9 Oct 2008.
- [13] PAIVA, T.; dos SANTOS, R.R. Magnetism in one-dimensional Hubbard superlattices. *Phys. Rev. B*. v.62, p.7007-7014, 2000.
- [14] PAIVA, T.; dos SANTOS, R.R. Metal-insulator transition in one-dimensional Hubbard superlattices. *Phys. Rev. B*. v.58, p.9607-9610, 1998.
- [15] ULMKE, M.; DENTENEER, P. J. H.; SCALETTAR, R. T. ; ZIMANYI, G. T. Enhancement of long-range antiferromagnetic order by nonmagnetic impurities in the Hubbard model. *Europhys. Lett.* v.42, p.655-660, 1998.
- [16] CRACO, L.; LOMBARDO, P.; HAYAN, R.; JAPARIDZE, G. I.; MÜLLER-HARTMANN, E. Electronic phase transitions in the half-filled ionic Hubbard model. *Phys. Rev. Lett.* v.97, p.046403, 2006.
- [17] CYROT, M. The hubbard hamiltonian. *Physica B+C* v.91, p. 141-150, 1977.
- [18] AUERBACH, A. *Interating electrons and quantum magnetism*. New York: Springer-Verlang, 1994.
- [19] ASHCROFT, N. W.; MERMIN N. D. *Solid State Physics*. Fort Worth: Harcourt Brace College Publishers, 1976.
- [20] ALTLAND, A.; SIMONS, B., *Concepts of theoretical solid state physics*.
-

-
- [21] , HISRSCH, J. E. Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study *Phys. Rev. B.* v.31: p. 4403-4419, 1985.
- [22] LIEB, E. H.; WU, F. Y. Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension. *Phys. Rev. Lett.* v. 20: p. 1445-1448, 1968.
- [23] LONG, M. W. Series on Advances in Statistical Mechanics. In: *Vol.7 THE HUBBARD MODEL: Recent results*. Singapore, New Jersey, London, Hong Kong: Word Scientific, 1991. Cap. 1, p. 1-19.
- [24] dos SANTOS. R. R. Attractive Hubbard model on a triangular lattice. *Phys. Rev. B.* v. 48: p. 3976-3982, 1993.
- [25] WU, Y.; FAN, R.; YANG, P. Block-by-Block Growth of Single-Crystalline Si/SiGe Superlattice Nanowires. *NANO LETTERS* : v.2 p. 83-86, 2001.
- [26] BOJOK, M. T.; OHLSSON, V.; SASS, T.; PERSSON, A. I.; THELANDER, C.; MAGNUSSON, M. H.; DEPPERT, K.; WALLENBERG, L. R.; SAMUELSON, L. One-dimensional Steeplechase for Electrons Realized. *NANO LETTERS* : v.2 p. 87-89, 2002.
- [27] BAIBICH, M. N.; BROTO, J. M.; FERT, A. VAM DAU, F.; NGUYEN; PETROFF, F.; ETIENNE, P.; CREUZET, G.; FRIEDERICH, A.; CHAZELAS, J. Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices. *Phys. Rev. Lett.* v.61, 2472-2475, 1988.
- [28] PARKIN, S. S. P.; BHANDRA, R.; ROCHE, K. P. Oscillatory magnetic exchange coupling through thin copper layers. *Phys. Rev. Lett.* v.66, p.2152-2155, 1991.
- [29] BOUADIM, K. ; PARIS, N.; HÉBERT, F.; BATROUNI, G. G.; SCALETTAR, R. T. Metallic phase in the two-dimensional ionic Hubbard model. *Phys. Rev. B.* v.76, p.085112, 2007.
- [30] PARIS, N.; BOUADIM, K. ; HÉBERT, F.; BATROUNI, G. G.; SCALETTAR, R. T. Quantum Monte Carlo Study of an Interaction-
-

- Driven Band-Insulator to Metal Transition. *Phys. Rev. Lett.* v.98, p.046403, 2007.
- [31] GARG, A.; KRISHNAMURTHY, H. R.; RANDEIRA, R. Can Correlations Drive a Band Insulator Metallic?. *Phys. Rev. Lett.* v.97 p.046403, 2006.
- [32] ARYANPOUR, K.; PAIVA, T.; PICKETT, W. E.; SCALETTAR, R. T. s-wave superconductivity phase diagram in the inhomogeneous two-dimensional attractive Hubbard model, *Phys. Rev. B*, v.76, p.184521, 2007.
- [33] BARBER, M. N.; *PHASE TRANSITIONS*, Vol. 8. London: Academic Press, 1983.
- [34] WHITE, S. R.; SCALAPINO, D. J.; SUGAR, R. L.; LOH, E. Y.; GUBERNATIS, J. E.; SCALETTAR, R. T. Numerical study of two-dimensional Hubbard model *Phys. Rev. B* v.40, p.506-516, 1989.
- [35] BLANKENBECLER, R.; SCALAPINO, D. J.; SUGAR, R. L. Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems. I *Phys. Rev. D* v.24, p.2278, 1981.
- [36] HIRSCH, J. E. Numerical Monte Carlo algorithm for fermion lattice systems at low temperatures *Phys. Rev. B* v.38, p.12023, 1988.
- [37] VARNEY, C. N.; LEE, C.R.; BAI, Z. J.; CHIESA, S.; JARREL, M.; SCALETTAR, R. T. High Precision Quantum Monte Carlo Study of the 2D Fermion Hubbard Model. arXiv:0903.2519v2 [cond-mat.str-el] 12 Jul 2009.
- [38] TRIVEDI, N.; SCALETTAR, R. T.; RANDEIRA, M. Superconductor-insulator transition in a disordered electronic system. *Phys. Rev. B*, v. 54, n. 6, p.R3756-R3759, 1996.
- [39] SUZUKI, M.; *Quantum Monte Carlo Methods*, Solid State Sciences, Vol. 74. Berlin: Springer, 1986.
-

-
- [40] HIRSCH, J.E. Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermions lattice models. *Phys. Rev. B*, v. 28, n. 7, p.4059 1983.
- [41] FETTER, A. L.; WALECKA, J. D. *Quantum Theory of Many Particle Systems*. New York: McGraw-Will, 1971.
- [42] HUSE, D. A.; Ground-state staggered magnetization of two-dimensional quantum Heisenber antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, v.37, p.2380 1988.
- [43] LOH, E. Y; GUBERNATIS, E. J; SCALETTAR, R > T; WHITE, S. R; SCALAPINO, D. J; SUGAR, R. L. Sign problem in the numerical simulation of many-electron systems. *Phys. Rev. B*, v. 41, p.9301, 1990.
-

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](#)